



Università degli Studi di Bari

Corso di Laurea in Fisica

Leonardo Angelini

Appunti di Meccanica Quantistica Parte II

Versione aggiornata al 3 dicembre 2021

Dipartimento Interateneo di Fisica
via Amendola 173, 70126 Bari, Italy
leonardo.angelini@fisica.uniba.it

Indice

| | |
|--|-----------|
| Introduzione | v |
| 1 Somma di momenti angolari | 1 |
| 1.1 Somma di momenti angolari | 1 |
| 1.1.1 Spettro di J^2 e J_z | 2 |
| 1.1.2 Calcolo dei possibili valori di j | 3 |
| 1.1.3 Calcolo dei coefficienti di Clebsch-Gordan | 3 |
| 1.1.4 Generalità sui coefficienti di Clebsch-Gordan | 5 |
| 2 Parità | 7 |
| 2.1 Operatore Parità | 7 |
| 2.2 Trasformazione di operatori sotto Parità | 8 |
| 2.2.1 Conservazione della Parità | 9 |
| 2.2.2 L'esperimento di Madame Wu (1956) | 10 |
| 2.2.3 Relazioni utili | 11 |
| 2.2.4 Parità delle armoniche sferiche | 11 |
| 3 Spin $\frac{1}{2}$ | 13 |
| 3.1 Spin dell'elettrone | 13 |
| 3.1.1 Identità utili | 15 |
| 3.2 Momento di dipolo magnetico | 15 |
| 4 Campo di forza centrale | 17 |
| 4.1 Problema dei due corpi | 17 |
| 4.2 Campo di forza centrale | 18 |
| 4.2.1 Moto in un campo di forza centrale in Fisica Classica | 19 |
| 4.2.2 Operatore impulso radiale | 20 |
| 4.2.3 Equazione di Schrödinger radiale | 23 |
| 4.2.4 Distribuzione radiale di probabilità | 24 |
| 4.2.5 Comportamento delle autofunzioni nell'origine | 24 |
| 4.3 Modelli in 3 dimensioni | 24 |
| 4.3.1 Particella libera | 24 |
| 4.3.2 Particella libera in coordinate sferiche | 25 |
| 4.3.3 Sviluppo delle onde piane in onde sferiche | 26 |
| 4.3.4 Particella in una sfera | 27 |
| 4.3.5 Stati legati di una particella in una buca sferica di potenziale | 28 |
| 4.3.6 Stati legati dell'atomo idrogenoide | 31 |
| 5 Teoria delle Perturbazioni | 37 |
| 5.1 Perturbazioni indipendenti dal tempo | 37 |
| 5.2 Autovalori degeneri | 39 |
| 5.3 Effetto Stark | 42 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5.3.1 | Stato fondamentale | 43 |
| 5.3.2 | Primo stato eccitato | 44 |
| 5.4 | La struttura fine | 45 |
| 5.4.1 | Correzioni all'energia cinetica | 46 |
| 5.4.2 | Interazione spin-orbita | 46 |
| 5.4.3 | Calcolo dei valori di attesa di $\frac{1}{r^n}$ per $n = 1, 2, 3$ negli stati stazionari dell'atomo d'idrogeno. | 47 |
| 5.5 | Perturbazione istantanea | 49 |
| 5.6 | Perturbazioni dipendenti dal tempo | 50 |
| 5.6.1 | Teoria perturbativa al I ordine | 51 |
| 5.6.2 | Perturbazione periodica | 52 |
| 6 | Sistemi di particelle identiche | 55 |
| 6.1 | Principio di indistinguibilità delle particelle identiche | 55 |
| 6.2 | Bosoni e fermioni | 56 |
| 7 | Metodo di Approssimazione WKB | 59 |
| 7.1 | Metodo di Approssimazione WKB | 59 |
| 7.2 | Relazioni di raccordo | 61 |
| 7.2.1 | Autofunzioni dell'equazioni di Schrödinger per il potenziale lineare | 61 |
| 7.2.2 | Ritorno alle relazioni di raccordo | 63 |
| 7.3 | Quantizzazione di Bohr-Sommerfeld | 66 |
| 7.3.1 | Esercizi | 67 |
| 7.4 | Trasmissione attraverso una barriera di potenziale | 73 |
| 7.4.1 | Esercizi | 75 |
| 7.4.2 | Applicazione al decadimento α | 77 |
| 8 | Metodo Variazionale | 81 |
| 8.1 | Basi matematiche del Metodo Variazionale | 81 |
| 9 | Teoria della Diffusione | 83 |
| 9.1 | Introduzione | 83 |
| 9.2 | Calcolo della sezione d'urto in Meccanica Classica | 84 |
| 9.2.1 | Diffusione da una sfera dura | 84 |
| 9.2.2 | Diffusione da potenziale coulombiano | 85 |
| 9.3 | La diffusione in Meccanica Quantistica | 88 |
| 9.4 | Diffusione di un Pacchetto d'onda | 88 |
| 9.5 | Funzioni di Green | 91 |
| 9.6 | Approssimazione di Born | 95 |
| 9.7 | Esercizi sull'approssimazione di Born | 96 |
| 9.7.1 | Potenziale di Yukawa e potenziale coulombiano | 96 |
| 9.7.2 | Potenziale gaussiano | 97 |
| 9.7.3 | Scattering da sfera opaca | 97 |
| 9.8 | Onde parziali e sfasamenti | 99 |
| 9.9 | Determinazione degli sfasamenti. | 102 |
| 9.10 | Risonanze e stati metastabili | 105 |
| 9.11 | Relazione tra risonanze e stati legati | 107 |
| 9.12 | Scattering da sfera dura | 110 |
| 9.13 | Diffusione da potenziale coulombiano | 111 |

| | |
|---|------------|
| 10 Appendice | 115 |
| 10.1 Coordinate sferiche | 115 |
| 10.2 Armoniche Sferiche | 116 |
| 10.2.1 Definizione | 116 |
| 10.2.2 Relazione di ricorrenza | 117 |
| 10.2.3 Teorema di Somma | 117 |
| 10.2.4 Le prime Armoniche Sferiche | 117 |
| 10.3 Funzioni di Bessel | 117 |
| 10.3.1 Funzioni di Bessel sferiche di I e II specie | 117 |
| 10.3.2 Funzioni di Hankel sferiche | 118 |
| 10.4 Polinomi di Laguerre | 119 |
| 10.5 Integrali di uso frequente | 119 |
| 10.5.1 Integrali Gaussiani | 119 |
| 10.5.2 Integrali con funzioni esponenziali | 120 |

Introduzione

Queste dispense, relative ad alcune parti del mio corso di Istituzioni di Fisica Teorica II, costituiscono una risorsa ufficiale in sostituzione dei numerosi appunti redatti da volenterosi che circolano tra gli studenti. Il testo base adottato nel corso è il Nardulli [1]. Tuttavia, poiché mi sono a volte allontanato da questa trattazione, spesso utilizzando più libri, mi è sembrato utile stendere questi appunti per facilitare la preparazione dell'esame. Sottolineo il fatto che essi non contengono trattazioni originali ed indicherò di volta in volta la fonte.

Come dicevo, queste dispense hanno lo scopo di rendere più semplice la preparazione dell'esame; raccomando, tuttavia, la consultazione dei testi originali per vari motivi. Citandone solo alcuni, il primo è che un libro di testo è preparato con molta più cura di una dispensa, il secondo è che la capacità di consultazione di più testi è parte insostituibile della formazione universitaria e, infine, che in una trattazione vi possono essere elementi formativi che in un'altra possono essere stati sottovalutati o poco evidenziati.

Non posso credere nemmeno per un attimo che Dio giochi a dadi.
(A. Einstein - comunicazione orale)

Piantala di dire a Dio che cosa fare con i suoi dadi.
(N. Bohr - comunicazione orale)

Non solo Dio gioca a dadi, ma li getta laddove non possiamo vederli.
(S. Hawking - comunicazione orale)

Penso di poter affermare che nessuno capisce la Meccanica Quantistica.
(R.P. Feynman - comunicazione orale)

Capitolo 1

Somma di momenti angolari

Bibliografia: Nardulli ([1]).

1.1 Somma di momenti angolari

Consideriamo un sistema fisico nel quale sono presenti due momenti angolari \vec{J}_1 e \vec{J}_2 . Essi possono essere i momenti angolari orbitali di due particelle distinte oppure, poiché, come si è visto, una particella è dotata di spin, può trattarsi dello spin e del momento angolare della stessa particella. In ogni caso si tratta di momenti angolari indipendenti, per i quali, vale, ad esempio,

$$[J_{1,k}, J_{2,\ell}] = 0 \quad \text{con } k, \ell = 1, 2, 3.$$

Per tale sistema possiamo introdurre il **momento angolare totale**:

$$\vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2.$$

L'introduzione del momento angolare totale è utile, come vedremo in seguito, per trattare alcuni sistemi fisici complessi; vediamone le ragioni. Per un sistema come quello che stiamo considerando la scelta naturale della base da utilizzare è quella degli autoket comuni agli operatori

$$J_1^2, J_2^2, J_{1,z}, J_{2,z}. \quad (1.1)$$

Infatti questi operatori sono compatibili, dato che \vec{J}_1 e \vec{J}_2 sono collegati a gradi di libertà indipendenti. Se l'Hamiltoniano del sistema è invariante per rotazioni, anche esso è compatibile con i suddetti operatori e tutte queste quantità sono conservate. Se, tuttavia, esiste, come vedremo, un'interazione tra i momenti angolari questo può non essere più realizzato. Consideriamo, ad esempio, l'interazione

$$\mathcal{H} = -\alpha \vec{J}_1 \cdot \vec{J}_2,$$

interazione che tende ad allineare i momenti angolari; in questo caso l'hamiltoniano dipende da tutte le componenti di \vec{J}_1 e \vec{J}_2 e, pertanto, non commuta più con $J_{1,z}$ e $J_{2,z}$. Notiamo, però, che esso si può riscrivere nella forma

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \alpha (J^2 - J_1^2 - J_2^2).$$

Possiamo quindi arguire che un nuovo sistema di variabili compatibili è dato, in questo caso, dall'hamiltoniano e da

$$J_1^2, J_2^2, J^2, J_z. \quad (1.2)$$

In questo capitolo vedremo lo spettro del momento angolare totale e come si passa dalla base (1.1) alla base (1.2).

¹che questi operatori siano tra di essi compatibili, deriva dal fatto che J^2 e J_z dipendono da operatori che commutano con J_1^2 e J_2^2 .

1.1.1 Spettro di J^2 e J_z

Fissiamo prima la notazione. Per semplicità supponiamo che non esistano altre variabili al di fuori di quelle di momento angolare.

Poiché \vec{J}_1 e \vec{J}_2 sono dei momenti angolari, essi hanno le solite proprietà di commutazione

$$[J_i^2, J_{i,z}] = 0, \quad [J_{i,k}, J_{i,\ell}] = i\hbar \epsilon_{k,\ell,m} J_{i,m}$$

con $i = 1, 2$, mentre le componenti cartesiane sono indicate con $k, \ell, m = 1, 2, 3$. Scriviamo inoltre le equazioni agli autovalori per questi operatori:

$$\begin{aligned} J_i^2 |j_i, m_i\rangle &= j_i(j_i + 1)\hbar^2 |j_i, m_i\rangle \quad \text{con } j_i = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \\ J_{i,z} |j_i, m_i\rangle &= m_i\hbar |j_i, m_i\rangle \quad \text{con } m_i = -j_i, -j_i + 1, \dots, j_i - 1, j_i \end{aligned}$$

Il sistema ortonormale completo relativo agli operatori (1.1) tramite prodotto tensoriale

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$$

e sottende, per ogni fissata coppia (j_1, j_2) , uno spazio di Hilbert di dimensione

$$D = (2j_1 + 1)(2j_2 + 1). \quad (1.3)$$

È facile vedere che il momento angolare totale \vec{J} gode delle proprietà di commutazione di un momento angolare. Infatti, usando le proprietà dei commutatori,

$$\begin{aligned} [J^2, J_x] &= [(\vec{J}_1 + \vec{J}_2)^2, J_{1,x} + J_{2,x}] = [J_1^2 + J_2^2 + 2(J_{1,x}J_{2,x} + J_{1,y}J_{2,y} + J_{1,z}J_{2,z}), J_{1,x} + J_{2,x}] = \\ &= [2(J_{1,y}J_{2,y} + J_{1,z}J_{2,z}), J_{1,x} + J_{2,x}] = \\ &= 2([J_{1,y}, J_{1,x}]J_{2,y} + [J_{1,z}, J_{1,x}]J_{2,z} + J_{1,y}[J_{2,y}, J_{2,x}] + J_{1,z}[J_{2,z}, J_{2,x}]) = \\ &= 2(-i\hbar J_{1,z}J_{2,y} + i\hbar J_{1,y}J_{2,z} - i\hbar J_{1,y}J_{2,z} + i\hbar J_{1,z}J_{2,y}) = 0, \end{aligned}$$

che può essere ripetuta per le altre componenti \vec{J} . Infine

$$\begin{aligned} [J_k, J_\ell] &= [J_{1,k} + J_{2,k}, J_{1,\ell} + J_{2,\ell}] = [J_{1,k}, J_{1,\ell}] + [J_{2,k}, J_{2,\ell}] = \\ &= i\hbar \epsilon_{k,\ell,m} J_{1,m} + i\hbar \epsilon_{k,\ell,m} J_{2,m} = i\hbar \epsilon_{k,\ell,m} J_m \end{aligned}$$

Per questo possiamo affermare che, anche per \vec{J} , valgono le equazioni agli autovalori

$$J^2 |j, m\rangle = j(j + 1)\hbar^2 |j, m\rangle \quad \text{con } j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots \quad (1.4)$$

$$J_z |j, m\rangle = m\hbar |j, m\rangle \quad \text{con } m = -j, -j + 1, \dots, j - 1, j \quad (1.5)$$

Indichiamo la base del nuovo sistema di variabili compatibili (1.2) con il simbolo

$$|j_1, j_2, j, m\rangle$$

e supponiamo di fissare i valori di j_1 e j_2 . Esiste una trasformazione unitaria che consente di esprimere i ket della nuova base in termini degli autoket del vecchio set di variabili compatibili (1.1):

$$|j_1, j_2, j, m\rangle = \sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle. \quad (1.6)$$

I prodotti scalari $\langle j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, j, m\rangle$ sono detti coefficienti di Clebsh-Gordan.

Notiamo che:

- poiché $J_z = J_{1,z} + J_{2,z}$, la somma nella (1.6) è ristretta ai valori di (m_1, m_2) tali che $m_1 + m_2 = m$;
- a fissati j_1 e j_2 , la dimensione del sottospazio di Hilbert è fissata da (1.3); pertanto, i valori che può assumere j sono limitati e vincolati da j_1 e j_2 .

1.1.2 Calcolo dei possibili valori di j

Calcoliamo prima il **massimo valore assunto da \mathbf{j}** , j_{max} . Sia $j = j_{max}$. Il massimo valore di m è $m_{max} = j = j_{max}$; ma $m_{max} = m_{1,max} + m_{2,max} = j_1 + j_2$, quindi $j_{max} = j_1 + j_2$. Inoltre nella trasformazione (1.6) sopravvive un unico termine della sommatoria e abbiamo

$$|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j\rangle = |j_1, j_2, m_1 = j_1, m_2 = j_2\rangle$$

Mostriamo ora che $\mathbf{j}_{max} - \mathbf{1} = \mathbf{j}_1 + \mathbf{j}_2 - \mathbf{1}$ è un **altro possibile valore di \mathbf{j}** . Consideriamo, infatti, il valore di $m = m_{max} - 1 = j_1 + j_2 - 1$. Nella vecchia base esistono solo due ket tali che $m_1 + m_2 = j_1 + j_2 - 1$; essi sono

$$|j_1, j_2, m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2\rangle \quad \text{e} \quad |j_1, j_2, m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1\rangle. \quad (1.7)$$

Il sottospazio corrispondente a $m = j_1 + j_2 - 1$ ha, dunque, dimensione 2. Anche nella nuova base per questo valore di m devono esistere due ket indipendenti. Relativamente al valore di j già trovato, $j_{max} = j_1 + j_2$, c'è soltanto il ket

$$|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = j - 1\rangle.$$

Occorre pertanto considerare anche il valore $j = j_{max} - 1 = j_1 + j_2 - 1$ per il quale esiste il ket

$$|j_1, j_2, j = j_1 + j_2 - 1, m = j\rangle.$$

Ciascuno di questi due ket è combinazione lineare dei due ket della vecchia base (1.7) con coefficienti di Clebsh-Gordan che per ora lasciamo indeterminati.

Il procedimento può essere iterato per $j_{max} - 2 = j_1 + j_2 - 2$ e così via. In linea di principio il minimo valore j dovrebbe essere 0; tuttavia verificheremo che questo avviene solo in casi particolari, dato che il valore minimo di j deve tener conto della dimensionalità del sottospazio (1.3).

Determiniamo, quindi, il **minimo valore possibile di \mathbf{j}** , che chiamiamo \mathbf{j}_{min} . Imponiamo che il numero complessivo di autoket sia lo stesso per entrambe le basi. Ricordando che ciascun valore di j è degenero $2j + 1$ volte, abbiamo:

$$\begin{aligned} (2j_1 + 1)(2j_2 + 1) &= \sum_{j=j_{min}}^{j_1+j_2} (2j + 1) = \frac{j_1 + j_2 - j_{min} + 1}{2} (2j_1 + 2j_2 + 1 + 2j_{min} + 1) \\ 4j_1j_2 + 2j_1 + 2j_2 + 1 &= (j_1 + j_2 + 1)^2 - j_{min}^2 \\ j_{min}^2 &= (j_1 + j_2)^2 - 4j_1j_2 = (j_1 - j_2)^2 \\ j_{min} &= |j_1 - j_2| \end{aligned}$$

Possiamo quindi concludere che lo spettro di

$$J^2 = \left(\vec{J}_1 + \vec{J}_2\right)^2$$

è dato da

$$\hbar^2 j(j + 1) \quad \text{con} \quad j = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$$

1.1.3 Calcolo dei coefficienti di Clebsh-Gordan

Fissando in maniera opportuna le fasi dei ket di base, è possibile considerare reali tutti i coefficienti di Clebsh-Gordan.

Non è possibile dare un'espressione compatta per tutti i coefficienti, ma occorre calcolarli caso per caso. A tal fine consideriamo la relazione già vista

$$J_{\pm}|j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} |j, m \pm 1\rangle.$$

Ad esempio, se consideriamo l'operatore di innalzamento J_+ , esso opera sui ket della nuova base nel seguente modo

$$J_+|j_1, j_2, j, m\rangle = \hbar\sqrt{(j - m)(j + m + 1)} |j_1, j_2, j, m + 1\rangle,$$

mentre opera sui ket della vecchia base secondo

$$\begin{aligned} J_+ (|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle) &= (J_{1,+} \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1 \otimes J_{2,+}) |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = \\ &= \hbar \sqrt{(j_1 - m_1)(j_1 + m_1 + 1)} |j_1, m_1 + 1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle + \\ &+ \hbar \sqrt{(j_2 - m_2)(j_2 + m_2 + 1)} |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2 + 1\rangle. \end{aligned}$$

Poiché, per il valore di $m = m_{min} = -|j_1 - j_2|$, come avviene per $m = m_{max} = j_1 + j_2$, esistono un solo ket della vecchia base e un solo ket della nuova base,

$$|j_1, j_2, j = j_1 + j_2, m = -(j_1 + j_2)\rangle = |j_1, j_2, m_1 = -j_1, m_2 = -j_2\rangle,$$

operando su ambo i membri di questa relazione con gli opportuni operatori di innalzamento, possiamo costruire le relazioni tra ket della nuova base e ket della vecchia. (Ovviamente potremmo operare con l'operatore J_- sui ket corrispondenti a m_{min} .) Per esemplificare il metodo, applichiamo l'algoritmo appena descritto al seguente esempio.

Calcolo dei coefficienti di Clebsh-Gordan per $j_1 = \frac{1}{2}, j_2 = \frac{1}{2}$

Per avere una notazione più agile, poiché j_1 e j_2 sono fissati, indichiamo i ket della vecchia base semplicemente con $|m_1, m_2\rangle$ e i ket della nuova base con $|j, m\rangle$.

I possibili valori di j sono $j = 0$ e $j = 1$. Consideriamo il valore massimo di j , cioè $j = 1$. Immediatamente possiamo determinare il ket della nuova base per questo valore di j , relativo al valore massimo di m , $m = 1$:

$$|j = 1, m = 1\rangle = \left| m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \right\rangle$$

e quello relativo al valore minimo di m , $m = -1$:

$$|j = 1, m = -1\rangle = \left| m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle.$$

Applichiamo ad entrambi i lati di quest'ultima relazione l'operatore di innalzamento. Per il lato sinistro abbiamo

$$J_+ |j = 1, m = -1\rangle = \hbar \sqrt{2} |j = 1, m = 0\rangle,$$

mentre per il lato destro:

$$(J_{1,+} \otimes \mathbb{I}_2 + \mathbb{I}_1 \otimes J_{2,+}) \left| m_1 = -\frac{1}{2} \right\rangle \otimes \left| m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle = \hbar \left(\left| m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Uguagliando le due espressioni si ottiene

$$|j = 1, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle + \left| m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

Abbiamo così ottenuto i tre stati (tripletto) corrispondenti a $j = 1$. Per ottenere l'unico stato (singoletto) corrispondente a $j = 0$, occorre perfezionare l'algoritmo sopra descritto, dato che la semplice applicazione di J_+ non consente di cambiare valore di j . Lo stato con $m = 0$ è combinazione di **due** ket della vecchia base; deve, quindi, esistere un altro ket della nuova base combinazione lineare degli stessi due vettori, ma ortogonale al ket $|j = 1, m = 0\rangle$. Si tratta del ket che cerchiamo:

$$|j = 0, m = 0\rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2}} \left| m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle + \frac{\beta}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2}} \left| m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \right\rangle$$

Imponendo che questo ket sia ortogonale a $|j = 1, m = 0\rangle$, si ottiene $\alpha = -\beta$, e, in definitiva,:

$$|j = 0, m = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left| m_1 = \frac{1}{2}, m_2 = -\frac{1}{2} \right\rangle - \left| m_1 = -\frac{1}{2}, m_2 = \frac{1}{2} \right\rangle \right)$$

1.1.4 Generalità sui coefficienti di Clebsh-Gordan

Mantenendo sempre la notazione abbreviata, possiamo dire che i coefficienti di Clebsh-Gordan

$$\langle m_1, m_2 | j, m \rangle$$

costituiscono una matrice di trasformazione che consente di passare dalla base $|m_1, m_2\rangle$ alla base $|j, m\rangle$. Sappiamo che la matrice deve essere unitaria, anzi ortogonale, visto che i suoi elementi sono reali. Questa proprietà crea utili relazioni tra i coefficienti:

$$\langle m_1, m_2 | j, m \rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} \langle -m_1, -m_2 | j, -m \rangle.$$

Notiamo, inoltre, che la relazione tra le due basi può essere invertita:

$$|m_1, m_2\rangle = |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j=j_1+j_2} \langle j, m = m_1 + m_2 | m_1, m_2 \rangle |j, m = m_1 + m_2\rangle,$$

cioè il prodotto tensoriale $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ si ottiene con una combinazione lineare dei ket $|j, m = m_1 + m_2\rangle$. Per indicare il fatto che dal prodotto tensoriale $|j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle$ si sono ottenute le basi corrispondenti a diversi valori di j , si usa la notazione $j_1 \otimes j_2 = |j_1 - j_2| \oplus |j_1 - j_2| + 1 \oplus \dots \oplus j_1 + j_2$. Ad esempio, per il caso esaminato precedentemente possiamo scrivere

$$\frac{1}{2} \otimes \frac{1}{2} = 1 \oplus 0$$

e, nel caso di $j_1 = 1$ e $j_2 = \frac{1}{2}$, abbiamo

$$1 \otimes \frac{1}{2} = \frac{3}{2} \oplus \frac{1}{2}.$$

I coefficienti di Clebsh-Gordan sono reperibili su libri e siti, come quello del Particle Data Group, <https://pdg.lbl.gov/2020/review-clebsch-gordan-coefs.pdf>, che mostriamo nella pagina seguente.

45. Clebsch-Gordan Coefficients, Spherical Harmonics, and d Functions

Note: A square-root sign is to be understood over every coefficient, e.g., for $-8/15$ read $-\sqrt{8/15}$.

Notation:

| | | |
|-----|-----|-----|
| J | J | ... |
| M | M | ... |

$$1/2 \times 1/2$$

| | |
|-----------|----------|
| 1 | 0 |
| +1/2 +1/2 | 1 0 |
| +1/2 -1/2 | 1/2 1/2 |
| -1/2 +1/2 | 1/2 -1/2 |
| -1/2 -1/2 | 1 |

$$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$$

$$Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\phi}$$

$$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

$$Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{i\phi}$$

$$Y_2^2 = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{2i\phi}$$

| | | |
|----------|----------|--------------|
| m_1 | m_2 | Coefficients |
| m_1 | m_2 | |
| \vdots | \vdots | |
| \vdots | \vdots | |

$$1 \times 1/2$$

| | |
|---------|-------------|
| 3/2 | 1/2 |
| +1 +1/2 | 1 +1/2 +1/2 |
| +1 -1/2 | 1/3 2/3 |
| 0 +1/2 | 2/3 -1/3 |
| | 0 -1/2 |
| | 2/3 1/3 |
| | -1 +1/2 |
| | 1/3 -2/3 |
| | -3/2 |

$$2 \times 1$$

| | |
|-------|----------|
| 3 | 2 |
| +2 +1 | 1 +2 +2 |
| +2 0 | 1/3 2/3 |
| +1 +1 | 2/3 -1/3 |
| | 3 2 1 |
| | +1 +1 +1 |
| | 0 -1/2 |
| | 1/3 1/3 |
| | -1 -1/2 |
| | -3/2 |

$$1 \times 1$$

| | |
|-------|-----------------|
| 2 | 1 |
| +1 +1 | 1 +1 +1 |
| +1 0 | 1/2 1/2 |
| 0 +1 | 1/2 -1/2 |
| | 2 1 0 |
| | 0 1 0 |
| | 0 0 0 |
| | 1/5 1/2 3/10 |
| | 0 0 0 |
| | 3 2 1 |
| | -1 -1 -1 |
| | 0 -1 |
| | 1/5 1/2 3/10 |
| | 0 0 0 |
| | 3 2 1 |
| | -1 -1 -1 |
| | 0 -1 |
| | 2/5 1/2 1/10 |
| | -1 0 |
| | 8/15 -1/6 -3/10 |
| | 3 2 |
| | -2 +1 |
| | 1/15 -1/3 3/5 |
| | -2 -2 |
| | -1 -1 |
| | 1/6 1/2 1/3 |
| | 0 0 |
| | 2/3 0 -1/3 |
| | 2 1 |
| | -1 +1 |
| | 1/6 -1/2 1/3 |
| | -1 -1 |

$$Y_\ell^{-m} = (-1)^m Y_\ell^{m*}$$

$$3/2 \times 1$$

| | |
|---------|----------------|
| 5/2 | 3/2 |
| +3/2 +1 | 1 +3/2 +3/2 |
| +3/2 0 | 2/5 3/5 |
| +1/2 +1 | 3/5 -2/5 |
| | 5/2 3/2 1/2 |
| | +1/2 +1/2 +1/2 |
| | 1/10 2/5 1/2 |
| | +1/2 0 |
| | 3/5 1/15 -1/3 |
| | -1/2 +1 |
| | 3/10 -8/15 1/6 |
| | -1/2 -1/2 -1/2 |
| | 5/2 3/2 1/2 |
| | -1/2 -1/2 -1/2 |

$$3/2 \times 1/2$$

| | |
|-----------|-----------|
| 2 | 1 |
| +3/2 +1/2 | 1 +1 +1 |
| +3/2 -1/2 | 1/4 3/4 |
| +1/2 +1/2 | 3/4 -1/4 |
| | 2 1 |
| | 0 0 |
| | 1/2 1/2 |
| | -1 -1 |
| | 1/2 -1/2 |
| | -1 -1 |
| | 1/2 1/2 |
| | -1 -1 |
| | 2 1 |
| | 0 0 |
| | 1/2 1/2 |
| | -1 -1 |
| | 1/2 -1/2 |
| | -1 -1 |
| | 3/4 1/4 |
| | 1/4 -3/4 |
| | -2 |
| | -3/2 -1/2 |
| | 1 |

$$d_{m,0}^\ell = \sqrt{\frac{4\pi}{2\ell+1}} Y_\ell^m e^{-im\phi}$$

$$\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | j_1 j_2 J M \rangle = (-1)^{J-j_1-j_2} \langle j_2 j_1 m_2 m_1 | j_2 j_1 J M \rangle$$

$$d_{m',m}^j = (-1)^{m-m'} d_{m,m'}^j = d_{-m,-m'}^j$$

$$3/2 \times 3/2$$

| | |
|-----------|--------------|
| 3 | 2 |
| +3/2 +3/2 | 1 +2 +2 |
| +3/2 +1/2 | 1/2 1/2 |
| +1/2 +3/2 | 1/2 -1/2 |
| | +1 +1 +1 |
| | 3 2 1 |
| | +1 +1 +1 |
| | 1/5 1/2 3/10 |
| | 3/5 0 -2/5 |
| | 3 2 1 |
| | -1 -1 -1 |
| | 2/3 1/3 |
| | -2 -2 |
| | 3 2 |
| | -2 -2 |
| | -1 -1 |
| | 2/3 1/3 |
| | -2 -2 |
| | 3 2 |
| | -2 -2 |
| | -2 -1 |
| | 1 |

$$d_{0,0}^1 = \cos \theta \quad d_{1/2,1/2}^{1/2} = \cos \frac{\theta}{2} \quad d_{1,1}^1 = \frac{1 + \cos \theta}{2}$$

$$d_{1/2,-1/2}^{1/2} = -\sin \frac{\theta}{2} \quad d_{1,0}^1 = -\frac{\sin \theta}{\sqrt{2}}$$

$$d_{1,-1}^1 = \frac{1 - \cos \theta}{2}$$

$$2 \times 3/2$$

| | |
|---------|---------------------|
| 7/2 | 5/2 |
| +2 +3/2 | 1 +5/2 +5/2 |
| +2 +1/2 | 3/7 4/7 |
| +1 +3/2 | 4/7 -3/7 |
| | 7/2 5/2 3/2 |
| | +3/2 +3/2 |
| | 1/7 16/35 2/5 |
| | +1 +1/2 |
| | 4/7 1/35 -2/5 |
| | 0 +3/2 |
| | 2/7 -18/35 1/5 |
| | 7/2 5/2 3/2 1/2 |
| | +1/2 +1/2 +1/2 +1/2 |
| | +3/2 -1/2 |
| | 1/5 1/2 3/10 |
| | +1/2 +1/2 |
| | 3/5 0 -2/5 |
| | -1/2 +3/2 |
| | 1/5 -1/2 3/10 |
| | 3 2 1 0 |
| | 0 0 0 0 |
| | 1 0 |
| | 0 |
| | 0 |

$$2 \times 2$$

| | |
|-------|--------------------------|
| 4 | 3 |
| +2 +2 | 1 +3 +3 |
| +2 +1 | 1/2 1/2 |
| +1 +2 | 1/2 -1/2 |
| | 4 3 2 |
| | +2 +2 +2 |
| | +2 0 |
| | 3/14 1/2 2/7 |
| | +1 +1 |
| | 4/7 0 -3/7 |
| | 0 +2 |
| | 3/14 -1/2 2/7 |
| | 4 3 2 1 |
| | +1 +1 +1 +1 |
| | +2 -1 |
| | 1/14 3/10 3/7 1/5 |
| | +1 0 |
| | 3/7 1/5 -1/14 -3/10 |
| | 0 +1 |
| | 3/7 -1/5 -1/14 3/10 |
| | -1 +2 |
| | 1/14 -3/10 3/7 -1/5 |
| | 4 3 2 1 0 |
| | 0 0 0 0 0 |
| | +2 -2 |
| | 1/70 1/10 2/7 2/5 1/5 |
| | +1 -1 |
| | 8/35 2/5 1/14 -1/10 -1/5 |
| | 0 0 |
| | 18/35 0 -2/7 0 1/5 |
| | -1 +1 |
| | 8/35 -2/5 1/14 1/10 -1/5 |
| | -2 +2 |
| | 1/70 -1/10 2/7 -2/5 1/5 |
| | 4 3 2 1 |
| | -1 -1 -1 -1 |
| | +1 -2 |
| | 1/14 3/10 3/7 1/5 |
| | 0 -1 |
| | 3/7 1/5 -1/14 -3/10 |
| | -1 0 |
| | 3/7 -1/5 -1/14 3/10 |
| | -2 +1 |
| | 1/14 -3/10 3/7 -1/5 |
| | 4 3 2 |
| | -2 -2 -2 |
| | 0 -2 |
| | 3/14 1/2 2/7 |
| | -1 -1 |
| | 4/7 0 -3/7 |
| | -2 0 |
| | 3/14 -1/2 2/7 |
| | 4 3 |
| | -3 -3 |
| | -1 -2 |
| | 1/2 1/2 |
| | -2 -1 |
| | 1/2 -1/2 |
| | -4 |
| | -2 -2 |
| | 1 |

$$d_{3/2,3/2}^{3/2} = \frac{1 + \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$$

$$d_{3/2,1/2}^{3/2} = -\sqrt{3} \frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$$

$$d_{3/2,-1/2}^{3/2} = \sqrt{3} \frac{1 - \cos \theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}$$

$$d_{3/2,-3/2}^{3/2} = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \frac{\theta}{2}$$

$$d_{1/2,1/2}^{3/2} = \frac{3 \cos \theta - 1}{2} \cos \frac{\theta}{2}$$

$$d_{1/2,-1/2}^{3/2} = -\frac{3 \cos \theta + 1}{2} \sin \frac{\theta}{2}$$

$$d_{2,2}^2 = \left(\frac{1 + \cos \theta}{2} \right)^2$$

$$d_{2,1}^2 = -\frac{1 + \cos \theta}{2} \sin \theta$$

$$d_{2,0}^2 = \frac{\sqrt{6}}{4} \sin^2 \theta$$

$$d_{2,-1}^2 = -\frac{1 - \cos \theta}{2} \sin \theta$$

$$d_{2,-2}^2 = \left(\frac{1 - \cos \theta}{2} \right)^2$$

$$d_{1,1}^2 = \frac{1 + \cos \theta}{2} (2 \cos \theta - 1)$$

$$d_{1,0}^2 = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$$

$$d_{1,-1}^2 = \frac{1 - \cos \theta}{2} (2 \cos \theta + 1)$$

$$d_{0,0}^2 = \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2} \right)$$

Figure 45.1: The sign convention is that of Wigner (Group Theory, Academic Press, New York, 1959), also used by Condon and Shortley (The Theory of Atomic Spectra, Cambridge Univ. Press, New York, 1953), Rose (Elementary Theory of Angular Momentum, Wiley, New York, 1957), and Cohen (Tables of the Clebsch-Gordan Coefficients, North American Rockwell Science Center, Thousand Oaks, Calif., 1974).

Capitolo 2

Parità

In questo capitolo si sviluppa il formalismo per studiare il seguente problema: **può un fenomeno naturale avvenire nelle stesse modalità nelle quali lo vedo in uno specchio?**, o, meglio, il nostro mondo e la sua immagine specchiata si comportano allo stesso modo, con l'unica differenza che la sinistra e la destra sono invertite?

Supponiamo di guardare il moto di un orologio: le lancette si muovono indicando le ore in modo crescente. Questo viene indicato nell'immagine in alto a sinistra nella figura 2.1. Consideriamo, per semplicità, una

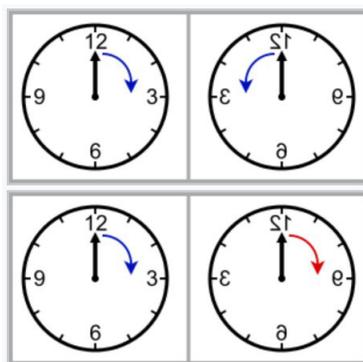


Figura 2.1: Moto delle lancette di un orologio (a sinistra), visto in uno specchio verticale (a destra in alto) e visto in un mondo nel quale non c'è invarianza per trasformazione di Parità (a destra in basso).

trasformazione di Parità che riguarda un l'inversione di un solo asse, come se uno specchio fosse posto in verticale. Dovremmo scambiare la destra con la sinistra e un orologio apparirebbe ruotare in senso antiorario nello specchio, ma vedremo le lancette muoversi sempre nella direzione delle ore crescenti. Se il moto dell'orologio non fosse invariante per questa trasformazione, lo vedremmo ruotare in senso orario anche nello specchio, come mostrato nella stessa figura in basso a destra.

La risposta definitiva a questa domanda può, ovviamente, essere data solo dall'osservazione sperimentale. Tuttavia il formalismo permetterà di stabilire importanti proprietà di molte grandezze fisiche.

Bibliografia: Nardulli ([1]).

2.1 Operatore Parità

Consideriamo un sistema di N particelle e siano

$$|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle$$

i ket della base delle coordinate. L'operatore \mathbb{P} , definito dalla relazione

$$\mathbb{P}|\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N\rangle = |-\vec{r}_1, -\vec{r}_2, \dots, -\vec{r}_N\rangle,$$

è detto operatore Parità.

Per semplicità, d'ora in avanti ci limiteremo a considerare un sistema composto da una sola particella (l'estensione ad N particelle è banale:

$$\mathbb{P}|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle. \quad (2.1)$$

Possiamo subito dimostrare alcune semplici proprietà valide per \mathbb{P} :

- L'operatore \mathbb{P} è hermitiano. Infatti

$$\langle \vec{r}' | \mathbb{P} | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | -\vec{r} \rangle = \delta(\vec{r}' + \vec{r}) = \langle -\vec{r}' | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | -\vec{r}' \rangle^* = \langle \vec{r}' | \mathbb{P} | \vec{r}' \rangle^* = \langle \vec{r}' | \mathbb{P}^\dagger | \vec{r} \rangle \quad \rightarrow \quad \mathbb{P} = \mathbb{P}^\dagger$$

- L'operatore \mathbb{P} è unitario. Infatti:

$$\mathbb{P}|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle = \mathbb{P}^{-1}\mathbb{P}|-\vec{r}\rangle = \mathbb{P}^{-1}|-\vec{r}\rangle \quad \rightarrow \quad \mathbb{P}^{-1} = \mathbb{P}$$

- L'operatore \mathbb{P} è idempotente. Infatti:

$$\mathbb{P}\mathbb{P}|\vec{r}\rangle = \mathbb{P}|-\vec{r}\rangle = |\vec{r}\rangle \quad \rightarrow \quad \mathbb{P}^2 = \mathbb{I}$$

Da quest'ultima proprietà deriva che i suoi autovalori λ soddisfano l'equazione $\lambda^2 = 1$ e quindi:

$$\lambda = \pm 1 \quad (2.2)$$

Gli autoket della Parità con autovalore $+1$ sono detti pari e quelli con autovalore -1 sono detti dispari. Consideriamo ora la trasformazione di Parità per un generico ket.

$$|\psi'\rangle = \mathbb{P}|\psi\rangle$$

Nello spazio delle funzioni d'onda questa trasformazione diventa

$$\psi'(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi' \rangle = \langle \vec{r} | \mathbb{P} | \psi \rangle = \langle -\vec{r} | \psi \rangle = \psi(-\vec{r}),$$

che possiamo riscrivere

$$\mathbb{P}\psi(\vec{r}) = \psi(-\vec{r}),$$

dove s'intende che abbiamo dato lo stesso nome \mathbb{P} all'operatore che rappresenta \mathbb{P} nello spazio delle funzioni d'onda. Anche in questo spazio potremo dire che un'autofunzione di \mathbb{P} è pari se corrisponde all'autovalore $+1$, è dispari se corrisponde all'autovalore -1 . Per le funzioni d'onda che non sono autofunzioni di \mathbb{P} , diremo che non hanno parità definita.

2.2 Trasformazione di operatori sotto Parità

\mathbb{P} costituisce una trasformazione unitaria sui ket di base. Questo equivale a trasformare ogni operatore A secondo la trasformazione

$$A \quad \rightarrow \quad A' = \mathbb{P}^\dagger A \mathbb{P} = \mathbb{P} A \mathbb{P}$$

Consideriamo, ad esempio, l'operatore posizione \vec{R} del quale $|\vec{r}\rangle$ è autoket:

$$\vec{R}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle.$$

Il suo operatore trasformato per parità agisce sulla base delle coordinate, e, quindi, su ogni ket, nel seguente modo

$$\vec{R}'|\vec{r}\rangle = \mathbb{P}\vec{R}\mathbb{P}|\vec{r}\rangle = \mathbb{P}\vec{R}|-\vec{r}\rangle = -\vec{r}\mathbb{P}|-\vec{r}\rangle = -\vec{r}|\vec{r}\rangle = -\vec{R}'|\vec{r}\rangle;$$

cioè

$$\vec{R}' = \mathbb{P} \vec{R} \mathbb{P} = -\vec{R}.$$

Gli operatori che sotto Parità cambiano segno sono detti **vettori polari**. È facile vedere che anche l'operatore impulso \vec{P} è un vettore polare. Denotiamo con $|\vec{p}\rangle$ l'autoket dell'impulso relativo all'autovalore \vec{p} . Poiché

$$\langle \vec{r}' | \mathbb{P} | \vec{p}\rangle = \langle -\vec{r}' | \vec{p}\rangle = \langle \vec{r}' | -\vec{p}\rangle \quad \rightarrow \quad \mathbb{P} | \vec{p}\rangle = | -\vec{p}\rangle,$$

l'operatore impulso trasformato per parità agisce sui suoi autoket nel modo seguente:

$$\vec{P}' | \vec{p}\rangle = \mathbb{P} \vec{P} \mathbb{P} | \vec{p}\rangle = -\vec{P} | \vec{p}\rangle = -\vec{P}' | \vec{p}\rangle,$$

cioè

$$\vec{P}' = \mathbb{P} \vec{P} \mathbb{P} = -\vec{P}.$$

Ci sono operatori vettoriali che non cambiano di segno per trasformazioni di Parità. Un esempio è dato dal Momento Angolare orbitale \vec{L} . È facile comprendere, infatti, che, poiché

$$\vec{L} = \vec{R} \times \vec{P}$$

e sia \vec{R} che \vec{P} cambiano di segno per trasformazione di Parità,

$$\vec{L} \quad \rightarrow \quad \vec{L}' = \vec{L}.$$

Questi operatori vettoriali sono detti **vettori assiali**. Anche lo Spin \vec{S} è un vettore assiale. Esso dipende, infatti, da proprietà intrinseche che non sono modificate dalle riflessioni spaziali.

Consideriamo ora le grandezze invarianti per rotazioni, ossia le grandezze scalari. Anche questi operatori potranno essere distinti in **veri scalari**, se sono invarianti per riflessioni spaziali, e **pseudoscalari**, se cambiano di segno sotto queste trasformazioni.

Ad esempio, il prodotto scalare di due vettori polari è uno scalare vero, mentre il prodotto scalare tra un vettore polare ed un vettore assiale è uno pseudoscalare.

Gli operatori vettori assiali e gli operatori scalari commutano con l'operatore Parità, mentre gli operatori vettori polari e gli operatori pseudoscalari anticommutano con esso.

2.2.1 Conservazione della Parità

Consideriamo ora un operatore Hamiltoniano e supponiamo che esso descriva interazioni che sono invarianti per trasformazioni di Parità. L'Hamiltoniano deve essere uno scalare, cioè

$$\mathcal{H} \quad \rightarrow \quad \mathcal{H}' = \mathbb{P} \mathcal{H} \mathbb{P} = \mathcal{H}$$

e, quindi, supponendo che \mathcal{H} non dipenda dal tempo,

$$[\mathcal{H}, \mathbb{P}] = 0,$$

da cui segue la **Legge di conservazione della Parità**, formalizzata da Eugene Wigner nel 1927: se un sistema fisico si trova in uno stato di Parità definita, la parità dello stato non può cambiare.

Questo principio fu ampiamente condiviso e verificato sperimentalmente nelle interazioni elettromagnetiche e forti. Nella prima metà degli anni 1950, emersero alcuni fatti sperimentali, coinvolgenti particelle K, che non si riusciva a spiegare con le teorie nelle quali era inglobata la conservazione della Parità. Due fisici teorici, Tsung-Dao Lee e Chen-Ning Yang nel 1956 pubblicarono una rassegna sulla questione della conservazione della Parità in tutti gli esperimenti, concludendo che non si poteva decidere sulla sua validità. Essi suggerirono a Chien-Sheng Wu un esperimento che potesse dirimere la questione.

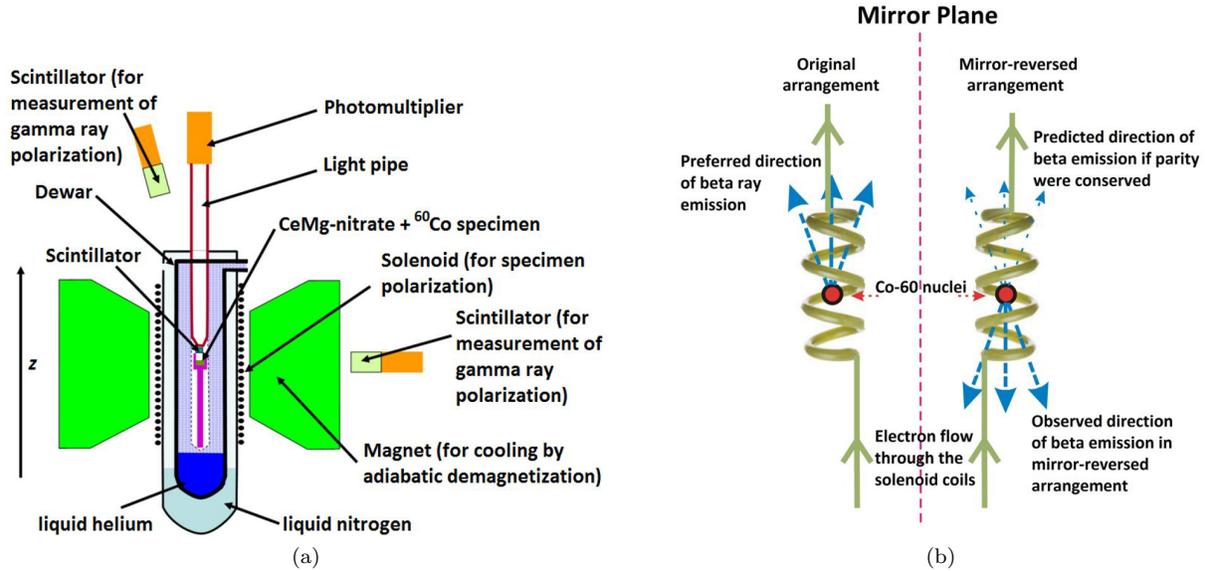
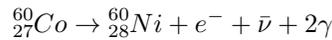


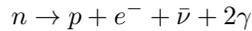
Figura 2.2: L'esperimento di Madame Wu: a) schema dell'assetto sperimentale; b) non conservazione della Parità

2.2.2 L'esperimento di Madame Wu (1956)

Si studiava il decadimento di Cobalto 60:



corrispondente al decadimento di un neutrone



o, in termini di quark, di un quark d del neutrone



Il cobalto 60 è un elemento paramagnetico, che in natura si trova sotto forma di vari tipi di sale. Nell'esperimento esso veniva magnetizzato e poi raffreddato con Elio liquido fino a 1.2°K .

Un campo magnetico, generato dalla corrente che fluiva in un solenoide, allineava i momenti magnetici del Cobalto 60 e, successivamente, lo spegnimento del campo magnetico raffreddava ulteriormente il cobalto fino a 0.003°K , affinché l'agitazione termica non rovinasse l'allineamento. Si trovava che la maggioranza degli elettroni erano emessi in direzione opposta a quella degli spin nucleari. Questo avveniva anche con l'esperimento in configurazione speculare, nella quale il campo magnetico è diretto in direzione opposta e gli spin nucleari si allineano sempre al campo magnetico.

Come si vede nella figura 2.2b, questo è incompatibile con l'invarianza per trasformazioni di Parità: l'esperimento evidenzia, infatti, una inversione spaziale lungo la direzione verticale.

Questo risultato sorprese la comunità scientifica, che assegnò il premio Nobel nel 1957 a Lee e Yang, ma non a Madame Wu. Neanche la Parità tra i generi fu conservata.

2.2.3 Relazioni utili

Indichiamo con $F_s, F_{ps}, \vec{F}_{vp}, \vec{F}_{va}$ operatori rispettivamente scalare, pseudoscalare, vettore polare e vettore assiale. Sia $|\lambda\rangle$ uno stato di parità definita, $\mathbb{P}|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle$, con $\lambda = \pm 1$. Si dimostrano le seguenti proprietà:

$$\begin{aligned}\langle \lambda | F_s | -\lambda \rangle &= 0 \\ \langle \lambda | F_{ps} | -\lambda \rangle &= 0 \\ \langle \lambda | \vec{F}_{vp} | -\lambda \rangle &= 0 \\ \langle \lambda | \vec{F}_{va} | -\lambda \rangle &= 0\end{aligned}$$

La dimostrazione di queste relazioni è molto semplice. Ad esempio la prima si dimostra tenendo conto del fatto che $\mathbb{P}F_s\mathbb{P} = F_s$:

$$\langle \lambda | F_s | -\lambda \rangle = \langle \lambda | \mathbb{P}F_s\mathbb{P} | -\lambda \rangle = -\lambda^2 \langle \lambda | F_s | -\lambda \rangle = -\langle \lambda | F_s | -\lambda \rangle.$$

2.2.4 Parità delle armoniche sferiche

Come abbiamo visto l'operatore \vec{L} , essendo un vettore assiale, commuta con l'operatore Parità; questo accade anche per L^2 che è uno scalare. Deve essere, quindi, possibile trovare una base comune agli operatori L^2 ed L_z che abbia parità definita. Ora mostreremo che, nella rappresentazione della posizione (coordinate sferiche), questa base è data dalle Armoniche Sferiche.

Ricordiamo che le Armoniche sferiche sono date, a parte costanti, da

$$Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = P_{\ell,m}(\cos \theta) e^{im\phi},$$

dove, sempre trascurando fattori costanti,

$$P_{\ell,m}(\cos \theta) = (\sin \theta)^{|m|} \frac{d^{|m|}}{d(\cos \theta)^{|m|}} P_{\ell}(\cos \theta).$$

e i polinomi di Legendre P_{ℓ} sono dati da

$$P_{\ell}(\cos \theta) = (-1)^{\ell} \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{d \cos^{\ell} \theta} (\sin^2 \theta)^{\ell}.$$

Come risulta chiaro dalla figura 10.1, le coordinate sferiche si trasformano, per riflessioni spaziali $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$, nel modo seguente

$$\begin{cases} r & \rightarrow & r \\ \phi & \rightarrow & \phi + \pi \\ \theta & \rightarrow & \pi - \theta \end{cases} \quad (2.3)$$

In particolare, l'ultima relazione implica che

$$\cos \theta \rightarrow -\cos \theta, \quad \sin \theta \rightarrow \sin \theta$$

Risulta, quindi, che i polinomi di Legendre hanno Parità $(-1)^{\ell}$ e le funzioni associate di Legendre hanno Parità $(-1)^{\ell+m}$. Il termine $e^{im\phi}$, invece, si trasforma secondo

$$e^{im\phi} \rightarrow e^{im\phi} e^{im\pi} = (-1)^m e^{im\phi}.$$

Mettendo insieme queste informazioni, vediamo che le Armoniche sferiche sono, effettivamente, anche auto-stati di parità:

$$\mathbb{P} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^{\ell+2m} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = (-1)^{\ell} Y_{\ell,m}(\theta, \phi),$$

con autovalore pari a $(-1)^{\ell}$.

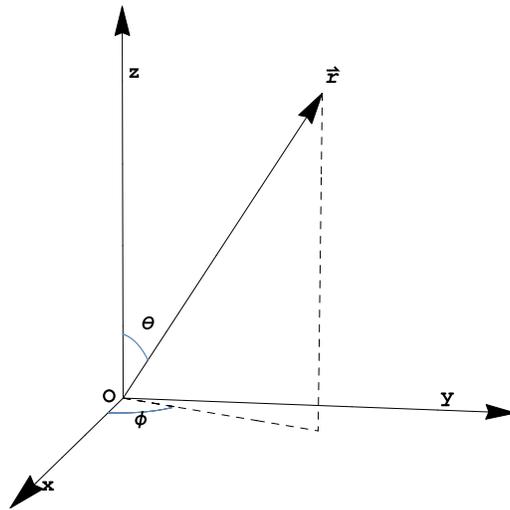


Figura 2.3: Coordinate sferiche.

Capitolo 3

Spin $\frac{1}{2}$

3.1 Spin dell'elettrone

L'elettrone è una particella di spin $s = \frac{1}{2}$, così come le altre particelle subatomiche: il protone ed il neutrone. Anche i neutrini ed i quark hanno lo stesso valore di s ; dunque, il caso delle particelle dotate di spin $\frac{1}{2}$ ha una grande importanza in natura.

Una particella di spin $\frac{1}{2}$ ha autovalore del modulo quadro dello spin pari a

$$S^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} + 1 \right) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2.$$

Gli stati di spin indipendenti sono $2s + 1 = 2$ valori corrispondenti ai due autovalori di S_z , $\pm \frac{\hbar}{2}$; quindi, se si trascurano gli altri gradi di libertà, lo spazio di Hilbert degli stati è bidimensionale. Poniamo

$$\vec{S} = \frac{\hbar}{2} \vec{\sigma}$$

e determiniamo gli elementi di matrice di $\vec{\sigma}$, e, quindi, di \vec{S} nella base in cui S_z è diagonale. Gli autovalori di σ sono ± 1 , per cui

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.1)$$

Per determinare le matrici σ_x e σ_y usiamo le equazioni già viste nel capitolo del momento angolare:

$$\langle j', m' | J_x | j, m \rangle = \frac{\hbar}{2} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m, m'-1} + \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m, m'+1} \right] \delta_{j, j'} \quad (3.2)$$

$$\langle j', m' | J_y | j, m \rangle = \frac{\hbar}{2i} \left[\sqrt{(j-m)(j+m+1)} \delta_{m, m'-1} - \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \delta_{m, m'+1} \right] \delta_{j, j'} \quad (3.3)$$

Otteniamo subito

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.4)$$

Le tre matrici σ_x , σ_y e σ_z sono dette *matrici di Pauli*. Dalle regole di commutazione generali per il momento angolare, oppure da un calcolo diretto, si deducono le seguenti relazioni di commutazione

$$[\sigma_i, \sigma_j] = 2i\epsilon_{ijk} \sigma_k, \quad (3.5)$$

ossia

$$\begin{aligned} \sigma_x \sigma_y - \sigma_y \sigma_x &= 2i\sigma_z \\ \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y &= 2i\sigma_x \\ \sigma_z \sigma_x - \sigma_x \sigma_z &= 2i\sigma_y. \end{aligned}$$

Le matrici di Pauli soddisfano inoltre

$$\sigma_x^2 = \sigma_y^2 = \sigma_z^2 = \mathbb{I}, \quad (3.6)$$

in cui \mathbb{I} è la matrice unità 2×2 ; esse inoltre anticommutano:

$$\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x = 0 \quad (3.7)$$

$$\sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y = 0 \quad (3.8)$$

$$\sigma_z \sigma_x + \sigma_x \sigma_z = 0. \quad (3.9)$$

Dimostriamo la prima delle (3.7-3.9):

$$\begin{aligned} 0 &= \sigma_y^2 \sigma_z - \sigma_z \sigma_y^2 = \sigma_y \sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y \sigma_y + \sigma_y \sigma_z \sigma_y - \sigma_y \sigma_z \sigma_y = \\ &= \sigma_y (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) + (\sigma_y \sigma_z - \sigma_z \sigma_y) \sigma_y = \\ &= 2i (\sigma_y \sigma_x + \sigma_x \sigma_y). \end{aligned}$$

Le relazioni di anticommuteazione si possono anche riscrivere nella forma

$$\sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2\delta_{i,j}, \quad (3.10)$$

che tiene anche conto del quadrato delle matrici sigma (3.6). Dalle regole di commutazione e anticommuteazione, seguono le seguenti relazioni:

$$\sigma_i \sigma_j = \delta_{i,j} + i \epsilon_{i,j,k} \sigma_k, \quad (3.11)$$

cioè

$$\sigma_x \sigma_y = i \sigma_z$$

$$\sigma_y \sigma_z = i \sigma_x$$

$$\sigma_z \sigma_x = i \sigma_y$$

e, dalla prima di queste,

$$\sigma_x \sigma_y \sigma_z = i \mathbb{I}. \quad (3.12)$$

Come si è già visto quando abbiamo introdotto lo spin, nella base in cui sono diagonali la posizione e la terza componente dello spin, la funzione d'onda di una singola particella:

$$\langle \vec{r}, \sigma | \psi \rangle = \psi(\vec{r}, \sigma).$$

si può scrivere nella forma di una matrice che, nel caso di spin 1/2, ha la forma di una colonna con due righe:

$$\psi(\vec{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix}.$$

E' chiaro che S_z opera su $\psi(\vec{r})$ nel modo seguente:

$$S_z \psi(\vec{r}) = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{r}) \\ \psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +\psi_1(\vec{r}) \\ -\psi_2(\vec{r}) \end{pmatrix}.$$

Gli autoket di S_z hanno la forma

$$|\sigma = +1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\sigma = -1\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

mentre il generico ket si scrive nel modo seguente:

$$|u\rangle = \frac{1}{\sqrt{|\alpha|^2 + |\beta|^2}} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}.$$

Altre notazioni spesso usate per gli autoket di S_z sono le seguenti:

$$\begin{aligned} |\sigma = +1\rangle &= |+\rangle = |\uparrow\rangle \\ |\sigma = -1\rangle &= |-\rangle = |\downarrow\rangle . \end{aligned}$$

Esempio. La decomposizione di Clebsch-Gordan per due particelle di spin $1/2$ in questa notazione ha la forma seguente. I tre stati di spin totale 1 (*stati di tripletto*) sono

$$\begin{aligned} |1, +1\rangle &= |++\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \\ |1, 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |1, -1\rangle &= |--\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

e quello di spin zero (*stato di singoletto*):

$$|0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle) = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

3.1.1 Identità utili

1) Dati due vettori \vec{A} e \vec{B} , mostrare che

$$(\vec{A} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) = (\vec{A} \cdot \vec{B}) \mathbb{I} + i (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{\sigma} .$$

Dimostrazione

$$(\vec{A} \cdot \vec{\sigma}) (\vec{B} \cdot \vec{\sigma}) = A_i \sigma_i B_j \sigma_j = A_i B_j (\delta_{i,j} + i \epsilon_{i,j,k} \sigma_k) = (\vec{A} \cdot \vec{B}) \mathbb{I} + i (\vec{A} \times \vec{B}) \cdot \vec{\sigma} .$$

Nel caso particolare $\vec{A} = \vec{B}$, si ha

$$(\vec{A} \cdot \vec{\sigma})^2 = A^2 \mathbb{I} + i (\vec{A} \times \vec{A}) \cdot \vec{\sigma} = A^2 \mathbb{I} ,$$

e, se $\vec{A} = \hat{n}$, dove \hat{n} è un versore:

$$(\hat{n} \cdot \vec{\sigma})^2 = \mathbb{I} .$$

2) Dato un vettore $\vec{\theta}$ e un versore \hat{n} , dove $\hat{n} = \frac{\vec{\theta}}{\theta}$, mostrare che

$$e^{i \vec{\theta} \cdot \vec{\sigma}} = \mathbb{I} \cos \theta + i (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) \sin \theta$$

Dimostrazione

$$\begin{aligned} e^{i \vec{\theta} \cdot \vec{\sigma}} &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} (\hat{n} \cdot \vec{\sigma})^n = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2n}}{(2n)!} (\hat{n} \cdot \vec{\sigma})^{2n} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^{2k+1}}{(2k+1)!} (\hat{n} \cdot \vec{\sigma})^{2k+1} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \theta^{2n}}{(2n)!} \mathbb{I}^n + i (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \theta^{2k+1}}{(2k+1)!} \mathbb{I}^k = \cos \theta \mathbb{I} + i \sin \theta (\hat{n} \cdot \vec{\sigma}) . \end{aligned}$$

3.2 Momento di dipolo magnetico

Sperimentalmente si rivela la presenza di un momento di dipolo magnetico $\vec{\mu}$ dell'elettrone parallelo al vettore del suo spin \vec{S} . Si tratta di una proprietà generale comune a tutte le particelle elementari:

$$\vec{\mu} = g_s \frac{e}{2mc} \vec{S} \quad (3.13)$$

dove m è la massa della particella ed e la carica elementare.

Questa relazione estende al momento angolare intrinseco \vec{S} la relazione classica tra momento magnetico e momento angolare orbitale \vec{L} per una particella puntiforme di carica q :

$$\vec{\mu} = \frac{q}{2mc} \vec{L}. \quad (3.14)$$

g_s , che nel caso del momento angolare orbitale vale 1, dipende dalla particella considerata.

Nel caso dell'elettrone ($m = m_e = 0.511 \frac{MeV}{c^2}$) si trova

$$g_s = 2.0023193043617(15) \simeq 2.$$

Questa quantità può essere calcolata in Teoria Quanto-relativistica, dove si trova un valore in grande accordo con il dato sperimentale.

Se si considera la componente z di $\vec{\mu}$, μ_z , per un elettrone (carica $-e$) con componente z positiva si ha

$$\mu_z = -g_s \frac{e}{2m_e c} \frac{1}{2} \hbar \simeq -\frac{e\hbar}{2m_e c} = -\mu_B.$$

La quantità μ_B

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e c} = 0.927 \times 10^{-20} \text{ erg/gauss} \quad (3.15)$$

è detta *magnetone di Bohr*. Per le particelle di spin 1/2 più pesanti che compongono i nuclei, quali, ad esempio, il protone ed il neutrone, il momento di dipolo magnetico è espresso in unità di *magnetone nucleare*,

$$\frac{|e|\hbar}{2m_N c}, \quad (3.16)$$

utilizzando m_N , la massa del nucleone ($m_N \simeq m_p \simeq m_n \simeq 940 \text{ MeV}/c^2$). Si trova sperimentalmente

$$\begin{aligned} &+ 2.793 \times \frac{|e|\hbar}{2m_N c} && \text{per il protone ,} \\ &- 1.913 \times \frac{|e|\hbar}{2m_N c} && \text{per il neutrone .} \end{aligned}$$

Il segno meno indica che momento di dipolo magnetico e spin del neutrone sono sempre opposti. Notiamo che il neutrone, pur essendo privo di carica elettrica, ha momento di dipolo magnetico e quindi interagisce con il campo magnetico \vec{B} . Ciò mostra che il neutrone non può essere una particella elementare, ma è dotato di struttura interna. Per questo $\mu_n = -1.913$ (in unità di magnetone nucleare) dicesi anche momento magnetico *anomalo* del neutrone, mentre $\mu_p = +1.793$ (la differenza tra il valore sperimentale e quello che ci si aspetterebbe teoricamente, cioè 1) momento magnetico *anomalo* del protone.

Una particella dotata di momento magnetico interagisce con un campo magnetico esterno \vec{B} mediante un termine di energia potenziale

$$H_m = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}, \quad (3.17)$$

che si somma all'operatore hamiltoniano e tende ad allineare il momento magnetico $\vec{\mu}$ al campo \vec{B} .

Capitolo 4

Campo di forza centrale

Bibliografia: per questo capitolo sono stati consultati molti testi. I principali sono il Messiah [2] e il Gasiorowicz [3].

Il caso più semplice di sistema tridimensionale composto è quello di due particelle che interagiscono tramite un potenziale che dipende dalla posizione reciproca,

$$V = V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

dove r_1 e r_2 sono le posizioni delle particelle. Per i motivi già noti sull'importanza degli stati stazionari, siamo interessati a risolvere l'equazione agli autovalori per l'Hamiltoniano. Consideriamo la rappresentazione della posizione. L'Hamiltoniano prende la forma

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \nabla_1^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2} \nabla_2^2 + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2),$$

dove

$$\nabla_i = \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_i^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_i^2},$$

è il laplaciano relativo alla posizione della particella i -sima.

4.1 Problema dei due corpi

La forma del potenziale suggerisce l'introduzione di due nuove variabili, la coordinata del centro di massa e quella relativa, rispettivamente

$$\begin{aligned} \vec{R} \equiv (X, Y, Z) &= \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{m_1 + m_2} \\ \vec{r} \equiv (x, y, z) &= \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \end{aligned}$$

Esprimiamo \mathcal{H} in termini delle nuove coordinate e delle derivate parziali rispetto ad esse. Per le derivate prime abbiamo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x_1} &= \frac{\partial X}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \\ \frac{\partial}{\partial x_2} &= \frac{\partial X}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial x}{\partial x_2} \frac{\partial}{\partial x} = \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \end{aligned}$$

e analoghe espressioni per le derivate parziali rispetto alle coordinate y e z .

Per le derivate seconde si ottiene

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} &= \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} + \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} &= \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X} - \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X^2} - \frac{2m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} \end{aligned}$$

e analoghe espressioni per le derivate parziali rispetto alle coordinate y e z . Sostituendo queste espressioni nell'Hamiltoniano le derivate seconde miste si cancellano e si trova

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}),$$

dove si sono definite preliminarmente massa totale e massa ridotta come

$$M = m_1 + m_2 \quad \text{e} \quad m = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

L'equazione di Schrödinger stazionaria

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{R}, \vec{r}) = E \Psi(\vec{R}, \vec{r})$$

può essere risolta per separazione di variabili. Sostituendo

$$\Psi(\vec{R}, \vec{r}) = \phi(\vec{R}) \psi(\vec{r}),$$

nell'equazione la dipendenza dalle coordinate del centro di massa e la dipendenza dalle coordinate relative si separano:

$$\frac{1}{\phi(\vec{R})} \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \phi(\vec{R}) \right] + \frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \right] = E.$$

Di conseguenza le due funzioni $\phi(\vec{R})$ e $\psi(\vec{r})$ soddisfano due equazioni differenziali distinte

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_R^2 \phi(\vec{R}) &= E_{CM} \phi(\vec{R}) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) &= W \psi(\vec{r}) \end{aligned}$$

con la condizione

$$E = E_{CM} + W.$$

Abbiamo quindi ottenuto, in analogia a quanto avviene in Meccanica Classica, l'evoluzione separata del centro di massa, che si comporta da particella libera di massa M in assenza di potenziale, e di una particella di massa ridotta m in presenza del potenziale di interazione V . Mentre l'evoluzione del centro di massa ha un comportamento universale, per determinare la dinamica della particella di massa ridotta è necessaria la conoscenza del potenziale. D'ora in avanti, a meno di indicazione contraria, tratteremo sempre della dinamica di una sola particella di massa (ridotta) m in presenza di un potenziale V , sottintendendo il moto del centro di massa.

4.2 Campo di forza centrale

Questa sezione è dedicata allo studio dell'equazione di Schrödinger per la particella di massa ridotta

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 \psi(\vec{r}) + V(r) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (4.1)$$

dove il potenziale dipende solo dal *modulo* di \vec{r} . Questo ci permette di affrontare dei modelli realistici di interazione, prima di tutto il potenziale coulombiano.

La trattazione utilizza le coordinate sferiche dato che, per potenziali centrali, l'equazione (4.1) è separabile in queste coordinate. Questo avviene anche in Fisica Classica; per questo, nel prossimo paragrafo, ricorderemo in una breve rassegna i risultati classici della dinamica in presenza di forze centrali. Il passaggio dalle coordinate cartesiane a quelle sferiche, insieme ad alcune formule utili che si ricavano da queste trasformazioni, è riportato in appendice.

4.2.1 Moto in un campo di forza centrale in Fisica Classica

Il potenziale è invariante per rotazioni. Dobbiamo quindi attenderci che le coordinate di rotazione θ e ϕ siano cicliche e che il momento angolare $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ si conservi. La posizione \vec{r} deve essere sempre perpendicolare a \vec{L} e quindi il moto è piano. Scegliendo \vec{L} nella direzione dell'asse x , la traiettoria sarà sempre nel piano yz e l'angolo ϕ sarà costantemente pari a $\pi/2$.

Notiamo, con riferimento alla figura 4.1, che se nel corso del moto un punto si sposta dalla posizione \vec{r} alla posizione $\vec{r} + d\vec{r}$, possiamo scomporre istante per istante lo spostamento lungo la direzione di \vec{r} e quella perpendicolare

$$d\vec{r} = (dr, r d\theta) \quad \Rightarrow \quad \vec{v} = \left(\frac{dr}{dt}, r \frac{d\theta}{dt} \right) \quad \Rightarrow \quad v^2 = \left(\frac{dr}{dt} \right)^2 + \left(r \frac{d\theta}{dt} \right)^2 \quad (4.2)$$

Esprimendo la lagrangiana in coordinate polari piane ricaviamo:

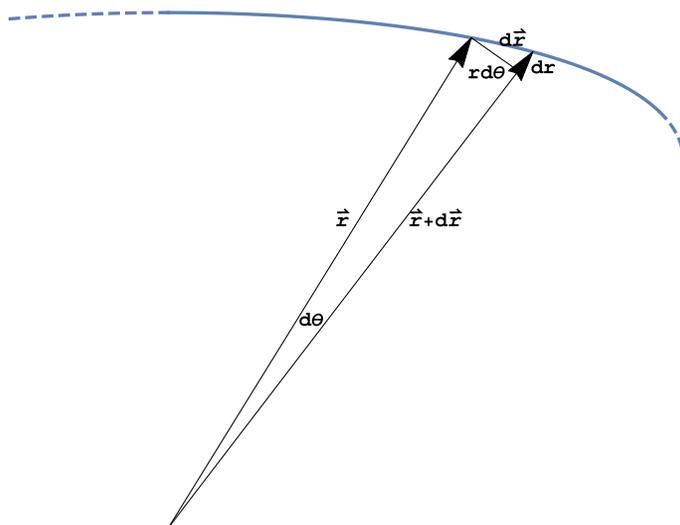


Figura 4.1: Spostamento sulla traiettoria.

$$L = T - V = \frac{1}{2} m \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 \right) - V(r) \quad (4.3)$$

che effettivamente contiene l'informazione sulla ciclicità delle coordinate $\phi, \dot{\phi}, \theta$. Quindi il moto è effettivamente piano.

Scriviamo ora le equazioni di Lagrange per ciascuna coordinata j -sima

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0$$

Quella per la coordinata ciclica θ dà, come previsto, la conservazione del modulo del momento angolare p_θ , il momento coniugato a θ

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = 0 \quad \Rightarrow \quad p_\theta = \frac{\partial L}{\partial \dot{\theta}} = m r^2 \dot{\theta} = \text{costante}$$

L'altra equazione di Lagrange, per la coordinata r , è

$$m \ddot{r} - \frac{p_\theta^2}{m r^3} = - \frac{\partial V(r)}{\partial r} = f(r). \quad (4.4)$$

Da questa equazione possiamo ricavare la conservazione dell'energia meccanica totale. Infatti essa può essere riscritta nella forma:

$$m\ddot{r} = -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) \right)$$

e moltiplicando ambo i membri per \dot{r} si ha:

$$\begin{aligned} m\dot{r} \frac{dr}{dt} &= -\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) \right) \frac{dr}{dt} \\ \frac{d}{dt} \frac{1}{2} m\dot{r}^2 &= -\frac{d}{dt} \left(\frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) \right) \end{aligned}$$

dalla quale si ha il risultato cercato

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) \right) = 0 \quad (4.5)$$

L'energia, espressa dall'Hamiltoniano H , si conserva

$$H = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) = T + V = \text{costante}$$

e può essere riscritta nella forma

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + V(r) \quad (4.6)$$

dove

$$p_r = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} = m\dot{r} \quad (4.7)$$

è l'impulso radiale, cioè il momento coniugato alla coordinata r . Considerazione importante da fare, a proposito sia dell'equazione radiale del moto (4.4) che dell'Hamiltoniano (4.6), è che sono gli stessi di una particella che si muove in una dimensione, salvo due importanti modifiche:

1. oltre al potenziale di interazione $V(r)$ è presente anche il termine $\frac{p_\theta^2}{2mr^2}$, che viene detto *potenziale centrifugo*, detto così perché la sua singolarità (repulsiva) in $r = 0$ tiene lontana la particella dal centro del potenziale;
2. la coordinata r non va da $-\infty$ a ∞ , ma da 0 a ∞ .

Notiamo che l'espressione per l'energia cinetica ci dice che

$$p^2 = p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2}. \quad (4.8)$$

che esprime il modulo quadro di \vec{p} come la somma dei quadrati delle componenti lungo la direzione di \vec{r} e quella perpendicolare. Vedremo che la stessa espressione vale anche in Meccanica Quantistica e che, di conseguenza, anche l'operatore Hamiltoniano coincide formalmente con l'Hamiltoniano classico; tuttavia, questo richiede un'opportuna definizione dell'operatore impulso radiale p_r .

4.2.2 Operatore impulso radiale

L'impulso radiale classico $p_r = m\dot{r}$, può anche essere scritto nella forma

$$p_r = \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p}$$

In Meccanica Quantistica non possiamo trasformare questa espressione semplicemente sostituendo le variabili classiche con gli operatori quantistici, in quanto esistono più espressioni classicamente equivalenti che si ottengono commutando le grandezze presenti, laddove gli operatori \vec{r} e \vec{p} non commutano. Per risolvere questa ambiguità, sceglieremo l'operatore p_r in modo che soddisfi ad alcuni opportuni criteri.

Definiamo operatore *impulso radiale* l'operatore definito nella rappresentazione della posizione:

$$p_r = \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) = \frac{1}{r} \vec{r} \cdot \vec{p} + \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \quad (4.9)$$

dove, per l'ultimo passaggio, abbiamo utilizzato la (10.4)¹. Verifichiamo che questo operatore soddisfa alcune auspicabili **proprietà**:

1. p_r è l'operatore coniugato all'operatore r , cioè $[r, p_r] = i\hbar$
2. p_r è hermitiano
3. p_r soddisfa la relazione classica (4.8).

Dimostriamo queste proprietà

1. data una generica funzione d'onda ψ risulta

$$[r, p_r]\psi = \left[r, \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right) \right] \psi = \left[r, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r} \right] \psi = \frac{\hbar}{i} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} - \psi - r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) = i\hbar \psi.$$

Questa proprietà non è sufficiente a determinare l'operatore impulso radiale, perché, al termine con la derivata rispetto a r , potremmo sommare qualsiasi funzione di r senza modificare il commutatore.

2. Per dimostrare l'hermitianità di p_r utilizziamo le regole di commutazione tra componenti della posizione e dell'impulso e la relazione, di facile dimostrazione,

$$r \frac{\partial}{\partial r} \frac{1}{r} = \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}.$$

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

L'operatore p_r , tuttavia, non è ben definito nell'origine e la sua hermitianità dipende dal comportamento delle funzioni sulle quali opera. Questo fatto è chiaro se ricordiamo che se p_r è hermitiano deve risultare $\langle \psi | p_r | \psi \rangle \in \mathcal{R}$ per ogni $|\psi\rangle$. Nello spazio delle funzioni d'onda questa condizione diventa:

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} \psi^* p_r \psi - \int d\vec{r} (p_r \psi)^* \psi &= 0 \\ \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty r^2 dr \frac{\hbar}{i} \left[\psi^* \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi) + \psi \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r\psi^*) \right] &= 0 \end{aligned}$$

¹Notiamo che una scelta naturale sarebbe quella di associare all'impulso radiale classico $\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p}$ l'operatore quantistico

$$D_r = \frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial z} \right) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial r}.$$

Tuttavia, D_r non è autoaggiunto. Infatti, (ricordare che $\frac{\partial}{\partial x} \frac{x}{r} = \frac{1}{r} - \frac{x^2}{r^3}$)

$$D_r^\dagger = \left(\frac{\vec{r}}{r} \cdot \vec{p} \right)^\dagger = \vec{p} \cdot \frac{\vec{r}}{r} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r} \right).$$

La definizione scelta (4.9) corrisponde ad un operatore sicuramente autoaggiunto:

$$p_r = \frac{D_r + D_r^\dagger}{2} = \frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right).$$

$$\int_0^\pi \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\infty dr \frac{\partial}{\partial r} |r\psi|^2 = 0$$

Occorre, dunque, che accada

$$|r\psi|^2 \Big|_0^\infty = 0$$

Sicuramente la ψ , essendo normalizzabile, si annulla più rapidamente di $1/r$ all'infinito. In definitiva, perchè p_r sia hermitiano, occorre delimitare lo spazio delle funzioni d'onda con la condizione

$$\lim_{r \rightarrow 0} r\psi = 0 \quad (4.10)$$

Notiamo che, nello spazio in cui p_r è hermitiano, la sua equazione agli autovalori non ha soluzione. Infatti

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r\psi(r)] &= \alpha\psi(r) \\ \frac{\partial}{\partial r} [r\psi(r)] &= \frac{i\alpha}{\hbar} [r\psi(r)] \\ \psi(r) &= \frac{1}{r} e^{\frac{i\alpha r}{\hbar}} \end{aligned}$$

che non soddisfa la condizione (4.10).

3. Denotiamo con r_i le componenti di \vec{r} e con p_i le componenti di \vec{p} , abbiamo:

$$L^2 = \vec{L} \cdot \vec{L} = \sum_i \sum_{j,k} \sum_{l,m} \epsilon_{i,j,k} \epsilon_{i,l,m} r_j p_k r_l p_m$$

Usando la relazione, di facile dimostrazione,

$$\sum_i \epsilon_{i,j,k} \epsilon_{i,l,m} = \delta_{j,l} \delta_{k,m} - \delta_{j,m} \delta_{k,l}$$

abbiamo

$$L^2 = \sum_{j,k} (r_j p_k r_j p_k - r_j p_k r_k p_j).$$

Applicando ripetutamente la relazione di commutazione

$$[r_j, p_k] = i\hbar \delta_{j,k}$$

si ottiene

$$\begin{aligned} L^2 &= \sum_{j,k} (r_j r_j p_k p_k - i\hbar \delta_{j,k} r_j p_k - r_j p_k p_j r_k - i\hbar \delta_{j,k} r_j p_k) = \\ &= \sum_{j,k} (r_j^2 p_k^2 - 2i\hbar \delta_{j,k} r_j p_k - r_j p_j r_k p_k + i\hbar r_j p_j) = \\ &= r^2 p^2 - 2i\hbar \sum_j r_j p_j - \sum_j r_j p_j \sum_k r_k p_k + 3i\hbar \sum_j r_j p_j = \\ &= r^2 p^2 - (\vec{r} \cdot \vec{p})^2 + i\hbar \vec{r} \cdot \vec{p}. \end{aligned}$$

Dalla definizione di impulso radiale (4.9) vediamo che $\vec{r} \cdot \vec{p} = r p_r + i\hbar$, per cui

$$\begin{aligned} L^2 &= r^2 p^2 - \vec{r} \cdot \vec{p} (\vec{r} \cdot \vec{p} - i\hbar) = r^2 p^2 - (r p_r + i\hbar) r p_r = \\ &= r^2 p^2 - r p_r r p_r - i\hbar r p_r = r^2 p^2 - r r p_r p_r + i\hbar r p_r - i\hbar r p_r = \\ &= r^2 p^2 - r^2 p_r^2 \end{aligned}$$

dalla quale ricaviamo quanto volevamo dimostrare:

$$p^2 = p_r^2 + \frac{L^2}{r^2} \quad (4.11)$$

Il quadrato dell'impulso radiale è dato da

$$p_r^2 = \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} r \right) = -\hbar^2 \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r. \quad (4.12)$$

Essendo p_r hermitiano, p_r^2 ha valori di aspettazione sempre positivi e questo garantisce, attraverso la (4.11), che questo valga anche per l'energia cinetica.

4.2.3 Equazione di Schrödinger radiale

Ritorniamo all'equazione di Schrödinger esprimendola in coordinate sferiche tramite la (4.11)

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi_E(r, \theta, \phi) = E\psi_E(r, \theta, \phi) \quad (4.13)$$

Come abbiamo appena visto p_r^2 dipende solo da r , mentre sappiamo che L^2 dipende solo da θ e ϕ e L_z dipende solo da ϕ . Per questo motivo \mathcal{H} commuta con L^2 e L_z , i quali commutano tra di loro:

$$[\mathcal{H}, L^2] = [\mathcal{H}, L_z] = [L^2, L_z] = 0 \quad (4.14)$$

Abbiamo, pertanto, individuato 3 osservabili compatibili e possiamo scegliere un sistema completo di autofunzioni comuni ad essi. Vediamo infatti che soluzioni dell'equazione di Schrödinger della forma:

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \phi) = R(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (4.15)$$

sono sicuramente anche autofunzioni di L^2 e L_z . $R(r)$ deve essere soluzione dell'equazione

$$\left[\frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] R_{E,\ell}(r) = ER_{E,\ell}(r) \quad (4.16)$$

dove abbiamo scritto $R(r) = R_{E,\ell}(r)$ per sottolineare che essa dipende dall'autovalore dell'Hamiltoniano e deve essere risolta ad ℓ fissato. Questa equazione viene anche detta equazione di Schrödinger radiale e la funzione $R_{E,\ell}(r)$ funzione radiale. Mentre l'andamento delle autofunzioni nelle coordinate angolari è universale, la dipendenza dalla coordinata radiale dipende dal potenziale e va determinata caso per caso. Sostituendo in questa equazione l'espressione (4.12) si ottiene un'equazione più semplice per la funzione

$$U_{E,\ell}(r) = r R_{E,\ell}(r) \quad (4.17)$$

cioè

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} + V(r) \right] U_{E,\ell}(r) = EU_{E,\ell}(r) \quad (4.18)$$

anch'essa conosciuta come equazione di Schrödinger radiale, non essendoci rischio di confusione dato che sono riferite a funzioni differenti.

Notiamo che questa equazione è proprio un'equazione di Schrödinger unidimensionale (con l'aggiunta del termine centrifugo), per cui ad essa si applica quanto visto nello studio dei potenziali in una dimensione. Dobbiamo ricordare, tuttavia, che

- la coordinata r non va da $-\infty$ a ∞ , ma da 0 a ∞ ;
- la funzione d'onda è soggetta alla condizione di hermitianità (4.10), che per la $U(r)$ diventa

$$\lim_{r \rightarrow 0} U_{E,\ell}(r) = 0. \quad (4.19)$$

Questa condizione è equivalente, come abbiamo visto a proposito del pozzo in una dimensione, alla presenza di un potenziale che va a infinito nell'origine.

Riassumendo i risultati, per qualsiasi potenziale centrale possiamo scrivere le autofunzioni comuni ad \mathcal{H} , L^2 e L_z nella forma

$$\psi_{E,\ell,m}(r, \theta, \phi) = \frac{U_{E,\ell}(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (4.20)$$

dove $U_{E,\ell}(r)$ soltanto dipende dal potenziale considerato ed è soluzione dell'equazione (4.18).

4.2.4 Distribuzione radiale di probabilità

Nel passaggio alle coordinate sferiche la densità di probabilità diventa

$$P(\vec{r})d\vec{r} = |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz = |R_{E,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta d\phi r^2 dr \quad (4.21)$$

e, in termini della funzione $U(r)$,

$$P(r, \theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi r^2 dr = |U_{E,\ell}(r)Y_{\ell,m}(\theta, \phi)|^2 \sin\theta d\theta d\phi dr \quad (4.22)$$

Se vogliamo conoscere la distribuzione radiale e non siamo interessati alla dipendenza dalle variabili angolari, dobbiamo integrare su di esse e, tenendo conto del fatto che le Armoniche Sferiche sono normalizzate, otteniamo:

$$P(r) dr = |U_{E,\ell}(r)|^2 dr, \quad (4.23)$$

che è la probabilità di trovare la particella tra r e $r + dr$.

4.2.5 Comportamento delle autofunzioni nell'origine

Come abbiamo visto, il punto $\vec{r} = 0$, che nelle coordinate cartesiane non si differenzia dagli altri punti, nelle coordinate sferiche assume un ruolo particolare a causa del fatto che in questo punto esse non sono univoche. Altra caratteristica dell'origine è che essa è un punto di singolarità del potenziale centrifugo. Facciamo l'ipotesi che il potenziale $V(r)$ abbia nell'origine un comportamento meno singolare di r^{-2} :

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0.$$

In questo caso l'equazione radiale (4.18) è dominata nell'intorno dell'origine dal termine centrifugo, per cui può essere approssimata da

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 U_\ell(r)}{dr^2} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} U_\ell(r) = 0. \quad (4.24)$$

Questa equazione ha soluzioni del tipo $U_\ell(r) = r^\alpha$. Sostituendo si ha

$$\alpha(\alpha - 1) = \ell(\ell + 1) \quad \Rightarrow \quad \alpha = \ell + 1 \text{ o } -\ell \quad (4.25)$$

La soluzione $U_\ell(r) \sim r^{-\ell}$ non soddisfa la condizione (4.19) di hermitianità dell'operatore p_r neanche per $\ell = 0$, anche se è opportuno notare che in questo caso l'approssimazione (4.24) non è lecita.

Possiamo, quindi, concludere che, per questi tipi di potenziale, la funzione d'onda ha un comportamento

$$U_\ell(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\ell+1} \quad (4.26)$$

e la densità di probabilità (4.23)

$$P(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{2\ell+2}, \quad (4.27)$$

mostrando che la funzione repulsiva della barriera centrifuga in Fisica Classica si traduce, in Meccanica Quantistica, nell'azzerarsi della probabilità radiale nell'origine, tanto più rapido, quanto più grande è il momento angolare.

4.3 Modelli in 3 dimensioni

4.3.1 Particella libera

Come abbiamo visto nello studio dei sistemi unidimensionali, la particella libera, cioè in assenza di potenziale, è uno dei casi più semplici in cui il moto si separa nelle singole coordinate cartesiane. Abbiamo anche visto che le autofunzioni comuni all'Hamiltoniano (Energia Cinetica) e alle tre componenti dell'impulso sono date dalle onde piane:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (4.28)$$

autofunzione corrispondente alla terna di autovalori dell'impulso e all'autovalore dell'energia:

$$\vec{p} \equiv (p_x, p_y, p_z) \equiv \hbar \vec{k} \equiv (\hbar k_x, \hbar k_y, \hbar k_z) \quad E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \quad (4.29)$$

Lo spettro di tutti i suddetti operatori è continuo. Gli autovalori dell'energia assumono solo valori positivi e sono infinitamente degeneri, dato che fissando l'energia si fissa solo il modulo dell'impulso ed esistono infiniti a due vettori con modulo fissato.

Ricordiamo che le onde piane sono ortonormali:

$$\int d\vec{r} \psi_{\vec{k}'}^*(\vec{r}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (4.30)$$

mentre vale la relazione di completezza

$$\int d\vec{k} |\vec{k}\rangle \langle \vec{k}| = \mathbb{I} \quad \Rightarrow \quad \int d\vec{k} \langle \vec{r}' | \vec{k} \rangle \langle \vec{k} | \vec{r} \rangle = \langle \vec{r}' | \vec{r} \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r})$$

Ricordiamo, infine, che le componenti del Momento Angolare non commutano con quelle dell'Impulso e, quindi, le onde piane non possono, in generale, rappresentare stati di momento angolare definito (ovviamente nel senso di essere autofunzioni di L^2 e di una delle componenti di \vec{L}).

4.3.2 Particella libera in coordinate sferiche

L'uso delle coordinate sferiche consente, anche per la particella libera, di introdurre delle funzioni d'onda che sono anche autofunzioni degli operatori di momento angolare. Queste autofunzioni hanno la forma (4.15)

$$\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \phi) = \frac{U_{k,\ell}(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (4.31)$$

dove abbiamo usato il simbolo $k = \sqrt{2mE}/\hbar$ per contrassegnare l'autovalore dell'energia. La funzione $U_{k,\ell}$ è soluzione dell'equazione radiale (4.18), che possiamo riscrivere:

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,\ell}(r) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (4.32)$$

Con i seguenti cambiamenti di variabile indipendente e dipendente

$$z = kr \quad \text{e} \quad \phi(z) = \frac{U_{k,\ell}(z)}{z} \quad (4.33)$$

ci riportiamo all'equazione (10.21)

$$z^2 \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) + 2z \frac{d}{dz} \phi(z) + [z^2 - \ell(\ell+1)] \phi(z) = 0. \quad (4.34)$$

Questa equazione è nota come equazione di Bessel sferica. I suoi integrali sono esprimibili, per ℓ intero, come combinazioni di potenze e funzioni trigonometriche di z . Notiamo che l'equazione è invariante per la trasformazione $\ell \rightarrow -\ell - 1$, quindi se ϕ_ℓ è una soluzione lo è anche $\phi_{-\ell-1}$. Due integrali linearmente indipendenti sono, in effetti, le *funzioni di Bessel sferiche di prima e seconda specie* j_ℓ e $y_\ell = (-1)^{\ell+1} j_{-\ell-1}$ le cui proprietà sono presentate nei testi che trattano le funzioni speciali (vedi ad esempio [4]). Richiameremo di volta in volta le proprietà utili ai fini del corso. Le funzioni di Bessel sferiche relative ai primi valori di ℓ sono mostrate in appendice (10.22-10.25).

Il potenziale nullo è, ovviamente, un caso particolare dei potenziali che nell'origine ha un comportamento meno singolare di r^{-2} . Ci aspettiamo quindi, per $U_{k,\ell}$ una soluzione che nell'origine si comporta come $r^{\ell+1}$ e un'altra, da scartare, che si comporta come $r^{-\ell}$. Questo, effettivamente, si verifica in quanto è noto che $j_\ell(z)$ si comporta nell'origine come z^ℓ , e $y_\ell(z)$ deve essere scartata, perché si comporta come $z^{-\ell-1}$ (ricordiamo che $U_{k,\ell}(z) = z \phi(z)$).

Riassumendo, abbiamo trovato le soluzioni dell'equazione radiale per una particella libera nella forma:

$$\psi_{k,\ell,m}(r,\theta,\phi) = C j_\ell(kr) Y_{\ell,m}(\theta,\phi) \quad (4.35)$$

dove C è una costante di normalizzazione. Queste soluzioni prendono il nome di onde sferiche e costituiscono il sistema ortonormale completo di autofunzioni comuni ad \mathcal{H} , L^2 , L_z . È interessante notare che l'autovalore dell'energia per le onde piane ha una degenerazione continua, mentre nel caso delle onde sferiche la degenerazione è sempre infinita, ma numerabile.

4.3.3 Sviluppo delle onde piane in onde sferiche

Poiché le onde sferiche costituiscono un sistema ortonormale completo, deve essere possibile considerare ogni onda piana come sovrapposizione di onde sferiche. Se consideriamo un'onda piana di energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, essa potrà essere sviluppata in serie di onde sferiche corrispondenti alla stessa energia:

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} a_{\ell,m} j_\ell(kr) Y_{\ell,m}(\theta,\phi) \quad (4.36)$$

Scegliendo l'asse z lungo la direzione del vettore d'onda \vec{k} , l'onda piana diventa $e^{ikr \cos \theta}$, che non dipende da ϕ . Anche il secondo membro non deve dipendere da ϕ e, poiché è una sovrapposizione di funzioni linearmente indipendenti, questo può avvenire solo se ad essa contribuiscono solo i termini con $m = 0$, i quali non dipendono da ϕ . Le armoniche sferiche per $m = 0$ sono date da:

$$Y_{\ell,0}(\theta,\phi) = \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}} P_\ell(\cos \theta)$$

e quindi la (4.36) si riduce a

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta)$$

dove abbiamo inglobato le varie costanti in a_ℓ . Per determinare tali coefficienti moltiplichiamo ambo i membri per $P_{\ell'}(\cos \theta)$ e integriamo su $\cos \theta$. Utilizzando la relazione di ortonormalità dei Polinomi di Legendre:

$$\int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) P_{\ell'}(z) = \frac{2}{2\ell+1} \delta_{\ell,\ell'}.$$

si ottiene

$$\int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) e^{ikrz} = \frac{2a_\ell}{2\ell+1} j_\ell(kr) \quad (4.37)$$

Sfruttando il fatto che questa relazione deve valere per ogni r , possiamo evitare di calcolare l'integrale confrontando gli andamenti asintotici in r . Lo sviluppo in serie del primo membro della (4.37) può essere ottenuto iterando integrazioni per parti:

$$\begin{aligned} \int_{-1}^{+1} dz P_\ell(z) e^{ikrz} &= \frac{1}{ikr} [e^{ikrz} P_\ell(z)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{+1} dz P'_\ell(z) e^{ikrz} = \\ &= \frac{1}{ikr} [e^{ikrz} P_\ell(z)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr} \left\{ \frac{1}{ikr} [e^{ikrz} P'_\ell(z)]_{-1}^{+1} - \frac{1}{ikr} \int_{-1}^{+1} dz P''_\ell(z) e^{ikrz} \right\} = \\ &= \frac{1}{ikr} [e^{ikrz} P_\ell(z)]_{-1}^{+1} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right)^2 = \frac{1}{ikr} [e^{ikr} - e^{i\pi\ell} e^{-ikr}] + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right)^2 = \\ &= \frac{2}{kr} e^{\frac{i\pi\ell}{2}} \sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{r}\right)^2 \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato la proprietà dei polinomi di Legendre $P_\ell(\pm 1) = (\pm 1)^\ell$.

Per l'andamento asintotico del secondo membro della (4.37) usiamo la (10.30), e quindi dalla (4.37) otteniamo

$$\frac{2}{kr} i^\ell \sin\left(kr - \frac{\pi\ell}{2}\right) = \frac{2a_\ell}{2\ell + 1} \frac{1}{kr} \cos\left(kr - \frac{\ell + 1}{2} \pi\right)$$

dalla quale, semplificando, ricaviamo l'espressione per gli a_ℓ :

$$a_\ell = i^\ell (2\ell + 1). \quad (4.38)$$

Otteniamo così lo sviluppo delle onde piane in onde sferiche

$$e^{i\vec{k}\vec{r} \cos\theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell + 1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos\theta) \quad (4.39)$$

Ricordiamo, però, che questa espressione è valida in un sistema di riferimento con l'asse z lungo la direzione del vettore d'onda \vec{k} . Per generalizzarla ad un sistema di riferimento qualsiasi utilizziamo il Teorema di Somma delle Armoniche sferiche (10.16), considerando che θ è l'angolo tra la direzione di \vec{k} e quella di \vec{r} . Avremo

$$e^{i\vec{k}\vec{r}} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} i^\ell j_\ell(kr) Y_{\ell,m}^*(\Theta, \Phi) Y_{\ell,m}(\theta', \phi'), \quad (4.40)$$

dove (Θ, Φ) e (θ', ϕ') sono le direzioni di \vec{k} e di \vec{r} .

4.3.4 Particella in una sfera

Vogliamo determinare gli autovalori (livelli) dell'energia per una particella circondata da una sfera di potenziale impenetrabile, all'interno della quale il potenziale è nullo. In questo problema, come in quelli immediatamente seguenti, ci limitiamo allo studio dello spettro discreto (stati legati). La parte dello spettro continuo, che si occupa del caso in cui la particella è esterna alla sfera, sarà oggetto, successivamente, del capitolo sullo scattering.

Denotiamo con R il raggio della sfera. La sua impenetrabilità comporta che la funzione d'onda si annulli sulla superficie, di modo che la corrente sia nulla. Siamo, dunque, in presenza di pareti con potenziale infinito. All'interno, invece, la particella è libera; le sue autofunzioni sono, per quanto già visto, date dalla (4.35). In particolare, a parte normalizzazione, la funzione d'onda radiale è data da

$$R_{k,\ell}(r) = j_\ell(kr).$$

Essa si deve annullare sulla parete, cioè

$$j_\ell(kR) = 0.$$

Le funzioni di Bessel sferiche dipendono da funzioni trigonometriche ed hanno infiniti zeri che possiamo numerare in ordine crescente. Detto $\bar{z}_{n_r,\ell}$ lo n_r -simo zero della funzione j_ℓ , perché $j_\ell(kR)$ si annulli deve risultare $k = \frac{\bar{z}_{n_r,\ell}}{R}$. Deduciamo che possibili autovalori dell'energia sono solo quelli che soddisfano la relazione

$$E_{n_r,\ell} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\bar{z}_{n_r,\ell}^2}{R^2}. \quad (4.41)$$

n_r viene detto numero quantico radiale, per differenziarlo dal numero quantico orbitale ℓ . Gli zeri delle funzioni di Bessel sferiche sono tabulati (vedi, ad esempio, [4]) o possono essere ottenuti da programmi di manipolazione matematica.

Nella figura 4.2 sono riportate le prime funzioni di Bessel sferiche ($\ell = 0, 1, 2, 3$). Da essa si può vedere che lo stato fondamentale è ottenuto dal primo zero di j_0 , che è π . In ordine crescente i livelli successivi sono ottenuti dal primo zero di j_1 e j_2 , il terzo livello eccitato dal secondo zero di j_0 , il quarto livello eccitato dal primo zero di j_3 .

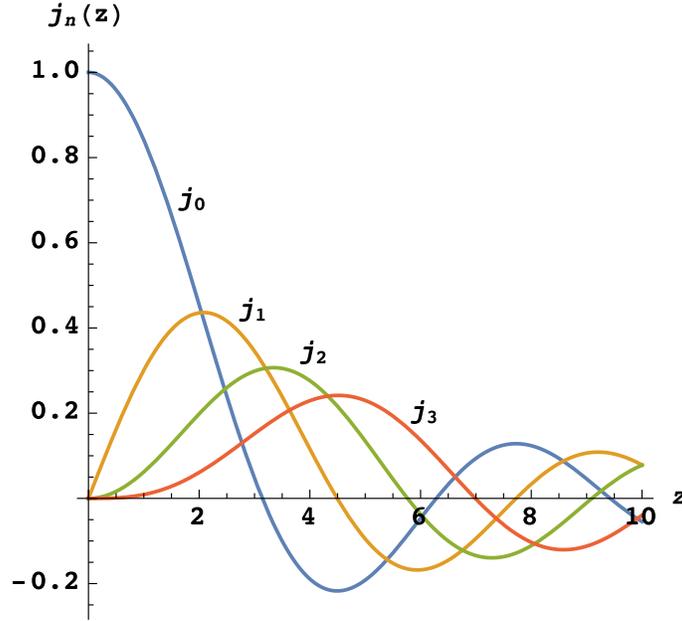


Figura 4.2: Le prime funzioni di Bessel sferiche

4.3.5 Stati legati di una particella in una buca sferica di potenziale

Vogliamo determinare gli autovalori dell'energia degli stati legati per una particella in presenza del potenziale:

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{per } r > a; \\ -V_0, & \text{per } r < a. \end{cases} \quad (4.42)$$

La presenza del potenziale centrifugo genera un potenziale efficace pari a

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2} \quad (4.43)$$

mostrato in nero in figura 4.3. Con riferimento a quanto visto per le proprietà generali dell'equazione di Schrödinger in una dimensione, condizione necessaria perchè ci possano essere stati legati è che esista un minimo del potenziale più basso del valore asintotico che è nullo. Poiché il minimo è posizionato sempre in $r = a$, questo equivale alla condizione

$$V_0 > \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2ma^2}. \quad (4.44)$$

Possiamo già dire che ci sono situazioni per le quali non si hanno stati legati ed altre per le quali essi sono presenti, ma solo per gli stati più bassi di momento angolare. Vedremo, tuttavia, la condizione (4.44) non è una condizione sufficiente per garantire la presenza di stati legati.

A fissati valore di ℓ e di energia $E < 0$ possiamo distinguere due regioni a seconda che r sia minore o maggiore di a .

Regione I: $r < a$

All'interno della sfera abbiamo un potenziale costantemente uguale a $-V_0$. L'equazione radiale è quella di una particella libera (4.32)

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,\ell}(r) + \left[k^2 - \frac{\ell(\ell + 1)}{r^2} \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (4.45)$$

con numero d'onda k dato da

$$k^2 = \frac{2m(E + V_0)}{\hbar^2}.$$

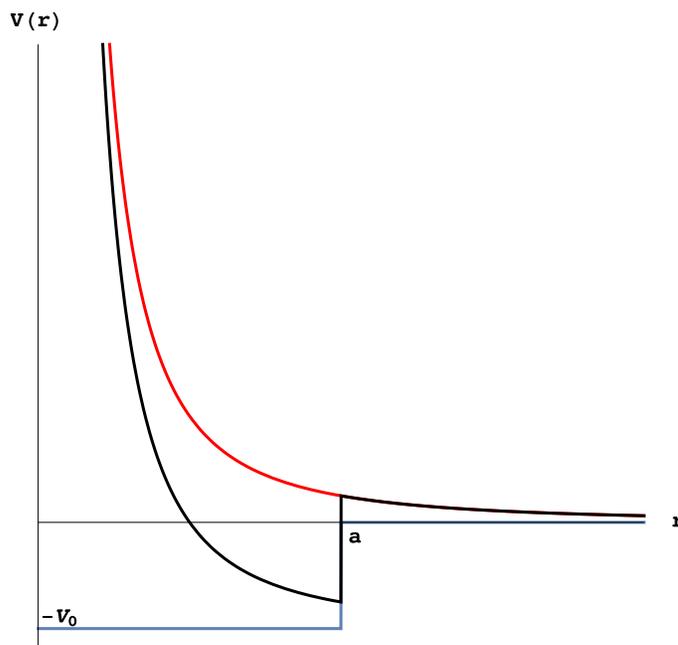


Figura 4.3: Il potenziale della buca (blu), che sommato al potenziale centrifugo (rosso) dà luogo al potenziale efficace (nero)

Poichè l'origine è compresa in questa regione, l'unica soluzione accettabile è

$$U_{k,\ell}(r) = A r j_\ell(kr) \quad (4.46)$$

dove A è una costante.

Regione II: $r > a$

Anche all'esterno della sfera il potenziale è costante, ma ora il suo valore è nullo. L'equazione radiale è quella di una particella libera (4.32) con autovalori, però, negativi.

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,\ell}(r) + \left[-\chi^2 - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (4.47)$$

dove χ è dato da

$$\chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} > 0.$$

Le soluzioni di questa equazione sono ancora delle funzioni di Bessel sferiche, con la sostituzione $k \rightarrow i\chi$. La condizione da imporre su queste soluzioni non è l'andamento regolare nell'origine, che non fa parte di questa regione, ma che non abbia divergenze, in particolare per $r \rightarrow +\infty$. Da quanto esposto in Appendice, vediamo che le soluzioni con corretto andamento asintotico sono le funzioni di Hankel sferiche di I specie (10.38).

La soluzione in questa regione è, dunque, data da:

$$U_{k,\ell}(r) = B r h_\ell^{(1)}(i\chi r) \quad (4.48)$$

Raccordo delle soluzioni

Come sappiamo, le soluzioni devono coincidere in $r = a$ insieme alle loro derivate, o, equivalentemente insieme alle loro derivate logaritmiche. La condizione di continuità delle soluzioni determina il rapporto B/A (la condizione di normalizzazione consente di determinare il modulo di ciascuno di essi).

La condizione di continuità della derivata logaritmica determina, invece, lo spettro degli autovalori dell'energia. Infatti essa comporta:

$$\frac{1}{h_\ell^{(1)}(i\chi a)} \left[\frac{d}{dr} h_\ell^{(1)}(i\chi r) \right]_{r=a} = \frac{1}{j_\ell(ka)} \left[\frac{d}{dr} j_\ell(kr) \right]_{r=a} \quad (4.49)$$

Notiamo che k e χ , non sono variabili indipendenti, in quanto

$$\chi^2 = -\frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2, \quad (4.50)$$

quindi, in generale il raccordo delle derivate logaritmiche, cioè l'esistenza di una soluzione valida in entrambe le regioni, sarà possibile per determinati valori dell'energia.

Poichè abbiamo visto che per grandi valori di ℓ non ci sono autovalori, l'equazione (4.49) deve essere risolta a partire da $\ell = 0, 1, 2, \dots$ fino a quando è possibile.

Autovalori per $\ell = 0$

L'autovalore più basso in assoluto, quello dello stato fondamentale, si otterrà per $\ell = 0$, infatti aumentando il numero quantico orbitale il fondo della buca viene sollevato per effetto del potenziale centrifugo e gli autovalori saranno conseguentemente più alti. Dall'Appendice ricaviamo che

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad \text{e} \quad h_0^{(1)}(z) = -i \frac{e^{iz}}{z}$$

Sostituendo nella (4.49) troviamo

$$\chi = -k \cot ka. \quad (4.51)$$

Questa è esattamente la stessa equazione già trovata nel caso della buca in una dimensione relativamente alle soluzioni dispari. Si tratta di un risultato atteso, in quanto è assente il potenziale centrifugo. L'unica differenza è legata al dominio di appartenenza delle soluzioni, il quale, nel caso tridimensionale, è ristretto al semiasse positivo, con la condizione che la funzione d'onda radiale si azzeri nell'origine; questo, nel caso della buca in una dimensione, accadeva, appunto, per le soluzioni dispari. Risolviamo ugualmente la (4.51), sempre in maniera grafica, ma utilizzando un'altra strada.

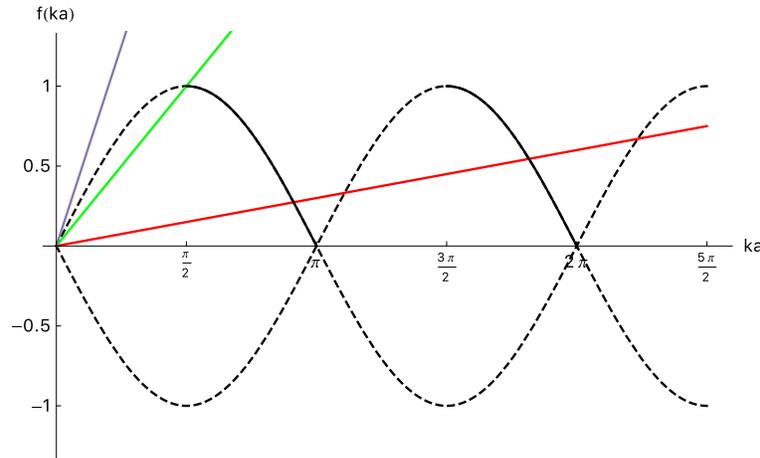


Figura 4.4: Soluzione grafica dell'equazione (4.51). Del I membro (in nero) sono da considerare i tratti disegnati in continuo. La retta a II membro è riportata per 3 valori differenti del coefficiente angolare: $0.3/\pi$ (rosso), $2/\pi$ (verde), $5/\pi$ (blu).

Sfruttando la (4.50) e la (4.51) abbiamo

$$\sin ka = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \cot^2 ka}} = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{\chi^2}{k^2}}} = \pm \sqrt{\frac{1}{1 + \frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}{k^2}}} = \pm \sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0}}$$

che possiamo anche riscrivere nella forma

$$\pm \sin ka = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}} ka. \quad (4.52)$$

Gli autovalori dell'energia si otterranno sempre dalla (4.50) in corrispondenza dei valori di ka per i quali le curve del I e del II membro si intersecano. Dovremo considerare il fatto che il II membro è sempre positivo e lo è anche ka . Inoltre, poichè nella quadratura abbiamo perso l'informazione sul segno della cotangente, ricordiamo che l'equazione (4.51) ci dice che esso deve essere negativo. Queste condizioni impongono che, del primo membro, dobbiamo considerare solamente i tratti rappresentati da linee nere continue nella figura (4.4). Vediamo che non esistono soluzioni se il coefficiente angolare della retta al II membro ha valori troppo elevati: esso non deve essere superiore a $2/\pi$, cioè

$$\sqrt{\frac{\hbar^2}{2mV_0a^2}} \leq \frac{2}{\pi} \quad \Leftrightarrow \quad V_0a^2 \geq \frac{\pi^2\hbar^2}{8m}$$

Concludiamo notando che, a differenza di quanto accade in una dimensione, dove esiste sempre almeno uno stato di parità positiva, in tre dimensioni per poter legare una particella la buca deve essere abbastanza profonda e larga. Questo si può intuire pensando al fatto che la funzione d'onda deve andare a zero nell'origine e per grandi r . Il raccordo tra questi due andamenti non può avvenire se la curvatura, che, come si vede dalla (4.45) cresce linearmente con V_0 , non è abbastanza grande oppure se la buca non è abbastanza larga.

4.3.6 Stati legati dell'atomo idrogenoide

Consideriamo l'interazione Coulombiana tra due particelle con carica opposta, l'interazione che dà luogo alle strutture atomiche. Noi consideriamo il caso più semplice, quello relativo all'atomo in cui sono presenti un nucleo di carica positiva $+Ze$ e un elettrone di carica negativa $-e$. Nel caso dell'atomo d'idrogeno $Z = 1$. Per Z differenti si tratta di atomi ionizzati con un unico elettrone. Il potenziale è, nelle unità di misura di Gauss,

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (4.53)$$

Gli stati atomici corrispondono agli stati legati ($E < 0$) per questo potenziale. Gli stati liberi corrispondono ad autovalori positivi dell'energia e rappresentano fenomeni di urto che saranno affrontati successivamente. In questo caso l'equazione radiale è data da

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{k,\ell}(r) + \left[\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{Ze^2}{r} \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (4.54)$$

Possiamo notare immediatamente, dal confronto dimensionale del primo termine con i termini in parentesi quadra, che questi ultimi hanno dimensione (*lunghezza*)⁻² e che, pertanto la grandezza $\frac{me^2}{\hbar^2}$ ha dimensione (*lunghezza*)⁻¹. Emerge, in conclusione, una scala di lunghezza naturale data da:

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = 5,291 \times 10^{-11} m, \quad (4.55)$$

che, per motivi che in seguito saranno chiari, viene detto raggio di *Bohr*.

Oltre alla grandezza χ legata all'autovalore E , già introdotta per gli altri problemi,

$$\chi = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (4.56)$$

al fine di semplificare la notazione, introduciamo la grandezza

$$\lambda = \frac{Ze^2m}{\chi\hbar^2} = Z\alpha \sqrt{\frac{mc^2}{2|E|}} \quad (4.57)$$

dove

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137} \quad (4.58)$$

è una quantità adimensionale, detta *costante di struttura fine*, per motivi che in seguito saranno chiariti. Dalla (4.57) vediamo che λ può essere espressa in termini della energia a riposo mc^2 . Si comprende facilmente che, almeno per ora, la relatività non svolge alcun ruolo, tuttavia questa notazione sarà utile quando si considereranno le correzioni allo spettro dell'energia legate a fenomeni relativistici.

In termini di questi parametri l'equazione radiale si riscrive

$$\frac{d^2}{dr^2} U_{E,\ell}(r) + \left[-\chi^2 + \frac{2\chi\lambda}{r} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} \right] U_{E,\ell}(r) = 0 \quad (4.59)$$

Spettro degli Autovalori

Notiamo che il potenziale Coulombiano è meno divergente di r^{-2} nell'origine. Sappiamo che in questi casi l'unica soluzione regolare in $r = 0$ deve avere l'andamento

$$U_{E,\ell}(r) \underset{r \rightarrow 0}{\sim} r^{\ell+1}, \quad (4.60)$$

mentre, come abbiamo visto discutendo il problema della buca sferica, nel limite $r \rightarrow \infty$, dato che il potenziale va a zero, abbiamo il comportamento limite delle funzioni sferiche di Hankel di I specie, cioè

$$U_{E,\ell}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{-\chi r}. \quad (4.61)$$

Proviamo, quindi, a imporre la fattorizzazione

$$U_{E,\ell}(r) = r^{\ell+1} e^{-\chi r} u(r) \quad (4.62)$$

dove $u(r)$ è una funzione da determinare che interpola i due andamenti.

Applicando all'equazione radiale (4.59) il cambiamento di variabile

$$t = 2\chi r, \quad (4.63)$$

si ottiene l'equazione

$$\frac{d^2}{dt^2} U_{E,\ell}(t) + \left[-\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{t} - \frac{\ell(\ell+1)}{t^2} \right] U_{E,\ell}(t) = 0 \quad (4.64)$$

e al posto dell'espressione (4.62) possiamo scrivere

$$U_{E,\ell}(t) = t^{\ell+1} e^{-\frac{t}{2}} u(t). \quad (4.65)$$

Sostituiamo quest'espressione nell'equazione (4.64). Abbiamo

$$t \frac{d}{dt} U_{E,\ell}(t) = t^\ell e^{-\frac{t}{2}} \left(\ell + 1 - \frac{t}{2} \right) u(t) + t^{\ell+1} e^{-\frac{t}{2}} \frac{d}{dt} u(t)$$

e

$$\frac{d^2}{dt^2} U_{E,\ell}(t) = e^{-\frac{t}{2}} \left\{ t^{\ell+1} \frac{d^2}{dt^2} u(t) + t^\ell (2\ell + 2 - t) \frac{d}{dt} u(t) + \left[\ell(\ell+1)t^{\ell-1} - (\ell+1)t^\ell + \frac{1}{4}t^{\ell+1} \right] u(t) \right\}$$

e l'equazione radiale diventa un'equazione per la funzione interpolante $u(t)$:

$$t \frac{d^2}{dt^2} u(t) + (2\ell + 2 - t) \frac{d}{dt} u(t) - (\ell + 1 - \lambda)u(t) = 0. \quad (4.66)$$

Questa equazione è l'equazione Ipergeometrica Confluente di Kummer, della quale si conoscono le soluzioni. Di essa cerchiamo le soluzioni che soddisfano gli andamenti (4.60) e (4.61). Utilizziamo il metodo di integrazione per serie, cioè cerchiamo una soluzione del tipo:

$$u(t) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k. \quad (4.67)$$

Sostituendo nella (4.66), abbiamo

$$\sum_{k=2}^{\infty} k(k-1) a_k t^{k-1} + (2\ell + 2 - t) \sum_{k=1}^{\infty} k a_k t^{k-1} - (\ell + 1 - \lambda) \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k = 0$$

Ridefinendo l'indice di somma $k-1 \rightarrow k$ nelle prime due sommatorie e separando la seconda sommatoria:

$$\sum_{k=1}^{\infty} (k+1)k a_{k+1} t^k + (2\ell + 2) \sum_{k=0}^{\infty} (k+1) a_{k+1} t^k - \sum_{k=1}^{\infty} k a_k t^k - (\ell + 1 - \lambda) \sum_{k=0}^{\infty} a_k t^k = 0$$

Notiamo che nel primo e terzo termine, per la presenza del fattore k , l'indice di somma può partire da 0. Questo ci consente di aggregare i termini che hanno gli stessi coefficienti a_k :

$$\sum_{k=0}^{\infty} [(k+1)(k+2\ell+2) a_{k+1} - (\ell+1-\lambda+k) a_k] t^k = 0$$

Dovrà, quindi, risultare

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} = \frac{\ell+1-\lambda+k}{(k+1)(k+2\ell+2)}. \quad (4.68)$$

Questo rapporto nel limite $k \rightarrow \infty$ si comporta

$$\frac{a_{k+1}}{a_k} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{k}.$$

Ne consegue che la serie (4.67) ha lo stesso andamento per grandi t (e, quindi, per grandi r) di $e^t = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{t^k}{k!}$. Se questo si verificasse, l'andamento asintotico della funzione radiale sarebbe:

$$U_{E,\ell}(r) = r^{\ell+1} e^{-\chi r} \sum_{k=0}^{\infty} a_k (2\chi r)^k \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} e^{\chi r}$$

che non è accettabile. Tuttavia, questo non accadrebbe se la serie si troncasse a partire da un certo k , cioè se esistesse un valore n_r di k tale che

$$\lambda = n_r + \ell + 1 \quad \text{con} \quad n_r = 0, 1, 2, \dots$$

n_r , il *numero quantico radiale*, è il grado del polinomio in cui la serie si riduce. Notiamo che anche λ è un intero, essendo somma di interi, e possiamo porre $\lambda = n$:

$$n = n_r + \ell + 1 \quad \text{con} \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.69)$$

Tramite l'equazione (4.57) risulta così determinato lo spettro dell'energia:

$$E_n = -\frac{1}{2} mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}. \quad (4.70)$$

Nel caso $Z = 1$, l'atomo d'idrogeno, lo stato fondamentale ha energia pari a $E_1 = -13.6eV$. Questo valore è rappresentativo delle energie di legame su scala atomica.

Alcune considerazione sullo spettro. L'energia non dipende separatamente dal numero quantico radiale n_r e dal numero quantico orbitale ℓ , ma da n , cioè dalla loro somma. Questo fatto è la causa di una degenerazione dei livelli, che prende il nome di degenerazione *accidentale*, in quanto presente solo nel potenziale coulombiano. Infatti, a parte il caso $n = 1$, che si ottiene solo quando sia n_r che ℓ sono nulli, a fissata energia (ad n fissato) il numero quantico orbitale può assumere n valori distinti:

$$\ell = 0, 1, \dots, n-1;$$

poiché a fissato ℓ si hanno $2\ell + 1$ autofunzioni (Armoniche sferiche) distinte corrispondenti ai valori di m

$$m = -\ell, -\ell + 1, \dots, 0, \dots, \ell - 1, \ell.$$

La degenerazione totale è, in definitiva,

$$\sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = [2(n-1) + 1 + 1] \frac{n}{2} = n^2 \quad (4.71)$$

Prima di esaminare le proprietà delle autofunzioni consideriamo *lo spettro di emissione* che esprime la frequenza delle radiazioni emesse quando un atomo passa dallo stato di energia E_i allo stato di energia più bassa E_j , in base alla formula di Bohr:

$$\nu_{i,j} = \frac{E_i - E_j}{h} = \frac{mc^2(Z\alpha)^2}{2h} \left(\frac{1}{n_j^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (4.72)$$

Notiamo che le frequenze dei fotoni emessi dipende dalla massa ridotta m del sistema nucleo-elettrone. Questo implica che lo spettro si differenzia a seconda dell'atomo idrogenoide che si considera. Questa proprietà permise nel 1931 la scoperta del deuterio (Harold Urey), isotopo dell'idrogeno con nucleo composto da un protone e un neutrone.

Autofunzioni e distribuzioni di probabilità

Torniamo ora alla relazione tra i coefficienti della serie in termini del numero quantico principale:

$$a_{k+1} = \frac{\ell + 1 - n + k}{(k+1)(k+2\ell+2)} a_k.$$

Fissato il primo coefficiente (e determinando così la normalizzazione), da questa relazione otteniamo tutti gli altri fino a quando $k = n_r = n - \ell - 1$. A partire da questo termine i coefficienti sono tutti nulli. Il polinomio di grado $n - \ell - 1$ così generato viene detto *polinomio associato di Laguerre* ed è indicato con il simbolo

$$L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}(2\chi r).$$

Ricordiamo per l'atomo idrogenoide vi è una scala di lunghezza naturale data dal *raggio di Bohr* (4.55):

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} = \frac{\hbar}{m\alpha}. \quad (4.73)$$

In termini di esso abbiamo:

$$\chi = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{2} mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}} = \frac{1}{n} \sqrt{m^2 c^2 \frac{(Z\alpha)^2}{\hbar^2}} = \frac{Z}{na_0} \quad (4.74)$$

Riassumendo le autofunzioni radiali sono date da

$$R_{n,\ell}(r) = \frac{U_{n,\ell}(r)}{r} = r^\ell e^{-\frac{Z}{na_0} r} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2Z}{na_0} r \right) \quad (4.75)$$

Considerazioni sulle distribuzioni di probabilità.

Ricordiamo (4.23) che la distribuzione di probabilità radiale data dal modulo quadro della funzione radiale U . Da questo derivano le seguenti peculiarità:

1. Come abbiamo già visto in generale, a piccoli r la probabilità radiale va come $r^{2\ell+2}$ e questo riproduce in termini probabilistici gli effetti della barriera centrifuga classica.
2. Le autofunzioni contengono i polinomi di Laguerre di grado $n_r = n - \ell - 1$, che hanno la proprietà di avere i propri zeri sull'asse reale. Per questo anche le distribuzioni di probabilità radiali hanno n_r zeri e $n_r + 1$ massimi, a causa del fatto che le autofunzioni si annullano anche in zero e all'infinito. Nel caso in cui ad energia fissata, cioè a n fissato, si considera il massimo valore di ℓ , cioè il valore $\ell = n - 1$, si ha $n_r = 0$ e, quindi, un unico massimo. Calcoliamo la posizione di questo massimo.

$$P(r) = |U_{n,\ell=n-1}|^2 = r^{2(n-1)+2} e^{-2\frac{Zr}{na_0}} = r^{2n} e^{-2\frac{Zr}{na_0}}$$

$$R_{1,0} = 2 \left(\frac{Z}{a_0} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{Zr}{a_0}}$$

$$R_{2,0} = 2 \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(1 - \frac{Zr}{2a_0} \right) e^{-\frac{Zr}{2a_0}} \quad R_{2,1} = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{2a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} e^{-\frac{Zr}{2a_0}}$$

$$R_{3,0} = 2 \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left[1 - \frac{2Zr}{3a_0} + \frac{2(Zr)^2}{27a_0^2} \right] e^{-\frac{Zr}{3a_0}} \quad R_{3,1} = \frac{4\sqrt{2}}{3} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{Zr}{a_0} \left[1 - \frac{Zr}{6a_0} \right] e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

$$R_{3,2} = \frac{2\sqrt{2}}{27\sqrt{5}} \left(\frac{Z}{3a_0} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^2 e^{-\frac{Zr}{3a_0}}$$

Tabella 4.1: Funzioni radiali dei primi livelli di energia dell'atomo idrogenoide

$$\frac{dP(r)}{dr} = \left(2nr^{2n-1} - 2\frac{Z}{na_0}r^{2n} \right) e^{-2\frac{Zr}{na_0}} = 0$$

La posizione del massimo è dunque:

$$r = \frac{n^2 a_0}{Z} = \frac{a_n}{Z}$$

questa quantità (a_n è il raggio di Bohr dell' n -simo livello) coincide con il calcolo semiclassico di Bohr per il raggio delle orbite circolari nell'Antica Teoria di Quanti.

Nella tabella (4.1) mostriamo, per i primi valori di n , le funzioni d'onda radiali. Le stesse funzioni sono riportate nella figura (4.5) insieme alle corrispondenti distribuzioni di probabilità radiale.

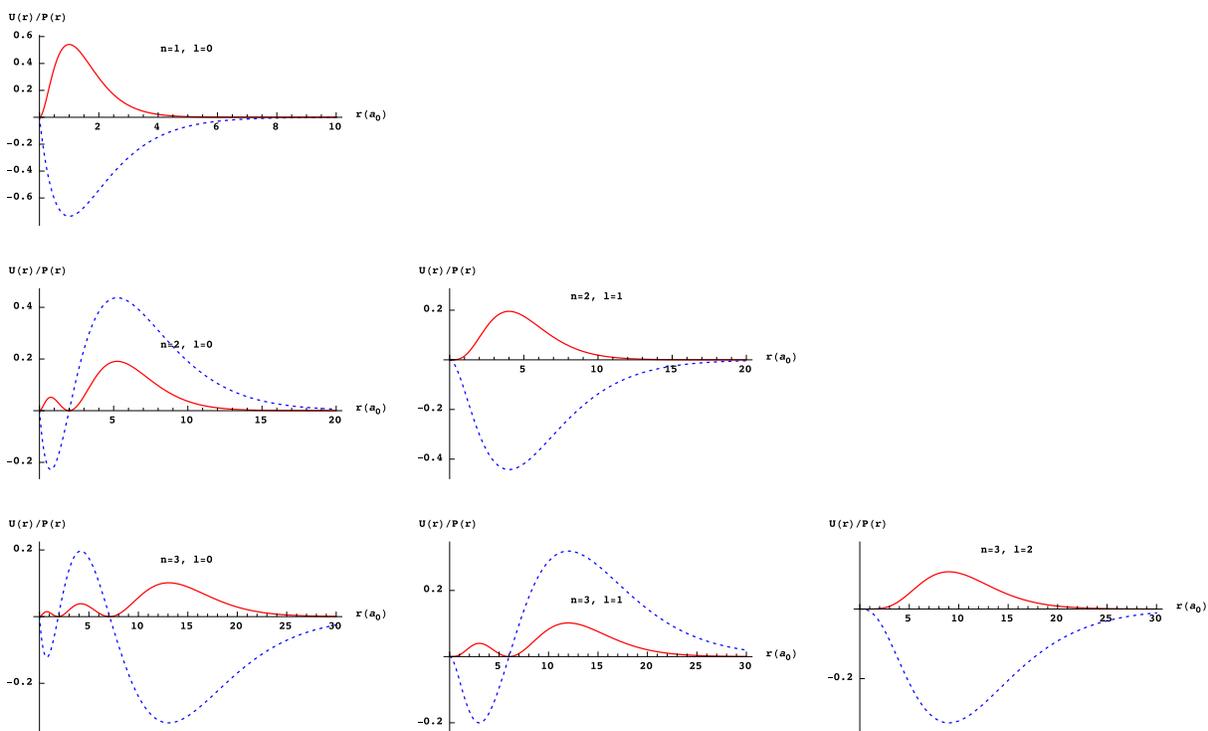


Figura 4.5: Le distribuzioni di probabilità (in rosso) per le autofunzioni con $n = 1, 2, 3$ e le corrispondenti funzioni d'onda radiali (tratteggiate in blu).

Capitolo 5

Teoria delle Perturbazioni

Bibliografia: questo capitolo ripercorre essenzialmente la trattazione del testo di Shankar [5].

5.1 Perturbazioni indipendenti dal tempo

In generale il problema degli autovalori non può essere risolto in maniera esatta. Consideriamo l'Hamiltoniano \mathcal{H} (ma quanto segue può essere applicato ad un qualsiasi operatore). Supponiamo di poter scrivere:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 \quad (5.1)$$

dove \mathcal{H}_0 è un'osservabile detta Hamiltoniano imperturbato, per il quale si suppone di saper risolvere l'equazione agli autovalori:

$$\mathcal{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle \text{ con } \langle n^0 | m^0 \rangle = \delta_{n,m} \quad (5.2)$$

Supponiamo, inoltre, che

1. lo spettro di \mathcal{H}_0 sia non degenere
2. \mathcal{H} non dipenda dal tempo.

Lo scopo è quello di trovare un'approssimazione agli autovalori ed autovettori di \mathcal{H} , cioè alla soluzione dall'equazione:

$$\mathcal{H} |n\rangle = E_n |n\rangle, \quad (5.3)$$

tale che, nel limite $\mathcal{H}_1 \rightarrow 0$ risulti $|n\rangle \rightarrow |n^0\rangle$.

Consideriamo uno sviluppo in serie (detta serie perturbativa) per E_n e $|n\rangle$:

$$|n\rangle = |n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots \quad (5.4)$$

$$E_n = E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots \quad (5.5)$$

dove l'indice superiore k di ciascun termine indica che esso è proporzionale alla k -esima potenza di \mathcal{H}_1 , o meglio, dato che si tratta di un operatore, dei suoi elementi di matrice nella base di \mathcal{H}_0 . Questi sviluppi in serie hanno senso se, al crescere dell'ordine k , i loro termini diventano sempre più piccoli, in modo da assicurarne la convergenza e poterne calcolare, tramite troncamento, delle approssimazioni.

La 5.3 può essere riscritta:

$$(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) (|n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots) = (E_n^0 + E_n^1 + E_n^2 + \dots) (|n^0\rangle + |n^1\rangle + |n^2\rangle + \dots). \quad (5.6)$$

Per calcolare i termini delle serie (5.4) e (5.5) imponiamo che I e II membro di questa equazione coincidono a ciascun ordine perturbativo.

All'ordine zero in \mathcal{H}_1 riotteniamo, ovviamente, l'equazione agli autovalori per \mathcal{H}_0 :

$$\mathcal{H}_0 |n^0\rangle = E_n^0 |n^0\rangle.$$

Al prim'ordine (termini come $\mathcal{H}_1|n^1\rangle$) sono del II ordine) abbiamo:

$$\mathcal{H}_0|n^1\rangle + \mathcal{H}_1|n^0\rangle = E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle. \quad (5.7)$$

Moltiplicando scalarmente ambo i membri della (5.7) per $\langle n^0|$ e sfruttando l'equazione agli autovalori per \mathcal{H}_0 :

$$\begin{aligned} \langle n^0|\mathcal{H}_0|n^1\rangle + \langle n^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle &= E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + E_n^1\langle n^0|n^0\rangle \\ E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + \langle n^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle &= E_n^0\langle n^0|n^1\rangle + E_n^1 \end{aligned}$$

Si ottiene la correzione al I ordine all'autovalore espressa come elemento di matrice di \mathcal{H}_1 nello stato non perturbato (valore medio):

$$E_n^1 = \langle n^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle \quad (5.8)$$

Al fine di ottenere la correzione al I ordine all'autoket, moltiplichiamo scalarmente ambo i membri della stessa (5.7) per un altro autoket di \mathcal{H}_0 , $\langle m^0|$, con $m \neq n$. Otteniamo:

$$\begin{aligned} \langle m^0|\mathcal{H}_0|n^1\rangle + \langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle &= E_n^0\langle m^0|n^1\rangle + E_n^1\langle m^0|n^0\rangle \\ E_m^0\langle m^0|n^1\rangle + \langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle &= E_n^0\langle m^0|n^1\rangle \end{aligned}$$

Da qui otteniamo la relazione:

$$\langle m^0|n^1\rangle = \frac{\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} \quad \text{per tutti gli } m \text{ con } m \neq n \quad (5.9)$$

Poiché nella base $\{|m^0\rangle\}$ l'approssimazione al I ordine dell'autoket si può scrivere nella forma

$$|n^1\rangle = \sum_m \langle m^0|n^1\rangle |m^0\rangle, \quad (5.10)$$

risulta che abbiamo determinato $|n^1\rangle$ a meno della sua componente parallela ad $|n^0\rangle$.

Dovendo il ket $|n\rangle$ essere normalizzato, determiniamo questa ultima componente imponendo $|n\rangle$ approssimato al I ordine, cioè $|n^0\rangle + |n^1\rangle$, sia normalizzato.

Trascurando gli ordini superiori al I:

$$\begin{aligned} 1 &= (\langle n^0| + \langle n^1|)(|n^0\rangle + |n^1\rangle) = \\ &= \langle n^0|n^0\rangle + \langle n^1|n^0\rangle + \langle n^0|n^1\rangle = \\ &= 1 + \langle n^1|n^0\rangle + \langle n^0|n^1\rangle. \end{aligned}$$

Quindi, a meno di ordini superiori,

$$\langle n^1|n^0\rangle + \langle n^0|n^1\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \Re(\langle n^0|n^1\rangle) = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle n^0|n^1\rangle = i\alpha \text{ con } \alpha \text{ reale e del I ordine.}$$

Poiché, al I ordine, $e^{i\alpha} = 1 + i\alpha$, possiamo scrivere

$$\langle n^0|n^1\rangle = e^{i\alpha} - 1$$

e, pertanto, lo sviluppo (5.10) diventa:

$$|n^1\rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle + (e^{i\alpha} - 1) |n^0\rangle$$

Al I ordine l'autoket $|n\rangle$ è dato quindi da:

$$|n\rangle \simeq |n^0\rangle + |n^1\rangle \simeq e^{i\alpha} |n^0\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle$$

Il fattore $e^{\iota\alpha}$ si può eliminare: possiamo moltiplicare ambo i membri per $e^{-\iota\alpha}$, i termini della sommatoria non sono modificati in quanto $e^{-\iota\alpha} = 1 - \iota\alpha$ e possiamo trascurare i termini del II ordine. Ridefinendo la fase arbitraria di $|n\rangle$ otteniamo infine:

$$|n\rangle \simeq |n^0\rangle + |n^1\rangle \simeq |n^0\rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} |m^0\rangle \quad (5.11)$$

Questo risultato comporta che il termine del I ordine di correzione all'autoket, $|n^1\rangle$ può essere preso ortogonale a $|n^0\rangle$:

$$\langle n^0 | n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \langle n^0 | m^0 \rangle = 0. \quad (5.12)$$

Determiniamo ora la correzione al II ordine E_n^2 all'autovalore. Consideriamo il II ordine dell'equazione 5.6:

$$\mathcal{H}_0 |n^2\rangle + \mathcal{H}_1 |n^1\rangle = E_n^0 |n^2\rangle + E_n^1 |n^1\rangle + E_n^2 |n^0\rangle.$$

Moltiplichiamo scalarmente ambo i membri per $\langle n^0 |$. Ricordando che $\langle n^0 | n^1 \rangle = 0$, si ottiene

$$\begin{aligned} E_n^0 \langle n^0 | n^2 \rangle + \langle n^0 | \mathcal{H}_1 | n^1 \rangle &= E_n^0 \langle n^0 | n^2 \rangle + E_n^2 \langle n^0 | n^0 \rangle \\ E_n^2 &= \langle n^0 | \mathcal{H}_1 | n^1 \rangle = \sum_{m \neq n} \frac{\langle n^0 | \mathcal{H}_1 | m^0 \rangle \langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \end{aligned}$$

In definitiva:

$$E_n^2 = \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n^0 | \mathcal{H}_1 | m^0 \rangle|^2}{E_n^0 - E_m^0} \quad (5.13)$$

Da questa espressione si può osservare che la correzione al II ordine dello stato fondamentale è sempre negativa.

Non saranno esaminate le correzioni di ordine superiore agli autovalori e agli autoket, dato che nelle applicazioni reali le correzioni devono essere abbastanza piccole, tanto da potersi fermare ai primi ordini.

A proposito della validità dello sviluppo perturbativo, possiamo osservare che affinché $|n^1\rangle$ dia luogo a correzioni piccole rispetto a $|n^0\rangle$ deve risultare

$$\left| \frac{\langle m^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle}{E_n^0 - E_m^0} \right| \ll 1 \quad \forall m \neq n.$$

Perché questo sia verificato occorre che:

1. gli elementi di matrice di \mathcal{H}_1 nella base $|n^0\rangle$ devono essere piccoli rispetto agli autovalori non perturbati;
2. non vi devono essere autovalori imperturbati vicini. In particolare, se E_n^0 è degenere, e dunque $\exists m \ni' E_m^0 = E_n^0$, occorre considerare un approccio alternativo.



5.2 Autovalori degeneri

Come si è detto, in presenza di autovalori degeneri le correzioni perturbative che abbiamo calcolato presentano singolarità e, quindi, non sono applicabili.

Quello che accade può essere compreso intuitivamente nel modo seguente. Supponiamo per semplicità che E_n^0 sia doppiamente degenere e di poter accendere in maniera continua la perturbazione \mathcal{H}_1 . In generale, la presenza della perturbazione romperà la degenerazione e avremo due nuovi autoket $|n\rangle$ e $|\bar{n}\rangle$ non necessariamente corrispondenti allo stesso autovalore. Se spengo lentamente \mathcal{H}_1 i due autoket si sposteranno in maniera continua su due autoket di \mathcal{H}_0 , supponiamo $|n^0\rangle$ e $|\bar{n}^0\rangle$, corrispondenti all'autovalore E_n^0 . Questo

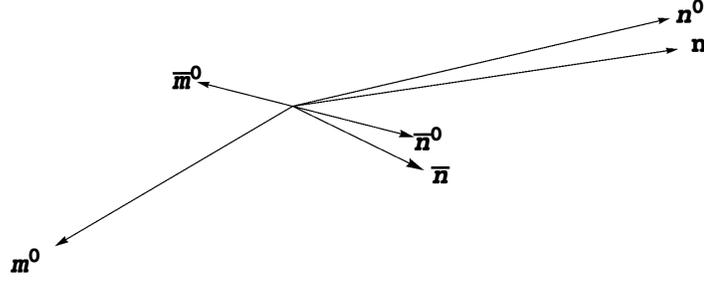


Figura 5.1: Perturbazione nel caso di autovalori degeneri. Se il punto di partenza non è opportuno la perturbazione genera una discontinuità nel comportamento degli autoket.

spostamento dei ket di base è reversibile: cioè riaccendendo gradualmente la perturbazione \mathcal{H}_1 si avrà la transizione graduale

$$|n^0\rangle \rightarrow |n\rangle \quad \text{e} \quad |\bar{n}^0\rangle \rightarrow |\bar{n}\rangle$$

Se, invece, i ket di partenza non sono $|n^0\rangle$ e $|\bar{n}^0\rangle$, ma un'altra qualsiasi coppia di autoket ortogonali del sottospazio relativo ad E_n^0 , anche se accendo in maniera infinitesima la perturbazione, avrò una variazione finita nei ket. In termini di sviluppo in serie, avremmo quel che succede ad una serie di potenze se sviluppiamo una funzione a partire da un suo punto di discontinuità.

Esaminando la (5.11), si comprende che il modo di individuare correttamente i ket di base $|n^0\rangle$, al fine di evitare la divergenza derivante dalla presenza di due stati $|n^0\rangle$ e $|m^0\rangle$ con $E_n^0 = E_m^0$, è quello di imporre che gli elementi di matrice di $\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle$ siano nulli per $m \neq n$, cioè che la matrice sia diagonale. Per quanto riguarda le correzioni al prim'ordine agli autovalori date dalla (5.8)

$$E_n^1 = \langle n^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle,$$

è chiaro che, a causa della degenerazione, potremo avere correzioni diverse a seconda degli autoket di E_n^0 considerati. Denotando con p il grado della degenerazione di E_n^0 , le correzioni al I ordine saranno date proprio dagli elementi diagonali della matrice

$$(\mathcal{H}_1)_{k,j} = \langle n_k^0|\mathcal{H}_1|n_j^0\rangle \quad (5.14)$$

dove sono stati denotati con

$$\{|n_1^0\rangle, |n_2^0\rangle, \dots, |n_p^0\rangle\} \quad (5.15)$$

i p autoket ortonormali di E_n^0 individuati come si è detto.

Una deduzione più formale consente di ricavare anche la correzione al I ordine agli autoket.

Il generico autoket $|n^0\rangle$ di E_n^0 è un elemento del suo sottospazio:

$$|n^0\rangle = \sum_{j=1,p} a_j |n_j^0\rangle. \quad (5.16)$$

In generale la correzione al I ordine non apparterrà allo stesso sottospazio:

$$|n^1\rangle = \sum_k \sum_{j=1,p} b_{k,j} |k_j^0\rangle \quad (5.17)$$

dove l'indice k varia sull'intero insieme degli autovalori di \mathcal{H}_0 . Riprendiamo l'equazione agli autovalori per \mathcal{H} al I ordine (5.7):

$$\mathcal{H}_0|n^1\rangle + \mathcal{H}_1|n^0\rangle = E_n^0|n^1\rangle + E_n^1|n^0\rangle.$$

e, dopo aver sostituito l'espressione per $|n^0\rangle$

$$\mathcal{H}_0|n^1\rangle + \mathcal{H}_1 \sum_{j=1,p} a_j |n_j^0\rangle = E_n^0 |n^1\rangle + E_n^1 \sum_{j=1,p} a_j |n_j^0\rangle,$$

moltiplichiamo scalarmente per $\langle n_1^0|, \langle n_2^0|, \dots, \langle n_p^0|$. Tenendo conto del fatto che $\langle n_m^0|\mathcal{H}_0 = E_n^0 \langle n_m^0|$, si ottiene un sistema di p equazioni nelle variabili a_j

$$\sum_{j=1,p} a_j \langle n_m^0|\mathcal{H}_1|n_j^0\rangle = E_n^1 a_m, \quad m=1, \dots, p,$$

che, in termini della (5.14) possiamo riscrivere:

$$\sum_{j=1,p} a_j (\mathcal{H}_1)_{m,j} = E_n^1 a_m, \quad m=1, \dots, p. \quad (5.18)$$

Si tratta di un sistema omogeneo che ha soluzioni diverse da quella banale se e solo se il determinante dei coefficienti si annulla:

$$\det [(\mathcal{H}_1)_{m,j} - E_n^1 \delta_{m,j}] = 0;$$

cioè, soltanto se E_n^1 è autovalore della matrice $(\mathcal{H}_1)_{m,j}$. In questo modo si determinano p autovalori $E_{n,k}^1$, $k = 1, \dots, p$ che costituiscono le correzioni al I ordine a E_n^0 . In corrispondenza di ciascuno di tali autovalori, si può risolvere il sistema (5.18) e determinare, a meno di una costante di normalizzazione, i coefficienti $a_{j,k}$ che consentono di individuare la base "corretta" nel sottospazio di E_n^0 , dalla quale partire per uno sviluppo perturbativo privo di divergenze. Dal punto di vista algebrico il vettore

$$\begin{pmatrix} a_{1,k} \\ a_{2,k} \\ \vdots \\ a_{p,k} \end{pmatrix}$$

è autovettore di $(\mathcal{H}_1)_{m,j}$ corrispondente all'autovalore $E_{n,k}^1$.

Notiamo che può accadere che la matrice $(\mathcal{H}_1)_{m,j}$ sia già diagonale, cioè che siamo partiti dalla base "corretta". In questo caso le correzioni al I ordine sono proprio gli elementi della diagonale. Questo accade quando \mathcal{H}_1 commuta con l'operatore che a sua volta commuta con \mathcal{H}_0 e i cui autovalori sono utilizzati per etichettare la base nel sottospazio dell'autovalore degenere. Consideriamo, ad esempio, l'atomo d'idrogeno il cui Hamiltoniano ha autovalori degeneri corrispondenti a diversi autovalori di L^2 ed L_z . Limitandoci a quest'ultima osservabile, esiste una base di autoket comune a \mathcal{H}_0 e L_z :

$$\mathcal{H}_0|n_j^0\rangle = E_n^0|n_j^0\rangle \quad e \quad L_z|n_j^0\rangle = \hbar m_j|n_j^0\rangle.$$

Supponiamo che l'atomo d'idrogeno venga immerso in un campo caratterizzato da un energia potenziale aggiuntiva \mathcal{H}_1 tale che

$$[\mathcal{H}_1, L_z] = 0. \quad (5.19)$$

Risulta

$$0 = \langle n_j^0|[\mathcal{H}_1, L_z]|n_k^0\rangle = \hbar(m_k - m_j)(\mathcal{H}_1)_{j,k} \quad (5.20)$$

e, quindi, deve accadere che

$$m_k = m_j \quad e \quad (\mathcal{H}_1)_{j,k} \neq 0 \quad (5.21)$$

oppure

$$m_k \neq m_j \quad e \quad (\mathcal{H}_1)_{j,k} = 0. \quad (5.22)$$

Nei casi più semplici, nei quali $m_k = m_j$ equivale $k = j$, cioè nel sottospazio di E_n^0 non vi sono stati distinti con lo stesso valore di m , la matrice $(\mathcal{H}_1)_{j,k}$ è diagonale: possiamo effettuare lo sviluppo perturbativo come nel caso non degenere, in quanto tutti i termini divergenti si azzerano. Questo avviene sicuramente quando

\mathcal{H}_1 commuta con tutti gli operatori dei quali si utilizzano gli autovalori per etichettare la degenerazione; per l'atomo d'idrogeno, ad esempio, siamo nel caso di una degenerazione che commuta sia con L^2 che con L_z .

Può accadere, tuttavia, che due stati diversi abbiano lo stesso valore di m , cioè $m_k = m_j$ con $k \neq j$. Nel caso dell'atomo d'idrogeno questo accade quando due stati degeneri con lo stesso valore di m corrispondono a differenti autovalori di L^2 . In questo caso la matrice $(\mathcal{H}_1)_{j,k}$ non è diagonale. Vedremo che questo accade nel caso di un atomo d'idrogeno in presenza di un campo elettrico (Effetto Stark).

5.3 Effetto Stark

Sperimentalmente si nota che, quando un atomo d'idrogeno viene posto in un campo elettrico sufficientemente intenso, le righe dello spettro elettromagnetico di emissione o di assorbimento si dividono in componenti vicine. Questo fenomeno prende il nome di Effetto Stark e viene attribuito alla rottura della degenerazione dovuta all'interazione tra campo elettrico e momento di dipolo elettrico dell'atomo.

Consideriamo un atomo d'idrogeno in presenza di un campo elettrico costante ed omogeneo $\vec{\mathcal{E}}$, risultante da un potenziale $\phi(\vec{r})$ ($\vec{\mathcal{E}} = -\nabla\phi$) dato da:

$$\phi(\vec{r}) = - \int \vec{\mathcal{E}} \cdot d\vec{r} = -\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r}.$$

Denotate con $-e$ la carica dell'elettrone, \vec{r}_1 la sua coordinata, \vec{r}_2 quella del protone e $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ quella relativa, abbiamo

$$\mathcal{H}_1 = -e\phi(\vec{r}_1) + e\phi(\vec{r}_2) = e\vec{\mathcal{E}} \cdot \vec{r} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

dove $\vec{\mu}_e = -e\vec{r}$ è il momento di dipolo elettrico del sistema.

Se utilizziamo un sistema di riferimento nel quale l'asse z ha la direzione di \mathcal{E} , abbiamo

$$\mathcal{H}_1 = e\mathcal{E} r \cos\theta$$

e verifichiamo immediatamente che, dato che L_z dipende solo da ϕ ,

$$[\mathcal{H}_1, L_z] = 0, \quad (5.23)$$

mentre

$$[\mathcal{H}_1, L^2] \neq 0. \quad (5.24)$$

L'energia potenziale non è più centrale e non si può adottare il metodo di calcolo basato sulla separazione delle variabili. L'equazione di Schrödinger non è più risolvibile esattamente.

Per questo motivo cercheremo una soluzione approssimata con la teoria perturbativa per determinare le correzioni ai primi livelli di energia indotte dal campo elettrico esterno, supponendo che quest'ultimo, paragonato al campo elettrico già presente nell'atomo, sia piccolo in modo da consentire l'utilizzo dell'approccio perturbativo, pur essendo abbastanza intenso da poter avere degli effetti sperimentali.

Ricordiamo, prima di iniziare i calcoli, che spettro e autofunzioni dell'Hamiltoniano dell'atomo d'idrogeno in assenza di campi esterni sono dati da

$$E_n = -\frac{1}{2} m c^2 \frac{\alpha^2}{n^2} \quad \psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}(\theta, \phi) \quad (5.25)$$

dove

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \quad e \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2}$$

sono la costante di struttura fine e il raggio di Bohr. In termini dei polinomi di Laguerre e dei polinomi di Legendre, le autofunzioni sono date da

$$\psi_{n,\ell,m}(\vec{r}) = N_{n,\ell,m} r^\ell e^{-\frac{r}{n a_0}} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1} \left(\frac{2r}{n a_0} \right) P_\ell^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad (5.26)$$

dove $N_{n,\ell,m}$ è una costante di normalizzazione.

5.3.1 Stato fondamentale

La correzione al I ordine è data da

$$E_1^1 = e \langle 1, 0, 0 | \vec{r} | 1, 0, 0 \rangle \cdot \vec{\mathcal{E}}$$

che esprime la correzione in termini del prodotto scalare del campo elettrico per i valori medi della coordinata relativa del sistema elettrone-protone nello stato non perturbato. In termini delle autofunzioni abbiamo

$$E_1^1 = e \vec{\mathcal{E}} \cdot \int d\vec{r} |\psi_{1,0,0}(\vec{r})|^2 \vec{r}.$$

Questa quantità è nulla, anzi possiamo dire in generale che

$$\langle n, \ell, m | \vec{r} | n, \ell, m \rangle = \int d\vec{r} |\psi_{n,\ell,m}(\vec{r})|^2 \vec{r} = 0. \quad (5.27)$$

Infatti le $\psi_{n,\ell,m}$, che sono date dal prodotto di una funzione di r per una Armonica sferica, hanno la parità di quest'ultima, cioè $(-1)^\ell$. Il loro modulo quadro è sempre pari e l'integrale è nullo essendo l'integrale su tutto lo spazio di una funzione di parità negativa. Ovviamente questo è vero solo per la correzione al I ordine, in quanto il risultato esatto coincide con il valore medio della perturbazione negli stati corretti, stati che, rispetto a quelli imperturbati, sono stati modificati dalla presenza del campo elettrico e hanno perso le proprietà di simmetria.

Questo fatto emerge dal calcolo della correzione al II ordine:

$$E_1^2 = e^2 \mathcal{E}^2 \sum_{(n,\ell,m) \neq (1,0,0)} \frac{|\langle n, \ell, m | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle|^2}{E_1^0 - E_n^0}.$$

Il calcolo dell'elemento di matrice di $r \cos \theta$ tra gli stati dell'atomo d'idrogeno è importante anche per il seguito; per questo lo eseguiamo in tutta generalità nella rappresentazione delle coordinate. Utilizzando l'espressione per le autofunzioni (5.26) otteniamo:

$$\langle n, \ell, m | r \cos \theta | n', \ell', m' \rangle = \int d\vec{r} R_{n,\ell}(r) Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) r \cos \theta R_{n',\ell'}(r) Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) \quad (5.28)$$

$$= \int_0^\infty dr r^2 R_{n,\ell}(r) r R_{n',\ell'}(r) \times \int d\Omega Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) \quad (5.29)$$

L'integrazione sugli angoli può essere eseguita facilmente tenendo conto della relazione

$$\cos \theta Y_{\ell,m} = a_{\ell,m} Y_{\ell+1,m} + a_{\ell-1,m} Y_{\ell-1,m} \quad \text{dove} \quad a_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell+m+1)(\ell-m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}}$$

ottenendo

$$\int d\Omega Y_{\ell,m}^*(\theta, \phi) \cos \theta Y_{\ell',m'}(\theta, \phi) = (a_{\ell-1,m} \delta_{\ell',\ell-1} + a_{\ell,m} \delta_{\ell',\ell+1}) \delta_{m',m}$$

Ne deriva che questi elementi di matrice sono nulli, a meno che

$$\Delta m = m' - m = 0 \quad \text{e} \quad \Delta \ell = \ell' - \ell = \pm 1. \quad (5.30)$$

Queste relazioni prendono il nome di regole di selezione; vedremo in seguito (Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo) che le transizioni di dipolo elettrico sono possibili solo tra livelli di energia per i quali esse sono soddisfatte; notiamo, più precisamente, che quello che conta sono gli stati di momento angolare.

Come abbiamo già notato

$$[\mathcal{H}_1, L_z] = 0,$$

cioè la perturbazione commuta con l'operatore che etichetta la degenerazione, per cui, tenendo conto delle (5.21, 5.22), avremmo potuto dire subito che gli unici elementi di matrice diversi da zero sono quelli in cui $m = m'$.

Tornando al caso in esame, lo stato fondamentale, abbiamo $\ell' = 0$ e $m' = 0$, e l'integrale sugli angoli si riduce a $\frac{1}{\sqrt{3}} \delta_{\ell,1} \delta_{m,0}$.

In definitiva abbiamo ottenuto

$$\langle n, \ell, m | r \cos \theta | 1, 0, 0 \rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} \int_0^\infty dr r^3 R_{n,1}(r) R_{1,0}(r).$$

Senza insistere sui calcoli, diamo semplicemente il risultato finale per la correzione al II ordine dello stato fondamentale:

$$E_1^2 = -\frac{9}{4} a_0 \mathcal{E}^2 \quad (5.31)$$

che è negativa, come ci aspettiamo. La correzione del II ordine dipende dal quadrato del campo elettrico; se si pensa che essa dipende dal prodotto scalare del momento di dipolo per il campo, questo vuol dire che il momento di dipolo è diventato a sua volta proporzionale al campo. Infatti il campo elettrico aumenta il momento di dipolo poiché contribuisce ad allontanare le cariche. Dal punto di vista quantistico questo è l'effetto delle modifiche indotte nelle funzioni d'onda e quindi nelle distribuzioni di probabilità.

5.3.2 Primo stato eccitato

Come abbiamo visto, il principale effetto del campo elettrico sullo stato fondamentale è di modificarne il livello di energia al II ordine. Questo non può in ogni caso spiegare la separazione delle linee spettrali, che sarebbero al più spostate. La moltiplicazione delle linee spettrali può essere attribuita, invece, al fatto che la degenerazione dei livelli per $n > 1$ non sopravvive alla presenza del campo elettrico esterno.

Consideriamo il livello $n = 2$. In assenza del campo elettrico abbiamo quattro autofunzioni che corrispondono allo stesso autovalore $E_2 = \frac{E_1}{4}$, alle quali associamo 4 ket come segue:

$$|1\rangle \rightarrow \psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}} \quad (5.32)$$

$$|2\rangle \rightarrow \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \quad (5.33)$$

$$|3\rangle \rightarrow \psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{i\phi} \quad (5.34)$$

$$|4\rangle \rightarrow \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) = \frac{1}{8\sqrt{\pi}} a_0^{-\frac{3}{2}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \sin \theta e^{-i\phi} \quad (5.35)$$

Come si è visto le correzioni al I ordine sono date dagli autovalori della matrice di \mathcal{H}_1 nel sottospazio relativo al E_1 . Possiamo utilizzare la numerazione degli stati per indicare gli elementi di questa matrice:

$$(\mathcal{H}_1)_{k,j} = \langle k | \mathcal{H}_1 | j \rangle \quad \text{con } k, j = 1, 2, 3, 4$$

Come abbiamo visto gli elementi di matrice diagonali sono nulli per motivi di parità. Inoltre, poiché vale la (5.19), tutti gli elementi di matrice relativi a autoket con differenti autovalori di L_z sono nulli. Pertanto la matrice diventa

$$(\mathcal{H}_1)_{m,j} = \begin{pmatrix} 0 & \langle 1 | \mathcal{H}_1 | 2 \rangle & 0 & 0 \\ \langle 2 | \mathcal{H}_1 | 1 \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

dove abbiamo indicato gli unici elementi diversi da zero. Due degli autovalori sono nulli e le altre due correzioni si ottengono dagli autovalori del primo blocco 2×2 della matrice

$$\begin{pmatrix} 0 & \langle 1 | \mathcal{H}_1 | 2 \rangle \\ \langle 2 | \mathcal{H}_1 | 1 \rangle & 0 \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

Poichè la matrice è hermitiana, gli elementi di matrice non nulli sono complessi coniugati, anzi uguali, essendo reali, Calcoliamoli:

$$\begin{aligned}
 \langle 1 | \mathcal{H}_1 | 2 \rangle &= e\mathcal{E} \int r^2 dr d\cos\theta d\phi \psi_{2,0,0}(r, \theta, \phi) r \cos\theta \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) \\
 &= \frac{e\mathcal{E}}{16 \cdot 2\pi} a_0^{-3} \int_0^{2\pi} d\phi \int_{-1}^1 d\cos\theta \cos^2\theta \int_0^\infty dr r^3 \frac{r}{a_0} \left(2 - \frac{r}{a_0}\right) e^{-\frac{r}{a_0}} \\
 &= \frac{e\mathcal{E}}{24} a_0 \int_0^\infty dx x^4 (2-x) e^{-x} \\
 &= -3 e \mathcal{E} a_0.
 \end{aligned}$$

Per l'ultimo passaggio abbiamo utilizzato l'integrale

$$\int_0^\infty dx x^n e^{-x} = (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^\infty dx e^{-\alpha x} \Big|_{\alpha=1} = (-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \frac{1}{\alpha} \Big|_{\alpha=1} = (-1)^n \frac{(-1)^n n!}{\alpha^{n+1}} \Big|_{\alpha=1} = n!$$

Tornando alla matrice (5.36), essa è data da

$$\begin{pmatrix} 0 & -3 e \mathcal{E} a_0 \\ -3 e \mathcal{E} a_0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Si trova facilmente che i suoi autovalori sono dati da

$$\begin{aligned}
 3 e \mathcal{E} a_0 &\text{ corrispondente all'autovettore } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \\
 -3 e \mathcal{E} a_0 &\text{ corrispondente all'autovettore } \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

Riassumendo i risultati, il livello E_2 , 4-volte degenero con autoket $|2, 0, 0\rangle$, $|2, 1, 0\rangle$, $|2, 1, 1\rangle$, $|2, 1, -1\rangle$, al I ordine perturbativo dà luogo a 3 livelli:

$$\begin{aligned}
 E_2 + 3 e \mathcal{E} a_0 &\text{ non degenero corrispondente all'autoket } \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 0, 0\rangle - |2, 1, 0\rangle) \\
 E_2 &\text{ 2volte degenero corrispondente agli autoket } |2, 1, 1\rangle, |2, 1, -1\rangle \\
 E_2 - 3 e \mathcal{E} a_0 &\text{ non degenero corrispondente all'autoket } \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, 0, 0\rangle + |2, 1, 0\rangle)
 \end{aligned}$$

Notiamo che l'effetto Stark lineare, che abbiamo appena descritto, è presente solo nell'atomo d'idrogeno. Infatti negli atomi con molti elettroni non c'è più la degenerazione in ℓ e, a causa della (5.27), le correzioni al I ordine sono tutte nulle. Permane invece l'effetto Stark quadratico che abbiamo visto nel caso dello stato fondamentale al II ordine.

5.4 La struttura fine

Il calcolo degli autovalori e delle autofunzioni dell'Hamiltoniano dell'atomo d'idrogeno costituisce, anche se non si considerano campi esterni, solo una approssimazione di ordine zero in quanto, oltre all'interazione coulombiana, che abbiamo considerato, esistono correzioni dovute a termini aggiuntivi di energia potenziale. Qui tratteremo due termini:

- Effetti relativistici
- Interazione spin-orbita.

Le correzioni dovute ad entrambi questi termini aggiuntivi dell'hamiltoniano sono dette di "struttura fine" e producono variazioni di ordine α^4 rispetto agli autovalori (5.26). In quest'ultima espressione la velocità della luce è introdotta in maniera artificiale, nel senso che esplicitando il valore di $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$, scompare la dipendenza da c , come ci si aspetta dato che i conti sono non relativistici. I nuovi termini, che ora andiamo a calcolare mediante l'approccio perturbativo, hanno un'origine relativistica che emerge proprio nella nuova dipendenza da α^4 .

5.4.1 Correzioni all'energia cinetica

Ricordiamo che l'espressione correntemente usata per l'energia cinetica $T = \frac{p^2}{2m}$ può essere considerata come un'approssimazione per velocità piccole rispetto a c dell'espressione relativistica:

$$T = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$$

Sviluppando in serie questa espressione

$$T = mc^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2 c^2}} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3 c^2}$$

dove abbiamo trascurato i termini di ordine superiore a $(\frac{p}{c})^4$. Il primo termine di energia a riposo contribuisce solo a ridefinire la costante arbitraria relativa all'energia. Più interessante calcolare gli effetti di

$$\mathcal{H}_1 = -\frac{p^4}{8m^3 c^2}. \quad (5.37)$$

Notiamo che, poiché

$$p^4 = 4m^2 \left(\mathcal{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2$$

commuta con L^2 e L_z , la teoria perturbativa si riduce a quella non degenera, nel senso che le matrici di \mathcal{H}_1 sono diagonali. Le correzioni al prim'ordine dell'energia sono date, quindi, da

$$\begin{aligned} E_T^1 &= -\frac{1}{8m^3 c^2} \langle n, \ell, m | p^4 | n, \ell, m \rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \langle n, \ell, m | \left(\mathcal{H}_0 + \frac{e^2}{r} \right)^2 | n, \ell, m \rangle \\ &= -\frac{1}{2mc^2} \left((E_n^0)^2 + 2E_n^0 \langle n, \ell, m | \frac{e^2}{r} | n, \ell, m \rangle + \langle n, \ell, m | \frac{e^4}{r^2} | n, \ell, m \rangle \right) \end{aligned}$$

Utilizzando i risultati, che dimostriamo in seguito,

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle_{n, \ell, m} &= -2E_n^0 \\ \left\langle \frac{e^4}{r^2} \right\rangle_{n, \ell, m} &= 4(E_n^0)^2 \frac{n}{\ell + \frac{1}{2}}, \end{aligned}$$

si ottiene il risultato finale

$$E_T^1 = -\frac{1}{2} m c^2 \alpha^4 \left[-\frac{3}{4n^4} + \frac{1}{n^3(\ell + \frac{1}{2})} \right] \quad (5.38)$$

5.4.2 Interazione spin-orbita

L'altra correzione di ordine α^4 è dovuta all'interazione magnetica tra lo spin dell'elettrone e il momento magnetico generato dal suo moto orbitale intorno al nucleo. In un riferimento solidale con il Centro di Massa del sistema elettrone-nucleo l'elettrone non è fermo, ma si muove con una velocità che chiamiamo \vec{v} . Nel sistema di riferimento a riposo dell'elettrone il nucleo si muove con velocità $-\vec{v}$, generando un campo magnetico

$$\vec{B} = -\frac{e}{c} \frac{\vec{v} \times \vec{r}}{r^3} = \frac{e}{mc} \frac{\vec{r} \times \vec{p}}{r^3} = \frac{e}{mc} \frac{\vec{L}}{r^3},$$

il quale interagisce con il momento magnetico dell'elettrone $\vec{\mu}_e = -\frac{e}{mc} \vec{S}$ con energia potenziale

$$\mathcal{H}_{SO} = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{B} = \frac{e^2}{2m^2 c^2 r^3} \vec{S} \cdot \vec{L},$$

da cui il nome di interazione spin-orbita. In realtà il risultato non avrebbe il 2 a denominatore. Questo fattore tiene conto della necessaria ulteriore trasformazione dal sistema di riferimento solidale con l'elettrone (non inerziale) al sistema Centro di Massa. Esso è noto come fattore di Thomas, dal nome di chi lo ha scoperto, ed emerge naturalmente dall'equazione di Dirac che ingloba la cinematica relativistica, al contrario dell'equazione di Schrödinger.

Notiamo, ora, che

$$\vec{S} \cdot \vec{L} = \frac{1}{2} \left[(\vec{S} + \vec{L})^2 - L^2 - S^2 \right] = \frac{1}{2} [J^2 - L^2 - S^2].$$

\mathcal{H}_{SO} commuta, quindi, con gli operatori compatibili J^2 , L^2 , S^2 e conviene usare, per il calcolo dei valori medi che danno la correzione al I ordine, gli autoket comuni al momento angolare totale e all'Hamiltoniano $|n, j, m_j; \ell; s\rangle$, in modo che le matrici della perturbazione in questa base siano già diagonali:

$$\langle n', j', m'_j; \ell'; s' | \mathcal{H}_{SO} | n, j, m_j; \ell; s \rangle = \delta_{n,n'} \delta_{j,j'} \delta_{m,m'} \delta_{\ell,\ell'} \frac{e^2}{4m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} \hbar^2 \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right]$$

Poiché il momento angolare totale è somma del momento orbitale dell'elettrone e del suo spin abbiamo $j = \ell \pm \frac{1}{2}$, per cui

$$E_{SO}^1 = \frac{\hbar^2 e^2}{4m^2c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} \times \begin{cases} \ell & \text{se } j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell + 1) & \text{se } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases}$$

Poichè, come vedremo, si trova che

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} = \left(\frac{m c \alpha}{\hbar} \right)^3 \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)},$$

abbiamo il risultato finale

$$E_{SO}^1 = \frac{1}{4} m c^2 \alpha^4 \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell + 1)} \times \begin{cases} \ell & \text{se } j = \ell + \frac{1}{2} \\ -(\ell + 1) & \text{se } j = \ell - \frac{1}{2} \end{cases} \quad (5.39)$$

Si noti che, sebbene per $\ell = 0$ accada che $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,\ell}$ diverge, mentre $\vec{S} \cdot \vec{L}$ si annulla, la (5.39) dà in questo limite il corretto spostamento dei livelli anche in questo limite, anche se questo può essere dimostrato solo tramite l'equazione di Dirac. Questo risultato dà una buona approssimazione per la struttura fine anche per atomi a più elettroni, purché si effettui la sostituzione:

$$\left\langle \frac{e^2}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} \rightarrow \left\langle \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right\rangle_{n,\ell}.$$

dove V è l'energia potenziale media sentita dall'elettrone nello stato considerato.

5.4.3 Calcolo dei valori di attesa di $\frac{1}{r^n}$ per $n = 1, 2, 3$ negli stati stazionari dell'atomo d'idrogeno.

Un metodo molto semplice di calcolo per questi valori di attesa consiste nell'utilizzare il **teorema di Feynman-Hellmann**¹ (vedi p.e. [1] cap. 4.5) che afferma che, in uno stato stazionario corrispondente all'autovalore E , vale la relazione

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda},$$

dove λ è un parametro dal quale l'hamiltoniano, e, quindi, anche gli autovalori e gli autoket, dipendono.

¹precedentemente presentato da Pauli in *Handbuch Article on Quantum Theory* (1930)

Dimostrazione

Essendo E autovalore relativo a $|E\rangle$, deve risultare

$$E(\lambda) = \langle E | \mathcal{H}(\lambda) | E \rangle.$$

Ne segue che

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \langle E | \mathcal{H}(\lambda) | E \rangle = \\ &= \frac{\partial \langle E |}{\partial \lambda} \mathcal{H}(\lambda) | E \rangle + \langle E | \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} | E \rangle + \langle E | \mathcal{H}(\lambda) \frac{\partial | E \rangle}{\partial \lambda} = \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle + E \left(\frac{\partial \langle E |}{\partial \lambda} | E \rangle + \langle E | \frac{\partial | E \rangle}{\partial \lambda} \right) = \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle + E \left(\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle E | E \rangle \right) = \\ &= \left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\lambda)}{\partial \lambda} \right\rangle \end{aligned}$$

CVD

Applichiamo ora il teorema di F-H per calcolare i valori di attesa indicati:

a) **Calcolo di** $\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n,\ell}$

Utilizziamo come parametro la costante di struttura fine α , che nell'hamiltoniano dell'atomo d'idrogeno è presente solo nel termine di energia potenziale coulombiana:

$$V_{coul}(r) = -\frac{e^2}{r} = -\frac{\hbar c \alpha}{r}$$

Applicando il teorema si ha:

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\alpha)}{\partial \alpha} \right\rangle_{n,\ell} = \left\langle -\frac{\hbar c}{r} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{\partial E_n(\alpha)}{\partial \alpha} = -\frac{mc^2 \alpha}{n^2}$$

dalla quale si ottiene

$$\left\langle \frac{1}{r} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{mc\alpha}{\hbar n^2} = -2 \frac{E_n}{\hbar c \alpha} = -\frac{2E_n}{e^2}$$

e infine si ha il risultato utilizzato nel calcolo delle correzioni di struttura fine:

$$\left\langle \frac{e^2}{r} \right\rangle_{n,\ell} = -2E_n$$

b) **Calcolo di** $\left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle_{n,\ell}$

Questa volta utilizziamo come parametro il numero quantico ℓ , che nell'hamiltoniano dell'atomo d'idrogeno è presente solo nel termine di potenziale centrifugo:

$$V_\ell(r) = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2}.$$

Dal teorema di F-H otteniamo

$$\left\langle \frac{\partial \mathcal{H}(\ell)}{\partial \ell} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{\hbar^2}{2m} \left\langle \frac{2\ell+1}{r^2} \right\rangle_{n,\ell} = \frac{\partial E_n(\ell)}{\partial \ell} = \frac{\partial}{\partial \ell} \left(-\frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \frac{1}{(n_r + \ell + 1)^2} \right) = \frac{1}{2} mc^2 \alpha^2 \frac{2}{n^3},$$

dalla quale si ricava il risultato

$$\left\langle \frac{e^4}{r^2} \right\rangle_{n,\ell} = 8(E_n)^2 \frac{n}{2\ell+1}$$

c) **Calcolo di** $\langle \frac{1}{r^3} \rangle_{n,\ell}$

Questo calcolo deriva dal risultato precedente grazie al fatto che in uno stato stazionario la forza media deve essere nulla. Per rendersene conto, basta scrivere il valore d'attesa dell'impulso in questo stato; si comprende immediatamente che esso non viene modificato dall'evoluzione temporale e, pertanto, la sua derivata rispetto al tempo, che è appunto la forza media, deve annullarsi. Nel nostro caso la forza data da:

$$F(r) = -\frac{dV(r)}{dr} = -\frac{d}{dr} \left(-\frac{e^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2mr^2} \right) = -\frac{e^2}{r^2} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{mr^3}.$$

Imponendo che $\langle F(r) \rangle_{n,\ell} = 0$ e utilizzando il valor medio di $\frac{1}{r^2}$ appena calcolato si ottiene

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle_{n,\ell} = \left\langle \frac{e^2}{r^2} \right\rangle_{n,\ell} \frac{m}{\hbar^2 \ell(\ell+1)} = \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{n^3 \ell(\ell + \frac{1}{2})(\ell+1)},$$

che è il risultato utilizzato per l'interazione spin-orbita.

5.5 Perturbazione istantanea

Supponiamo che l'Hamiltoniano di un sistema cambi in un breve intervallo di tempo ϵ , così breve che la variazione possa essere considerata istantanea.

$$\mathcal{H}_0 \rightarrow \mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1$$

dove \mathcal{H}_0 e \mathcal{H}_1 non dipendono dal tempo.

Cosa succede al vettore di stato?

Se la perturbazione ha avuto luogo nell'intervallo $[-\frac{\epsilon}{2}, +\frac{\epsilon}{2}]$, possiamo integrare sul tempo l'equazione di Schrödinger

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= \mathcal{H} |\psi(t)\rangle, \\ |\psi(+\frac{\epsilon}{2})\rangle - |\psi(-\frac{\epsilon}{2})\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\frac{\epsilon}{2}}^{+\frac{\epsilon}{2}} \mathcal{H} |\psi(t)\rangle dt. \end{aligned}$$

Nel limite $\epsilon \rightarrow 0$, otteniamo

$$|\psi(0^+)\rangle = |\psi(0^-)\rangle.$$

Una perturbazione istantanea, pertanto, non modifica il vettore di stato.

Tuttavia il cambiamento dell'Hamiltoniano fa sì che, negli istanti successivi, l'evoluzione dello stato sia modificata. Supponiamo che inizialmente il sistema sia nello stato $|n^0\rangle$, autoket di \mathcal{H}_0 ; solo nell'istante della perturbazione lo stato sarà ancora $|n^0\rangle$, ma subito dopo cambierà, poichè sarà \mathcal{H} e non \mathcal{H}_0 a controllare l'evoluzione dello stato.

Supponiamo di fare, **immediatamente dopo la perturbazione**, una misura di energia, cioè di \mathcal{H} . Avremo come risultato un suo autovalore E_k e, poichè

$$|n^0\rangle = \sum_k |k\rangle \langle k|n^0\rangle,$$

la probabilità della misura E_k , e quindi la probabilità di transizione $|n^0\rangle \rightarrow |k\rangle$, è data da

$$P_{n \rightarrow k} = |\langle k|n^0\rangle|^2.$$

Questo risultato non dipende da quanto \mathcal{H}_1 sia grande rispetto a \mathcal{H}_0 . Tuttavia se \mathcal{H}_1 è "piccolo", possiamo applicare allo stato $|k\rangle$ del sistema dopo la misura la teoria perturbativa indipendente dal tempo al I ordine:

$$\langle k| = \langle k^0| + \sum_{m \neq k} \frac{\langle k^0|\mathcal{H}_1|m^0\rangle}{E_k^0 - E_m^0} \langle m^0|.$$

Per calcolare la probabilità di transizione, moltiplichiamo scalarmente per $|n^0\rangle$:

$$\langle k|n^0\rangle = \langle k^0|n^0\rangle + \sum_{m \neq k} \frac{\langle k^0|\mathcal{H}_1|m^0\rangle}{E_k^0 - E_m^0} \langle m^0|n^0\rangle = \delta_{k,n} + \frac{\langle k^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle}{E_k^0 - E_n^0} (1 - \delta_{k,n})$$

La probabilità di transizione a stati $k \neq n$ è, dunque:

$$P_{n \rightarrow k} = \left| \frac{\langle k^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle}{E_k^0 - E_n^0} \right|^2.$$

Notiamo che la probabilità di trovare l'energia E_n è 1, quindi le probabilità non sono a somma unitaria. Sul piano matematico, questo si spiega per il fatto che in termini in \mathcal{H}_1 sono considerati infinitesimi del I ordine, mentre $\delta_{k,n}$ è un termine di ordine 0. Poichè espressioni simili si utilizzano in Fisica per termini finiti, il problema viene risolto rinormalizzando la probabilità a ciascun ordine di approssimazione.



5.6 Perturbazioni dipendenti dal tempo

Nei casi finora considerati, di Hamiltoniani non dipendenti dal tempo, la conoscenza dell'evoluzione di uno stato stazionario del sistema, che è data dall'equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \mathcal{H} |\psi(t)\rangle,$$

si ottiene tramite la soluzione del problema agli autovalori di \mathcal{H} :

$$\mathcal{H}|n\rangle = E_n|n\rangle.$$

La conoscenza dello stato al tempo $t=0$ del sistema, $|\psi(0)\rangle$, come sovrapposizione degli autoket $|n\rangle$

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \quad \text{dove} \quad c_n = \langle n|\psi(0)\rangle$$

consente di determinare lo stato ad un istante t qualsiasi

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-i \frac{E_n t}{\hbar}} |n\rangle. \quad (5.40)$$

In particolare, se $|\psi(0)\rangle = |n\rangle$, il sistema sarà descritto sempre dallo stesso ket (a parte il fattore di fase).

Se $\mathcal{H} = \mathcal{H}(t)$ questo approccio non è più possibile e la soluzione del problema presenta un elevato grado di complessità. Noi cercheremo una soluzione approssimata di questo problema nell'ambito dell'approccio perturbativo, cioè quando è possibile scrivere

$$\mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t) \quad (5.41)$$

dove \mathcal{H}_0 , l'Hamiltoniano imperturbato, non dipende dal tempo e di esso si conosce la soluzione dell'equazione agli autovalori (5.3), mentre $\mathcal{H}_1(t)$ è un termine (la perturbazione) dipendente dal tempo che può essere considerata *piccola* rispetto ad \mathcal{H}_0 (nel senso, come si è già visto, che gli elementi di matrice $\langle m^0|\mathcal{H}_1|n^0\rangle$ sono piccoli rispetto agli autovalori di \mathcal{H}_0).

5.6.1 Teoria perturbativa al I ordine

La principale questione alla quale siamo interessati non è tanto quella di determinare autovalori ed autoket di \mathcal{H} , quanto la seguente:

Se sappiamo che al tempo $t = 0$ il sistema si trova nello stato $|i_0\rangle$, con quale probabilità esso si troverà nello stato $|f_0\rangle$ (ancora autostato di \mathcal{H}_0) al tempo $t > 0$?

Dato che gli autoket $|n_0\rangle$ costituiscono un sistema ortonormale completo, ad ogni istante t possiamo considerare lo sviluppo in questa base del generico ket di stato:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |n^0\rangle. \quad (5.42)$$

Come abbiamo visto, in assenza di \mathcal{H}_1 , avremmo

$$c_n(t) = c_n(0) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}},$$

dove i coefficienti $c_n(0)$ non dipendono dal tempo. Per la presenza di \mathcal{H}_1 i coefficienti saranno differenti e non più costanti. Considerando istante per istante uno sviluppo in autoket di \mathcal{H}_0 , possiamo scrivere

$$c_n(t) = d_n(t) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}},$$

e i coefficienti $d_n(t)$ saranno ora funzioni del tempo.

Riscriviamo, pertanto, il generico ket di stato (5.43)

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n d_n(t) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} |n^0\rangle \quad (5.43)$$

e imponiamo che esso sia soluzione dell'equazione di Schrödinger. Abbiamo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n d_n(t) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} |n^0\rangle = \sum_n (i\hbar \dot{d}_n + E_n^0 d_n) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} |n^0\rangle \\ \mathcal{H}|\psi(t)\rangle &= (\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1) \sum_n d_n(t) e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} |n^0\rangle = \sum_n E_n^0 d_n e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} |n^0\rangle + \sum_n d_n e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} \mathcal{H}_1 |n^0\rangle. \end{aligned}$$

Uguagliando i due termini abbiamo:

$$\sum_n i\hbar \dot{d}_n e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} |n^0\rangle = \sum_n d_n e^{-i \frac{E_n^0 t}{\hbar}} \mathcal{H}_1 |n^0\rangle,$$

e, moltiplicando ambo i membri per

$$\langle f^0 | e^{i \frac{E_f^0 t}{\hbar}}$$

si ottiene:

$$i\hbar \dot{d}_f = \sum_n d_n \langle f^0 | \mathcal{H}_1 | n^0 \rangle e^{i\omega_{f,n} t}, \quad (5.44)$$

dove abbiamo introdotto la frequenza

$$\omega_{f,n} = \frac{E_f^0 - E_n^0}{\hbar}.$$

Il risultato (5.44) mostra che siamo riusciti a trasformare l'equazione di Schrödinger in un sistema di equazioni differenziale del I ordine nelle funzioni $\{d_f(t)\}$. Questo sistema si presta ad essere risolto in modo perturbativo.

Abbiamo supposto che all'istante $t = 0$ il sistema è nello stato $|i_0\rangle$, quindi, dalla (5.43)

$$d_n(0) = \delta_{n,i}.$$

Consideriamo l'ordine zero per la (5.44); poiché il secondo membro è del I ordine in \mathcal{H}_1 , esso può essere trascurato, cioè

$$\dot{d}_f^0 = 0 \Rightarrow d_f^0 = \text{costante} = \delta_{f,i},$$

come è naturale, dato che all'ordine zero \mathcal{H}_1 non esiste e un autoket di \mathcal{H}_0 non può cambiare.

Al I ordine, nel secondo membro di (5.44) dobbiamo approssimare il fattore $d_n(t)$ con il suo ordine 0, $\delta_{n,i}$:

$$\dot{d}_f = -\frac{i}{\hbar} \langle f^0 | \mathcal{H}_1 | i^0 \rangle e^{i\omega_{f,i}t}$$

che può essere risolta in:

$$d_f(t) - d_f(0) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \langle f^0 | \mathcal{H}_1(\tau) | i^0 \rangle e^{i\omega_{f,i}\tau}$$

e, tenendo conto delle condizioni iniziali,

$$d_f(t) = \delta_{f,i} - \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \langle f^0 | \mathcal{H}_1(\tau) | i^0 \rangle e^{i\omega_{f,i}\tau}. \quad (5.45)$$

Fermiamoci a questo risultato, anche se, in modo iterativo, si potrebbe proseguire il calcolo agli ordini successivi.

Notiamo che, per garantire coerenza alla sviluppo perturbativo, occorre che

$$|d_f(t)| \ll 1 \quad \forall f \neq i,$$

visto che all'ordine zero abbiamo approssimato i $d_n(t)$ con l'unico termine $d_i = 1$.

Infine, la probabilità di trovare all'istante t il sistema in un qualsiasi stato $|f\rangle \neq |i\rangle$ è data da

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}(t) &= |c_f(t)|^2 = |d_f(t) e^{-i\frac{E_f^0 t}{\hbar}}|^2 = |d_f(t)|^2 \\ P_{i \rightarrow f}(t) &= \frac{1}{\hbar^2} \left| \int_0^t d\tau \langle f^0 | \mathcal{H}_1(\tau) | i^0 \rangle e^{i\omega_{f,i}\tau} \right|^2 \end{aligned} \quad (5.46)$$

che rappresenta la probabilità di transizione al I ordine dallo stato iniziale $|i^0\rangle$ allo stato $|f^0\rangle$.

5.6.2 Perturbazione periodica

Consideriamo il caso di un sistema sottoposto a partire dall'istante $t = 0$ a perturbazione periodica del tipo

$$\mathcal{H}_1(t) = \mathcal{H}_1 e^{-i\omega t} \quad (5.47)$$

dove \mathcal{H}_1 non dipende dal tempo.

L'ampiezza di transizione dallo stato $|i^0\rangle$ allo stato $|f^0\rangle$ con $f \neq i$, è data, al I ordine, da

$$d_f(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \langle f^0 | \mathcal{H}_1 | i^0 \rangle e^{i(\omega_{f,i}-\omega)\tau} = -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_1)_{f,i} \frac{e^{i(\omega_{f,i}-\omega)t} - 1}{i(\omega_{f,i}-\omega)} = \quad (5.48)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_1)_{f,i} e^{i(\omega_{f,i}-\omega)t/2} \frac{e^{i(\omega_{f,i}-\omega)t/2} - e^{-i(\omega_{f,i}-\omega)t/2}}{2i(\omega_{f,i}-\omega)t/2} t = \quad (5.49)$$

$$= -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_1)_{f,i} e^{i(\omega_{f,i}-\omega)t/2} \frac{\sin(\omega_{f,i}-\omega)t/2}{(\omega_{f,i}-\omega)t/2} t \quad (5.50)$$

dove abbiamo posto $(\mathcal{H}_1)_{f,i} = \langle f^0 | \mathcal{H}_1 | i^0 \rangle$.

La probabilità di transizione è data dal modulo quadro dell'ampiezza:

$$P_{i \rightarrow f}(t) = |d_f(t)|^2 = \frac{1}{\hbar^2} |(\mathcal{H}_1)_{f,i}|^2 \left[\frac{\sin(\omega_{f,i}-\omega)t/2}{(\omega_{f,i}-\omega)t/2} \right]^2 t^2$$

La funzione $\frac{\sin^2 x}{x^2}$ è piccata nell'origine e assume valori importanti nell'intervallo $[-\pi, \pi]$. Il sistema quindi avrà con maggiore probabilità transizioni verso stati per i quali

$$\begin{aligned} |(\omega_{f,i} - \omega)t/2| &\lesssim \pi \\ -2\pi &\lesssim \frac{E_f^0 - E_i^0}{\hbar} t - \omega t \lesssim 2\pi \\ E_f^0 - E_i^0 &\in \left[\hbar\omega - \frac{2\pi\hbar}{t}, \hbar\omega + \frac{2\pi\hbar}{t} \right] \end{aligned}$$

Quindi, se t è piccolo si possono avere transizioni con probabilità uniforme per qualsiasi valore di $E_f^0 - E_i^0$. Quando $t \gg \frac{2\pi}{\omega}$ vengono preferite le transizioni con $E_f^0 - E_i^0 \simeq \hbar\omega$. L'interpretazione che si può dare è che la natura periodica della perturbazione e la sua frequenza non possano essere acquisite dal sistema se non trascorre un tempo pari ad alcuni periodi $\frac{2\pi}{\omega}$. Solo dopo il sistema è in grado di acquisire l'informazione e comportarsi di conseguenza passando ad uno stato di energia $E_f^0 = E_i^0 + \hbar\omega$, cioè assorbendo un quanto di energia corrispondente alla frequenza ω .

A questo punto è opportuno notare che l'espressione (5.47) usata per la perturbazione non ha senso sul piano fisico in quanto corrisponde ad un'energia potenziale complessa. Tuttavia essa può essere pensata come una parte di un termine reale tipo

$$\mathcal{H}_1 \cos \omega t = \mathcal{H}_1 \frac{e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}}{2}.$$

Abbiamo visto che il termine proporzionale a $e^{-i\omega t}$ genera *assorbimenti* di un quanto $\hbar\omega$; il termine $e^{i\omega t}$, invece, dà transizioni con emissione dello stesso quanto, come è possibile verificare cambiando nelle formule precedenti ω in $-\omega$. In questo caso si parla di *emissione stimolata*.

Modifichiamo la trattazione precedente al fine di calcolare una probabilità di transizione per unità di tempo. Nel calcolo (5.48) supponiamo che la perturbazione sia attiva per un intervallo di tempo tra $-\frac{T}{2}$ e $\frac{T}{2}$ con $T \rightarrow \infty$:

$$d_f(t) = \lim_{T \rightarrow \infty} -\frac{i}{\hbar} (\mathcal{H}_1)_{f,i} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau e^{i(\omega_{f,i} - \omega)\tau} = -\frac{2\pi i}{\hbar} (\mathcal{H}_1)_{f,i} \delta(\omega_{f,i} - \omega)$$

Per la probabilità di transizione calcoliamo il modulo quadro:

$$P_{i \rightarrow f} = \frac{4\pi^2}{\hbar^2} |(\mathcal{H}_1)_{f,i}|^2 \delta(\omega_{f,i} - \omega) \delta(\omega_{f,i} - \omega)$$

Per evitare il quadrato della funzione delta, riscriviamolo nella forma

$$\delta(\omega_{f,i} - \omega) \delta(\omega_{f,i} - \omega) = \lim_{T \rightarrow \infty} \delta(\omega_{f,i} - \omega) \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} d\tau e^{i(\omega_{f,i} - \omega)\tau}$$

Quando quest'espressione compare in un'integrazione su ω , la δ valuterà la funzione integranda per $\omega = \omega_{f,i}$, possiamo quindi farlo per l'integrale a destra:

$$\delta(\omega_{f,i} - \omega) \delta(\omega_{f,i} - \omega) = \delta(\omega_{f,i} - \omega) \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{T}{2\pi}$$

Se adesso sostituiamo questa espressione nell'espressione per $P_{i \rightarrow f}$ e dividiamo per T prima di procedere al limite, otteniamo la probabilità di transizione per unità di tempo:

$$R_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} |(\mathcal{H}_1)_{f,i}|^2 \delta(E_f^0 - E_i^0 - \hbar\omega), \quad (5.51)$$

dove si è tenuto conto della relazione $\delta(x/\hbar) = \hbar\delta(x)$.

L'espressione (5.51) prende il nome di Regola d'oro di Fermi da colui che l'ha ricavata. Nel caso particolare delle transizioni negli atomi dovute ad un campo di dipolo elettrico $\mathcal{H}_1 = -\vec{\mu}_e \cdot \vec{\mathcal{E}}$, dove \mathcal{E} è una funzione periodica del tempo, è opportuno ricordare che le uniche transizioni possibili sono quelle che soddisfano le regole di selezione precedentemente trovate (5.30).

Capitolo 6

Sistemi di particelle identiche

Il testo base per questo capitolo è il Nardulli ([1]).

6.1 Principio di indistinguibilità delle particelle identiche

Due particelle si dicono identiche se le loro proprietà fisiche sono rigorosamente le stesse. Consideriamo un sistema di particelle identiche; in meccanica classica esse, pur essendo caratterizzate dalla stessa massa, carica, etc., mantengono la loro individualità. In effetti per distinguere due particelle del sistema è sufficiente misurarne simultaneamente, ad un istante qualsiasi, ad esempio $t = 0$, posizione e velocità. Se ad un istante successivo sappiamo che le due particelle occupano le posizioni A e B dello spazio delle fasi di singola particella, risolvendo le equazioni del moto, saremo in grado di dire quale delle due particelle, che erano state identificate al tempo $t = 0$, occupa la posizione A e quale la posizione B. In altri termini, in meccanica classica le particelle identiche sono sempre, in linea di principio almeno, se non in pratica, distinguibili.

In fisica quantistica la situazione è diversa. Infatti, per il principio di indeterminazione, non è possibile determinare con precisione arbitraria all'istante $t = 0$ posizione ed impulso delle particelle e, per conseguenza, non è possibile distinguerle negli istanti di tempo successivi. Ne segue che in meccanica quantistica il principio di indeterminazione implica la indistinguibilità delle particelle identiche. Questa proprietà, che dicesi *Principio di indistinguibilità delle particelle identiche*, ha conseguenze assai rilevanti. Infatti supponiamo di considerare un sistema di N particelle identiche avente funzione d'onda

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N) \quad (6.1)$$

(ξ qui rappresenta, ad esempio, l'insieme delle tre coordinate e di S_z); supponiamo di scambiare due particelle, ad esempio la particella j e la particella k : si ottiene

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) . \quad (6.2)$$

Questa funzione d'onda, tuttavia, non può essere distinta dalla (6.1), perché le due particelle sono indistinguibili. Ne segue che le due funzioni d'onda possono differire al più per una fase

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_k, \dots, \xi_j, \dots, \xi_N) = e^{i\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N) . \quad (6.3)$$

Se ora scambiamo nuovamente le due particelle,

$$\psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N) = e^{2i\alpha} \psi(\xi_1, \dots, \xi_j, \dots, \xi_k, \dots, \xi_N) ,$$

dobbiamo riottenere la funzione d'onda di partenza. Ciò mostra che

$$e^{i\alpha} = \pm 1 ,$$

cioè la funzione d'onda risulta o simmetrica o antisimmetrica per scambio di una coppia di particelle. È chiaro che, essendo le particelle identiche, la funzione d'onda del sistema di particelle, per lo scambio di una coppia

arbitraria di particelle, sarà o sempre simmetrica o sempre antisimmetrica. E' anche chiaro che, assegnato il sistema di particelle, le sue possibili funzioni d'onda sono o tutte simmetriche o tutte antisimmetriche. Se, infatti, così non fosse, sarebbe possibile considerare la combinazione lineare di una funzione simmetrica e di una antisimmetrica, funzione, questa, che non sarebbe nè simmetrica nè antisimmetrica. Quanto detto è il contenuto del *Principio di Simmetria*, il quale afferma che, dato un sistema di particelle identiche, i suoi stati appartengono ad un sottospazio dello spazio di Hilbert possibile per il sistema che ha fissate proprietà di simmetria e che il sistema resta nello stesso sottospazio qualsiasi siano le forze che agiscono sul sistema e le operazioni di misura che sono effettuate.

Esempio Mostrare che, per un sistema di due particelle identiche di spin s , il rapporto R tra il numero di stati simmetrici nelle variabili di spin e il numero di stati antisimmetrici è pari a $\frac{s+1}{s}$.

Soluzione. Fissato il numero quantico di spin s , il numero di stati di spin per una particella è dato da $2s + 1$, pari al numero di valori che la componente z dello spin può assumere. Nel caso di due particelle di spin s , dette s_z e s'_z le componenti z del loro spin, il numero complessivo di stati è pari a $(2s + 1)^2$. Di questi, gli stati che hanno $s_z = s'_z$ sono sicuramente simmetrici; il loro numero è pari $2s + 1$. I restanti stati, con $s_z \neq s'_z$, sono $(2s + 1)^2 - (2s + 1) = 2s(2s + 1)$. Essi possono essere combinati a due a due per costruire un ugual numero di stati simmetrici del tipo $\frac{1}{2}(|s_z\rangle \otimes |s'_z\rangle + |s'_z\rangle \otimes |s_z\rangle)$ e di stati antisimmetrici del tipo $\frac{1}{2}(|s_z\rangle \otimes |s'_z\rangle - |s'_z\rangle \otimes |s_z\rangle)$. Pertanto, il rapporto richiesto è pari a

$$R = \frac{2s + 1 + s(2s + 1)}{s(2s + 1)} = \frac{(s + 1)(2s + 1)}{s(2s + 1)} = \frac{s + 1}{s}.$$

6.2 Bosoni e fermioni

Di fatto, tutte le particelle conosciute appartengono a due grandi classi: le particelle le cui funzioni d'onda sono simmetriche, dette *bosoni*, perchè si prova che soddisfano la statistica di Bose-Einstein, mentre quelle dotate di funzioni d'onda antisimmetriche sono dette *fermioni* e soddisfano la statistica di Fermi-Dirac. In teoria quantistica dei campi si prova che i bosoni hanno sempre spin intero ($s = 0, 1, 2$, etc.) mentre i fermioni hanno spin semintero ($s = 1/2, 3/2$, etc.).

Sono bosoni il fotone, il gluone, i bosoni vettoriali W e Z , la particella ρ ($s = 1$); il pione, il kaone ($s = 0$); il gravitone ($s = 2$). Sono fermioni l'elettrone, i quark, i neutrini, il protone, il neutrone ($s = 1/2$); la risonanza Δ ($s = 3/2$).

Scriviamo esplicitamente la funzione d'onda di un sistema di particelle identiche. Consideriamo dapprima N **bosoni**. Sia

$$\psi_p(\xi)$$

un insieme di funzioni d'onda per una delle N particelle identiche; supporremo che p sia un insieme di numeri quantici relativi ad un sistema completo di osservabili compatibili (ad esempio: l'energia, il momento angolare, etc.) e che identificano lo stato di funzione d'onda ψ_p . Dunque le ψ_p sono autofunzioni degli operatori relativi a quelle osservabili e costituiscono un sistema completo. Supponiamo che sia noto che gli N bosoni sono negli stati di numeri quantici p_1, p_2, \dots, p_N (eventualmente alcuni dei numeri quantici p_k possono coincidere, se c'è più di una particella in uno stesso stato). Se supponiamo, infine, che le particelle siano **non interagenti**, una possibile funzione d'onda per il sistema è data da

$$\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\dots\psi_{p_N}(\xi_N),$$

che descrive uno stato nel quale la particella 1 si trova nello stato p_1 , la seconda nello stato p_2 , ecc.

Poiché, tuttavia, abbiamo assunto che le particelle siano bosoni, la loro funzione d'onda deve essere simmetrica per lo scambio di due particelle e sarà data, pertanto, da:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = C \sum_{perm} \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\dots\psi_{p_N}(\xi_N), \quad (6.4)$$

in cui C è una costante di normalizzazione e la somma è su tutte le permutazioni dei numeri quantici p_1, p_2, \dots, p_N .

Esempio 1. La funzione d'onda di due bosoni identici che hanno numeri quantici p_1 e p_2 è

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2) + \psi_{p_2}(\xi_1)\psi_{p_1}(\xi_2) \},$$

in cui si suppone che le autofunzioni ψ_{p_k} soddisfino la proprietà:

$$\int d\xi \psi_{p_k}^*(\xi)\psi_{p_j}(\xi) = \delta_{kj},$$

in modo che la funzione d'onda del sistema sia normalizzata.

Esempio 2. La funzione d'onda di tre bosoni identici dei quali è noto che due occupano lo stato quantico p_1 ed uno lo stato p_2 è data da:

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_1}(\xi_2)\psi_{p_2}(\xi_3) + \psi_{p_2}(\xi_1)\psi_{p_1}(\xi_2)\psi_{p_1}(\xi_3) + \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\psi_{p_1}(\xi_3)].$$

Supponiamo ora che le particelle identiche siano fermioni; sotto le stesse ipotesi precedenti la funzione d'onda è

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{perm} \delta_P \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2)\dots\psi_{p_N}(\xi_N), \quad (6.5)$$

in cui la somma è su tutte le permutazioni dei numeri quantici p_1, p_2, \dots, p_N , mentre $\delta_P = +1$ se la permutazione è pari e vale -1 se è dispari. In maniera alternativa, ma equivalente (basta ricordare la definizione di determinante), possiamo scrivere

$$\psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \begin{pmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{pmatrix} \quad (6.6)$$

Il determinante a secondo membro di questa equazione dicesi *determinante di Slater*.

Esempio 3. La funzione d'onda di due fermioni identici che hanno numeri quantici p_1 e p_2 è

$$\psi(\xi_1, \xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_{p_1}(\xi_1)\psi_{p_2}(\xi_2) - \psi_{p_2}(\xi_1)\psi_{p_1}(\xi_2) \} = \frac{1}{\sqrt{2}} \det \begin{pmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) \end{pmatrix}.$$

Cosa succede se in (6.5) o in (6.6) due o più degli indici p_k risultano uguali? Se, ad esempio, $p_j = p_k$, ciò vuol dire che due particelle hanno lo stesso set di numeri quantici, ossia sono nello stesso stato. In questo caso il determinante svanisce perché presenta due righe uguali. Dunque, la funzione d'onda di un sistema di fermioni identici in cui due o più particelle hanno gli stessi numeri quantici è nulla. Questo risultato è noto come *principio di esclusione di Pauli*.

Esempio 4. Si considerino tre particelle identiche ciascuna delle quali può trovarsi in tre differenti stati: (a, b, c) . Calcolare il numero totale N di stati del sistema; distinguere il caso in cui le particelle abbiano spin semintero, quello in cui lo spin sia intero ed il caso in cui le particelle siano classiche.

Soluzione. Nel caso in cui si tratti di fermioni, a causa del principio di Pauli, ad ogni stato corrisponderà una ed una sola particella; quindi esiste un solo stato del sistema :

$$N = 1.$$

Nel caso in cui siano bosoni possiamo ragionare così: visualizziamo l'assegnazione delle particelle agli stati identificando gli stati con intervalli sulla retta, separati da una linea divisoria. Lo stato a sinistra sia a , quello a destra c e quello intermedio b ; sono necessarie due pareti per definire tale geometria:

$$a \mid b \mid c .$$

Sistemiamo ora le tre particelle nelle tre regioni; ad esempio se sono tutte e tre nello stato a avremo:

$$\cdots \mid \mid ;$$

se due particelle sono nello stato a ed una in c avremo:

$$\cdots \mid \mid ,$$

e così via. Il numero totale di stati si può ottenere effettuando il seguente calcolo. Sistemiamo sulla retta le tre particelle; successivamente posizioniamo la prima parete: ciò può essere fatto in 4 modi diversi. Sistemiamo poi la seconda parete: ciò può essere fatto in 5 modi diversi. Il numero totale di stati è

$$N = \frac{4 \times 5}{2} .$$

Bisogna dividere per due perché permutando le due pareti non cambia la configurazione.

Come si vede sia nel caso dei fermioni che in quello dei bosoni abbiamo assunto che le tre particelle fossero indistinguibili. Esaminiamo, infine, il caso in cui le particelle siano classiche, nel senso che esse sono distinguibili. In questo caso la prima particella può essere posta in tre modi diversi (in a , b o c); anche la seconda e la terza possono essere sistemate in tre modi diversi, e, dunque,

$$N = 3^3 = 27 .$$

La proprietà dei bosoni di poter stare nello stesso stato fa in modo che, quando la temperatura (e quindi l'energia disponibile) di un sistema di bosoni diminuisce, un numero sempre maggiore di bosoni si trova nei livelli di energia più bassi, fino a popolare in maniera macroscopica il livello fondamentale. Questa proprietà è detta *proprietà di condensazione dei bosoni identici*. L'esistenza di questa proprietà fa sì che la funzione d'onda di un sistema di bosoni identici sia di norma un ente macroscopico. Se, infatti, abbiamo N bosoni identici, per la proprietà di condensazione, un gran numero di essi sarà caratterizzato dalla stessa funzione d'onda $\psi(\vec{r})$. Potremo allora interpretare $|\psi(\vec{r})|^2$ non come la probabilità che la misura della posizione di un singolo bosone dia un risultato attorno al punto \vec{r} , ma come *densità dei bosoni*, ossia come *numero di bosoni identici per unità di volume*. In maniera analoga, se questi bosoni hanno carica q , interpreteremo

$$\rho = q|\psi|^2 \tag{6.7}$$

come la densità di carica elettrica del sistema.

Per fermioni identici, invece, non è possibile stare nello stesso stato. Per questo quando si abbassa la temperatura i fermioni tendono, nel limite dello zero assoluto, a occupare tutti gli stati di energia più bassa in numero pari al numero dei fermioni stessi. Qual è la statistica di un sistema di fermioni identici non elementari (ad esempio, nuclei, atomi, etc.)? Supponiamo che le particelle siano costituite ciascuna da n fermioni. Allora lo scambio di due particelle identiche equivale allo scambio di n fermioni e ciò implica un fattore $(-1)^n$. Ne segue l'importante risultato che, se *la particella è costituita da un numero dispari di fermioni, essa è un fermione*; viceversa, se *la particella è costituita da un numero pari di fermioni, essa è un bosone*. In queste considerazioni il numero di costituenti bosonici è irrilevante, perché, sotto lo scambio, ogni bosone concorre con un fattore $+1$.

Esempio 5. I nuclei il cui numero atomico $A = Z + N$ (somma dei protoni e neutroni) è pari sono bosoni, quelli per cui A è dispari sono fermioni. Così sono fermioni i nuclei di elio 3 e bosoni i nuclei di elio 4. Quanto agli atomi, poiché il numero di elettroni è uguale al numero di protoni, essi sono fermioni o bosoni a seconda che il numero di neutroni sia dispari o pari. Nel modello a quark i mesoni sono particelle costituite da un quark ed un antiquark (entrambi di spin $1/2$) e i barioni da tre quark. Per questo, i mesoni sono bosoni e i barioni sono fermioni.

Capitolo 7

Metodo di Approssimazione WKB

Bibliografia: questo capitolo ripercorre la trattazione di Nardulli [1] e Landau-Lifchitz [6]. Per le formule di connessione il testo di riferimento è il Sakurai - Napolitano [7]

7.1 Metodo di Approssimazione WKB

Questo metodo di approssimazione fu introdotto da Wentzel e Brillouin (e, indipendentemente, da Jeffreys) nel 1924 e sviluppato da Kramers. Si tratta di un metodo che approssima le soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria in modelli unidimensionali, ma può essere adattato anche ai casi tridimensionali, almeno per potenziali centrali che, come abbiamo visto, si riducono alla soluzione di un'equazione (l'equazione radiale) in una variabile.

La Meccanica Quantistica deve potersi ricondurre alla Meccanica Classica e questo deve avvenire nel limite in cui \hbar può essere considerata trascurabile. Tuttavia, se vogliamo studiare cosa succede in questo limite, non possiamo procedere direttamente sull'equazione di Schrödinger stazionaria

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (7.1)$$

la quale, per $\hbar \rightarrow 0$, si trasformerebbe in un'equazione algebrica.

Il problema può essere affrontato introducendo, cosa sempre lecita, la soluzione dell'equazione nella forma

$$\psi(x) = e^{\frac{i}{\hbar} \sigma(x)}, \quad (7.2)$$

dove $\sigma(x)$ è soluzione dell'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{i}{\hbar} \sigma''(x) - \frac{1}{\hbar^2} [\sigma'(x)]^2 \right\} + V(x) - E = 0.$$

Questa equazione, introducendo l'impulso classico, che è una quantità reale se siamo in una regione accessibile classicamente,

$$p(x) = \sqrt{2m[E - V(x)]}, \quad (7.3)$$

può essere riscritta nella forma

$$[\sigma'(x)]^2 - i\hbar \sigma''(x) = [p(x)]^2. \quad (7.4)$$

Nel caso in cui $V(x) = 0$, $p(x)$ è costante e questa equazione ha come soluzione $\sigma(x) = \pm p x$. Riotteniamo per soluzione, come ci si aspetta, le onde piane che sono le autofunzioni dell'energia per una particella libera. L'idea di base del metodo è che, se il potenziale $V(x)$ varia lentamente sulla distanza di una lunghezza d'onda, anche la fase della $\psi(x)$ varierà lentamente e potremo trascurare il termine con la derivata seconda di $\sigma(x)$. Notiamo che questo è equivalente al limite $\hbar \rightarrow 0$. Si ottiene così la approssimazione "zero" del metodo

$$[\sigma'_0(x)]^2 = [p(x)]^2 \quad \Rightarrow \quad \sigma'_0(x) = \pm p(x)$$

che comporta

$$\sigma_0(x) = \pm \int dx p(x). \quad (7.5)$$

Prima di affinare questa approssimazione, osserviamo che condizione necessaria perchè l'approssimazione sia valida è che $[\sigma'_0(x)]^2 \gg |\imath \hbar \sigma''_0(x)|$, cioè

$$1 \gg \left| \frac{\hbar \sigma''_0(x)}{[\sigma'_0(x)]^2} \right| \simeq \left| \frac{\hbar}{[p(x)]^2} \frac{dp(x)}{dx} \right| = \left| \frac{\hbar m}{[p(x)]^3} \frac{dV(x)}{dx} \right|.$$

Dal penultimo passaggio vediamo che deve accadere che, su una distanza pari ad una lunghezza d'onda ($\Delta x = \lambda = h/p$), la variazione relativa dell'impulso ($\Delta p/p$) sia piccola. Come è reso evidente dall'ultima espressione, questo è sicuramente vero quando l'energia potenziale è lentamente variabile e l'energia alta, cioè la lunghezza d'onda piccola. Questa situazione è analoga a quanto avviene nel passaggio dall'ottica ondulatoria all'ottica geometrica, nel quale si assume che la lunghezza d'onda sia piccola rispetto alla regione nella quale si hanno notevoli variazioni dell'indice di rifrazione. Notiamo anche che il regime di piccole lunghezze d'onda equivale al limite classico ($\hbar \rightarrow 0$); questo giustifica il nome di Approssimazione semiclassica attribuito a questo metodo. Notiamo, infine, che queste condizioni non sono certamente verificate in prossimità dei punti di inversione del moto classico, nei quali $p(x) = 0$ e la lunghezza d'onda diverge.

$\sigma_0(x)$, dunque, è il risultato esatto per $\sigma(x)$ nel limite $\hbar \rightarrow 0$. Possiamo, quindi, cercare una migliore approssimazione per $\sigma(x)$ considerando uno sviluppo formale in potenze di \hbar ;

$$\sigma(x) = \sigma_0(x) + \frac{\hbar}{\imath} \sigma_1(x) + \left(\frac{\hbar}{\imath}\right)^2 \sigma_2(x) + \dots \quad (7.6)$$

Sostituendo questo sviluppo nell'equazione per σ (7.4) si ottiene

$$[\sigma'_0(x) + \frac{\hbar}{\imath} \sigma'_1(x) + \dots]^2 - \imath \hbar [\sigma''_0(x) + \frac{\hbar}{\imath} \sigma''_1(x) + \dots] = [p(x)]^2$$

e, uguagliando i membri dello stesso ordine in \hbar , otteniamo:

$$\begin{aligned} [\sigma'_0(x)]^2 &= [p(x)]^2 \\ 2\sigma'_0(x)\sigma'_1(x) + \sigma''_0(x) &= 0 \\ \dots &= \dots \end{aligned}$$

La I equazione coincide con la 7.5, mentre dalla II otteniamo:

$$\begin{aligned} \sigma'_1(x) &= -\frac{\sigma''_0(x)}{2\sigma'_0(x)} = -\frac{d}{dx} \frac{1}{2} \ln \sigma'_0(x) = -\frac{d}{dx} \ln \sqrt{|p(x)|} \\ \sigma_1(x) &= \ln \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} + \text{costante} \end{aligned}$$

Al I ordine in \hbar la $\sigma(x)$ è approssimata da

$$\sigma(x) = \pm \int dx p(x) + \frac{\hbar}{\imath} \ln \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} + \text{costante} \quad (7.7)$$

e la funzione d'onda $\psi(x)$ da

$$\psi(x) = C_1 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{\imath}{\hbar} \int dx p(x) \right\} + C_2 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{\imath}{\hbar} \int dx p(x) \right\} \quad \text{con } E > V(x). \quad (7.8)$$

Ciascun termine genera nella distribuzione di probabilità (di trovare la particella) un fattore $\frac{1}{|p(x)|}$ in accordo con l'aspettativa classica per la quale la probabilità deve essere proporzionale al tempo dt trascorso nel tratto dx , e quindi inversamente proporzionale al modulo della velocità o dell'impulso.

Nelle regioni inaccessibili classicamente la fase della funzione d'onda deve essere reale, cioè $\sigma(x)$ deve avere una parte immaginaria. L'approssimazione trovata si adatta a questa situazione perché, in questo caso, l'impulso $p(x)$ diventa immaginario ed otteniamo una differente funzione d'onda:

$$\psi(x) = C'_1 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int dx |p(x)| \right\} + C'_2 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int dx |p(x)| \right\} \quad \text{con } E < V(x). \quad (7.9)$$

Ovviamente, se l'energia è minore del potenziale in una regione infinita, solo uno dei due termini dovrà essere considerato perché l'altro divergerebbe. In generale possiamo dire che quanto più estesa è la regione interdotta classicamente, tanto più trascurabile è il termine che conduce alla divergenza, anche perché l'errore commesso eliminandolo potrebbe essere più piccolo rispetto agli errori insiti in questa approssimazione.

Concludendo, abbiamo costruito le approssimazioni WKB alle funzioni d'onda sia nel caso in cui $E > V(x)$ (7.8), che $E < V(x)$ (7.9). L'approssimazione WKB non può essere, invece, utilizzata in prossimità dei punti di inversione del moto classico dove entrambe le espressioni viste divergono.

7.2 Relazioni di raccordo

Per il motivo appena detto, in presenza di un punto d'inversione del moto classico, non è possibile costruire un'unica funzione d'onda se non riusciamo a raccordare le costanti presenti nelle due espressioni (7.8) e (7.9). Esistono vari metodi per raggiungere questo obiettivo e, in generale, si basano su un'approssimazione lineare del potenziale in un intorno del punto d'inversione (ricordiamo che il metodo è valido per potenziali lentamente variabili). Nel loro libro Landau e Lifchitz [6], ad esempio, all'approssimazione lineare del potenziale fanno seguire un prolungamento analitico della funzione d'onda nel piano complesso che aggira la singolarità. Nel metodo che vedremo si utilizza, invece, la soluzione dell'equazione di Schrödinger per il potenziale lineare raccordandola asintoticamente con le soluzioni WKB. Premettiamo quindi la trattazione del potenziale lineare.

7.2.1 Autofunzioni dell'equazioni di Schrödinger per il potenziale lineare

Il potenziale lineare

$$V(x) = kx \quad (7.10)$$

è presente in vari problemi fisici come la caduta di un grave, il moto di una particella carica tra le armature di un condensatore piano. Esso dà anche risultati interessanti nello studio dello spettro di massa dei mesoni, considerati come stati legati quark-antiquark.

Nel caso della caduta di un grave supporremo che la regione $x < 0$ sia impenetrabile e la funzione d'onda dovrà annullarsi in $x = 0$. Possiamo generalizzare il problema introducendo il potenziale, mostrato in Fig. 7.1 definito anche per $x < 0$

$$V(x) = k|x|. \quad (7.11)$$

Questo è un potenziale simmetrico e, di conseguenza, le autofunzioni dell'energia hanno parità definita (vedi la parte I di questi appunti). Le autofunzioni dispari sono quelle che si annullano nell'origine (le uniche, quindi, da considerare nel caso della caduta di un grave). Le autofunzioni pari, tra le quali è compresa quella dello stato fondamentale, godono della proprietà $\psi(x) = \psi(-x)$ anche nel limite per $x \rightarrow 0$ e hanno, perciò, derivata nulla nell'origine. Consideriamo ora l'equazione di Schrödinger per il potenziale (7.11)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E''(x) + k|x| \psi_E(x) = E \psi_E(x). \quad (7.12)$$

Di questa equazione dovremo accettare le soluzioni non divergenti all'infinito e di parità definita, cioè tali che in $x = 0$ o si annullano (funzioni dispari) o se ne annulla la derivata prima (funzioni pari). Possiamo, pertanto, limitarci alla regione $x > 0$ dove $|x| \equiv x$.

Notiamo che $\frac{mk}{\hbar^2}$ ha dimensione $[L^{-3}]$; per questo il problema presenta una naturale scala di lunghezza

$$x_0 = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{mk}}$$

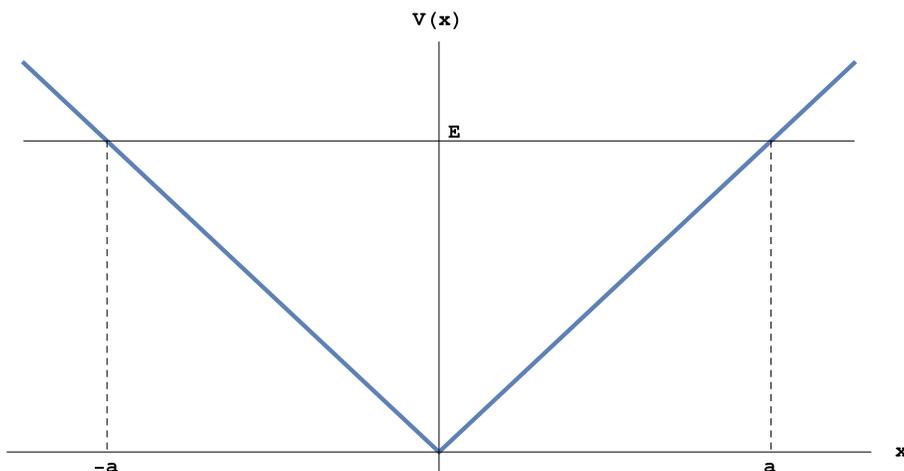


Figura 7.1: Buca di potenziale lineare $V(x) = k|x|$.

e una conseguente scala di energia

$$E_0 = kx_0 = \sqrt[3]{\frac{\hbar^2 k^2}{m}}.$$

Queste scale possono essere utilizzate per definire delle variabili adimensionali

$$y = \frac{x}{x_0} \quad \text{e} \quad \epsilon = \frac{E}{E_0}$$

in termini delle quali l'equazione (7.12) diventa

$$\frac{d^2 \psi_E(y)}{dy^2} - 2(y - \epsilon) \psi_E(y) = 0. \quad (7.13)$$

Il punto d'inversione del moto $x = a = \frac{E}{k}$ corrisponde a $y = \epsilon$. Introducendo la variabile traslata

$$z = \sqrt[3]{2}(y - \epsilon)$$

il punto d'inversione del moto viene spostato in $z = 0$ e l'equazione diventa

$$\frac{d^2 \psi_E(z)}{dz^2} - z \psi_E(z) = 0. \quad (7.14)$$

L'equazione (7.14) è nota come equazione di Airy e la sua soluzione non divergente all'infinito è la funzione di Airy $Ai(z)$, riportata nel grafico in Fig. (7.2). Come si vede, essa ha il comportamento atteso per la funzione d'onda di uno stato legato, oscillatorio nella zona consentita classicamente ($z < 0$) e rapidamente decrescente fuori di essa ($z > 0$).

Imponendo le condizioni al contorno, il punto $z = -\sqrt[3]{2}\epsilon$ (corrispondente a $x = 0$), deve essere uno zero di $Ai(z)$ per le autofunzioni dispari e uno zero per la sua derivata $Ai'(z)$ per le autofunzioni pari. Questa condizione determina lo spettro degli autovalori:

$$E_n = -\frac{E_0}{\sqrt[3]{2}} z_n$$

dove con z_n indichiamo l'insieme ordinato dei suddetti zeri. Essi sono riportati nella tabella in figura (7.3). Nella notazione usata nella tabella gli zeri delle funzioni di Airy $Ai(z)$ e $Ai'(z)$ sono denominati rispettivamente a_s e a'_s .

Avremo quindi il seguente ordinamento degli zeri e delle autofunzioni

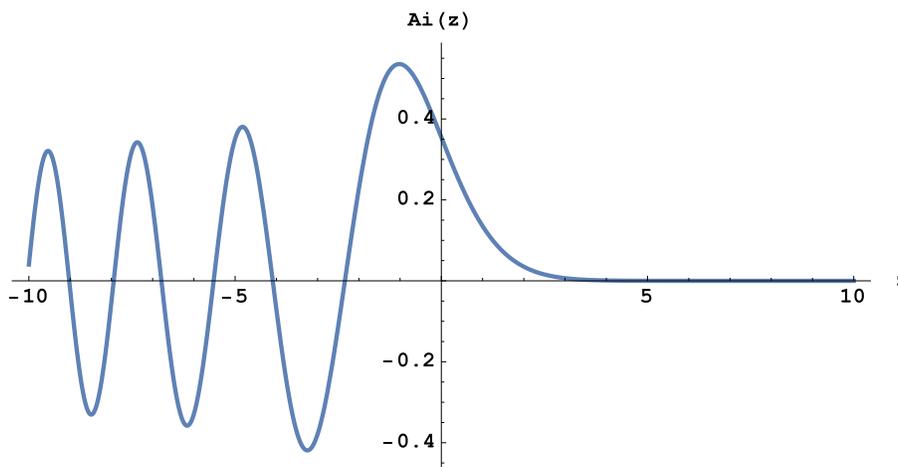


Figura 7.2: La funzione di Airy $Ai(z)$. L'origine nelle coordinate traslate corrisponde al punto a di inversione del moto classico per il potenziale lineare.

Table 10.13 ZEROS AND ASSOCIATED VALUES OF AIRY FUNCTIONS AND THEIR DERIVATIVES

| s | a_s | $Ai'(a_s)$ | a'_s | $Ai(a'_s)$ | b_s | $Bi'(b_s)$ | b'_s | $Bi(b'_s)$ |
|-----|---------------|--------------|---------------|--------------|---------------|--------------|---------------|--------------|
| 1 | - 2.33810 741 | +0.70121 082 | - 1.01879 297 | +0.53565 666 | - 1.17371 322 | +0.60195 789 | - 2.29443 968 | -0.45494 438 |
| 2 | - 4.08794 944 | -0.80311 137 | - 3.24819 758 | -0.41901 548 | - 3.27109 330 | -0.76031 014 | - 4.07315 509 | +0.39652 284 |
| 3 | - 5.52055 983 | +0.86520 403 | - 4.82009 921 | +0.38040 647 | - 4.83073 784 | +0.83699 101 | - 5.51239 573 | -0.36796 916 |
| 4 | - 6.78670 809 | -0.91085 074 | - 6.16330 736 | -0.35790 794 | - 6.16985 213 | -0.88947 990 | - 6.78129 445 | +0.34949 912 |
| 5 | - 7.94413 359 | +0.94733 571 | - 7.37217 726 | +0.34230 124 | - 7.37676 208 | +0.92998 364 | - 7.94017 869 | -0.33602 624 |
| 6 | - 9.02265 085 | -0.97792 281 | - 8.48848 673 | -0.33047 623 | - 8.49194 885 | -0.96323 443 | - 9.01958 336 | +0.32550 974 |
| 7 | -10.04017 434 | +1.00437 012 | - 9.53544 905 | +0.32102 229 | - 9.53819 438 | +0.99158 637 | -10.03769 633 | -0.31693 465 |
| 8 | -11.00852 430 | -1.02773 869 | -10.52766 040 | -0.31318 539 | -10.52991 351 | -1.01638 966 | -11.00646 267 | +0.30972 594 |
| 9 | -11.93601 556 | +1.04872 065 | -11.47505 663 | +0.30651 729 | -11.47695 355 | +1.03849 429 | -11.93426 165 | -0.30352 766 |
| 10 | -12.82877 675 | -1.06779 386 | -12.38478 837 | -0.30073 083 | -12.38641 714 | -1.05847 184 | -12.82725 831 | +0.29810 491 |

Figura 7.3: Tabella tratta da [4] che riporta gli zeri delle funzioni Airy.

| | | | |
|---------|---------------------|----------------|-------------------------|
| $n = 1$ | I zero di $Ai'(z)$ | $z_1 = -1.019$ | I autofunzione pari |
| $n = 2$ | I zero di $Ai(z)$ | $z_1 = -2.338$ | I autofunzione dispari |
| $n = 3$ | II zero di $Ai'(z)$ | $z_1 = -3.249$ | II autofunzione pari |
| $n = 4$ | II zero di $Ai(z)$ | $z_1 = -4.088$ | II autofunzione dispari |
| ... | ... | ... | ... |

7.2.2 Ritorno alle relazioni di raccordo

Denominiamo con a un punto d'inversione del moto classico, tale, quindi, che

$$V(a) = E.$$

Supponiamo, esemplificando, che la regione $x > a$ sia quella inaccessibile classicamente, cioè $V(x) > E$ per $x > a$ e la indichiamo come regione I, mentre quella per $x < a$ sarà la regione II (vedi Fig. 7.4). Fissiamo la normalizzazione ponendo a come estremo inferiore di integrazione.

Nella regione I, supponendo che tale regione si estenda all'infinito, consideriamo solo la funzione d'onda decrescente

$$\psi_I(x) = C_1 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy |p(y)| \right\}, \tag{7.15}$$

mentre nella regione II contribuiscono entrambi i termini

$$\psi_{II}(x) = C_1 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x dy p(y) \right\} + C_2 \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x dy p(y) \right\}. \tag{7.16}$$

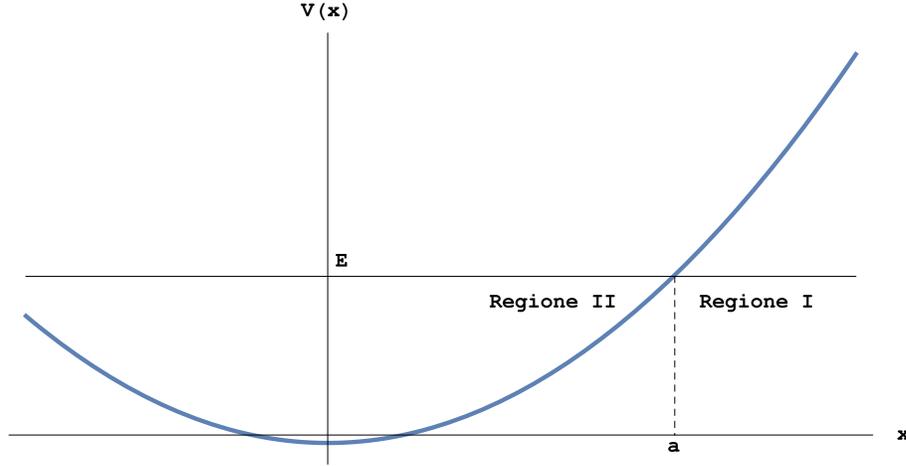


Figura 7.4: Il punto a di inversione del moto classico individua l'intorno nel quale effettuare il raccordo tra le funzioni d'onda WKB

Come abbiamo detto i coefficienti C_1 , C_2 e C'_1 devono essere collegati tra di loro dato che le due espressioni rappresentano un'unica funzione. La difficoltà dovuta al fatto che ψ_I e ψ_{II} non sono definite al confine tra le due regioni sarà superata:

1. approssimando il potenziale con un andamento lineare nella regione di frontiera, cosa lecita dato che stiamo trattando potenziali lentamente variabili,
2. confrontando il conseguente comportamento di ψ_I e ψ_{II} con quello della soluzione dell'equazione di Schrödinger per il potenziale lineare, cioè la funzione di Airy.

Approssimiamo linearmente il potenziale:

$$V(x) - E \simeq V'(a)(x - a) = Fq \quad \text{dove} \quad q = x - a \text{ e } F = V'(a)$$

Nella regione I, essendo $x > a$, $x - a = q > 0$, abbiamo

$$\begin{aligned} |p(x)| &= |\sqrt{2m[E - V(x)]}| \simeq \sqrt{2mFq} \\ \int_a^x dy |p(y)| &\simeq \sqrt{2mF} \frac{2}{3} q^{\frac{3}{2}} \\ \psi_I(x) &\simeq C'_1 (2mFq)^{-\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{\sqrt{2mF}}{\hbar} \frac{2}{3} q^{\frac{3}{2}} \right\} \end{aligned}$$

L'andamento della funzione di Airy $Ai(z)$ per grandi z positivi è dato da

$$Ai(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{2\sqrt{\pi}} z^{-\frac{1}{4}} \exp \left\{ -\frac{2}{3} z^{\frac{3}{2}} \right\}$$

Confrontando gli esponenti delle due espressioni otteniamo

$$z = \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{3}} q \tag{7.17}$$

e, dal confronto tra i coefficienti degli esponenziali,

$$C'_1 (2mFq)^{-\frac{1}{4}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} z^{-\frac{1}{4}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{-\frac{1}{12}} q^{-\frac{1}{4}}$$

che implica

$$C'_1 (2mF)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{12}} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \quad (7.18)$$

Consideriamo ora la regione II, dove $x < a$, $|q| = a - x$

$$\begin{aligned} p(x) &= \sqrt{2m[E - V(x)]} \simeq \sqrt{2mF}|q|^{\frac{1}{2}} \\ \int_a^x dy p(y) &= - \int_x^a dy p(y) \simeq -\sqrt{2mF} \frac{2}{3} |q|^{\frac{3}{2}} \\ \psi_{II}(x) &\simeq (2mF)^{-\frac{1}{4}} |q|^{-\frac{1}{4}} \left[C_1 \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF} \frac{2}{3} |q|^{\frac{3}{2}} \right\} + C_2 \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sqrt{2mF} \frac{2}{3} |q|^{\frac{3}{2}} \right\} \right]. \end{aligned}$$

Utilizzando la relazione già trovata tra z e q , abbiamo

$$\psi_{II}(x) \simeq (2mF)^{-\frac{1}{4}} |z|^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{12}} \left[C_1 \exp \left\{ -i \frac{2}{3} |z|^{\frac{3}{2}} \right\} + C_2 \exp \left\{ i \frac{2}{3} |z|^{\frac{3}{2}} \right\} \right].$$

L'andamento della funzione di Airy $Ai(z)$ per $z \rightarrow -\infty$ è dato da

$$Ai(z) \underset{z \rightarrow -\infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{\pi}} |z|^{-\frac{1}{4}} \cos \left(\frac{2}{3} |z|^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right)$$

Se vogliamo riprodurre l'andamento $\cos \left(\frac{2}{3} |z|^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right)$ occorre che sia

$$C_1 = \frac{C}{2} e^{+i\frac{\pi}{4}} \quad \text{e} \quad C_2 = \frac{C}{2} e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

così che si abbia

$$\psi_{II}(x) \simeq C(2mF)^{-\frac{1}{4}} |z|^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{12}} \cos \left(\frac{2}{3} |z|^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} \right).$$

Completando il confronto tra questa espressione e l'andamento asintotico della funzione di Airy, ricaviamo

$$C(2mF)^{-\frac{1}{4}} \left(\frac{2mF}{\hbar^2} \right)^{\frac{1}{12}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}}.$$

Questa espressione, confrontata con quella ricavata per la regione I, la (7.18), implica

$$C = 2C'_1.$$

Abbiamo, quindi, completato il raccordo e possiamo riscrivere la funzione d'onda WKB nelle due regioni. Nella regione I, per $x > a$, abbiamo

$$\psi_I(x) = \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy |p(y)| \right\}, \quad (7.19)$$

e nella regione II, per $x < a$, abbiamo

$$\begin{aligned} \psi_{II}(x) &= \frac{C}{2\sqrt{|p(x)|}} \left[\exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \int_a^x dy p(y) + i\frac{\pi}{4} \right\} + \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_a^x dy p(y) - i\frac{\pi}{4} \right\} \right] = \\ &= \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right] = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right]. \end{aligned} \quad (7.20)$$

Ovviamente se la regione classicamente interdotta si trova a sinistra del punto di raccordo sarà necessario invertire nelle precedenti espressioni i limiti di integrazione.

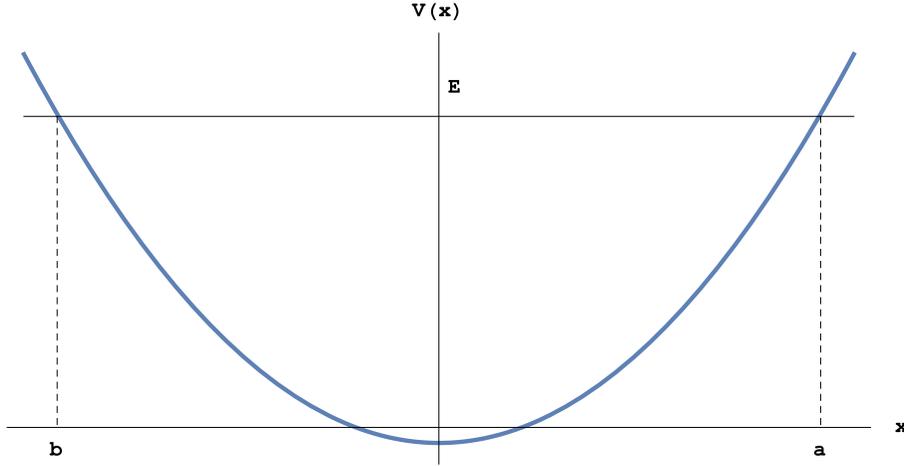


Figura 7.5: Una buca di potenziale che dà luogo a uno spettro discreto dell'energia. Sono indicati i due punti di inversione del moto classico a e b corrispondenti al livello di energia E .

7.3 Quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

Supponiamo che oggetto di studio sia un potenziale $V(x)$ in corrispondenza di un livello di energia E che risulta inferiore a $V(x)$ per ogni punto esterno all'intervallo $[b, a]$ (vedi figura 7.5). b e a sono due punti di inversione del moto classico e delimitano una regione classicamente consentita. In meccanica quantistica siamo in presenza di uno spettro discreto. Mostriamo gli autovalori dell'energia possono essere determinati, nell'approssimazione WKB, utilizzando le condizioni di raccordo appena ricavate.

La funzione d'onda nella regione $[b, a]$ può essere descritta, utilizzando la (7.20), in due modi diversi. Se consideriamo la condizione di raccordo in $x = a$ abbiamo

$$\psi_1(x) = \frac{C_1}{\sqrt{|p(x)|}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^a dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right],$$

mentre, se usiamo la condizione di raccordo in $x = b$, abbiamo

$$\psi_2(x) = \frac{C_2}{\sqrt{|p(x)|}} \sin \left[\frac{1}{\hbar} \int_b^x dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right].$$

Queste due espressioni devono coincidere. Osserviamo che C_1 e C_2 possono essere considerati reali e al più possono differire per un segno. È facile convincersi che, detti α_1 e α_2 gli argomenti della funzione sin presenti in $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ rispettivamente, deve risultare

$$\alpha_1 + \alpha_2 = \begin{cases} (2n - 1)\pi, & \text{con } n = 1, 2, \dots, \text{ se } C_1 = C_2; \\ 2n\pi, & \text{con } n = 1, 2, \dots, \text{ se } C_1 = -C_2. \end{cases}$$

e

$$\alpha_1 - \alpha_2 = \begin{cases} (2n - 1)\pi, & \text{con } n = 1, 2, \dots, \text{ se } C_1 = -C_2; \\ 2n\pi, & \text{con } n = 0, 1, 2, \dots, \text{ se } C_1 = C_2. \end{cases}$$

Tuttavia, la seconda classe di soluzioni non è accettabile dato che $\alpha_1 - \alpha_2$ è una funzione di x ; risulta, quindi, che $\psi_1(x)$ e $\psi_2(x)$ possono coincidere solo se

$$\alpha_1 + \alpha_2 = \frac{1}{\hbar} \int_b^a dy p(y) + \frac{\pi}{2} = (n + 1)\pi \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots$$

che equivale a

$$\frac{1}{\hbar} \int_b^a dx p(x) = \left(n + \frac{1}{2} \right) \pi \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.21)$$

Il primo membro di questa relazione dipende da E : questa diventa quindi una condizione perché E sia un autovalore e determina lo spettro discreto dell'energia. Se si considera un'intera oscillazione della particella nella buca la (7.21) può essere riscritta come

$$\oint dx p(x) = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.22)$$

dove l'integrale è esteso alla traiettoria classica completa. Questa è la regola di quantizzazione introdotta da Bohr e Sommerfeld nell'*Antica Teoria dei Quanti* per spiegare gli spettri discreti di emissione degli atomi. Notiamo che l'integrando è funzione crescente di E ; quindi, n ordina in maniera crescente i livelli e la traiettoria relativa ad un certo valore di energia E_n delimita un dominio D che contiene al suo interno tutte le traiettorie con $E < E_n$. D'altra parte

$$\oint dx p(x) = \int_D dp dx$$

Per questo, se consideriamo la regola di Bohr-Sommerfeld nel limite di grandi n possiamo scrivere

$$\int_D dp dx \simeq 2\pi\hbar n = \sum_{j=1}^n 2\pi\hbar$$

Possiamo interpretare questa relazione nel senso che il dominio dello spazio delle fasi della meccanica classica diventa in Meccanica Quantistica una somma dove ogni livello contribuisce con $2\pi\hbar$. Questo consente di effettuare il passaggio dalla Meccanica Statistica Classica alla Meccanica Statistica Quantistica; nel caso di sistemi di energia E a N particelle avremo

$$\int_D \frac{d^{3N}p d^{3N}q}{(2\pi\hbar)^{3N}} \rightarrow \sum_j$$

dove la somma è estesa a tutti gli stati quantistici con $E_n < E$.

7.3.1 Esercizi

1. Spettro dell'energia di un Oscillatore Armonico in approssimazione WKB.

Come abbiamo visto, il metodo WKB consente di calcolare un'approssimazione agli autovalori dell'energia E_n imponendo che esso soddisfi la relazione (7.22), cioè che l'integrale dell'impulso lungo la traiettoria chiusa classica (un periodo) per quell'energia sia pari a $n + \frac{1}{2}$ di $2\pi\hbar$ dove n è un numero intero. Si è anche visto che tale integrale è uguale all'area inclusa all'interno della traiettoria nello spazio delle fasi $p - q$. Per il livello E_n tale traiettoria classica è definita dalla relazione

$$E_n = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 q^2$$

che possiamo riscrivere anche nella forma

$$1 = \frac{p^2}{2mE_n} + \frac{q^2}{\frac{2E_n}{m\omega^2}}$$

Nello spazio delle fasi $p - q$ la traiettoria chiusa corrispondente ad un periodo del moto classico è, dunque, un'ellissi di semiassi

$$a = \sqrt{\frac{2E_n}{m\omega^2}} \quad \text{e} \quad b = \sqrt{2mE_n},$$

la cui area è

$$\pi ab = \pi \frac{2E_n}{\omega}$$

Applicando la condizione di quantizzazione si ottiene

$$\pi \frac{2E_n}{\omega} = 2\pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots,$$

cioè

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots$$

In questo caso, il metodo WKB dà il risultato esatto.

2. Spettro dell'energia per la caduta di un grave

La caduta di un grave corrisponde al moto di una massa m in un potenziale

$$V(z) = \begin{cases} mgz, & \text{se } z > 0 \\ \infty, & \text{se } z < 0 \end{cases}$$

cioè proprio il potenziale lineare del quale abbiamo visto la soluzione esatta. Classicamente, supponendo

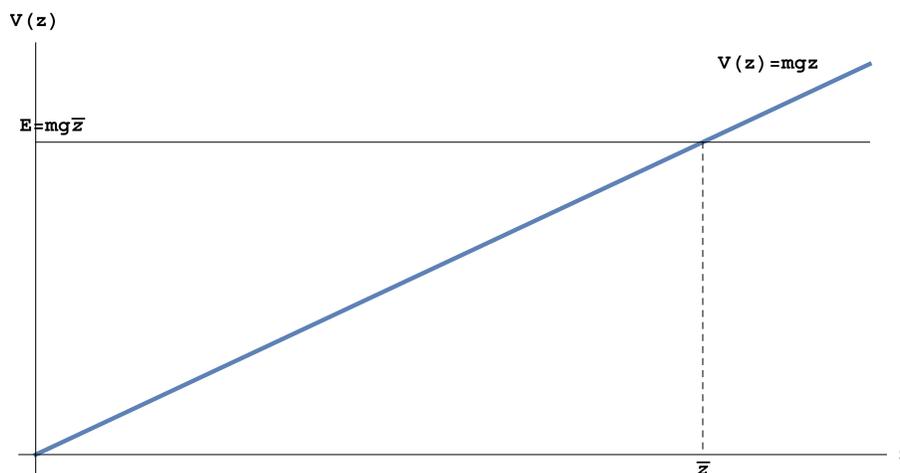


Figura 7.6: Buca di potenziale per la caduta di un grave.

elastici gli urti contro il pavimento a $z = 0$, si ha un moto periodico tra i punti d'inversione $z = 0$ e $z = \bar{z} = \frac{E}{mg}$ con periodo T che ricaviamo dalla relazione

$$\frac{1}{2} g \left(\frac{T}{2} \right)^2 = \frac{E}{mg},$$

al quale corrisponde la frequenza

$$\omega = \pi g \sqrt{\frac{m}{2E}}.$$

Lo spettro discreto dell'energia può essere valutato in approssimazione WKB tramite la relazione

$$I = \int_0^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mgz)} = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Notiamo, tuttavia, che la regola di Bohr-Sommerfeld è stata ricavata nell'ipotesi che il potenziale sia debolmente variabile e questo sicuramente non avviene in $z = 0$. Possiamo però ricorrere al trucco, utilizzato per la soluzione esatta dello stesso problema (7.11), di estendere il potenziale a $z < 0$ nella forma

$$V(z) = k|z|, \tag{7.23}$$

restringendoci, però, alle soluzioni con n dispari che si azzerano nell'origine. Dovremo, quindi, imporre

$$\int_{-\bar{z}}^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mg|z|)} = \pi\hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 1, 3, 5, \dots$$

o, equivalentemente,

$$\int_{-\bar{z}}^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mg|z|)} = \pi\hbar \left(2n - \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

cioè, data la simmetria del potenziale,

$$I = \int_0^{\bar{z}} dz \sqrt{2m(E_n - mg|z|)} = \pi\hbar \left(n - \frac{1}{4} \right) \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

L'integrale I può essere valutato facilmente:

$$I = \sqrt{2m^2g} \int_0^{\bar{z}} dz \sqrt{\bar{z} - z} = -\sqrt{2m^2g} \left[\frac{2}{3} (\bar{z} - z)^{\frac{3}{2}} \right]_0^{\bar{z}} = \frac{2}{3} \sqrt{2m^2g} \bar{z}^{\frac{3}{2}}$$

Si ottiene così lo spettro

$$E_n = \frac{[3\pi(n - \frac{1}{4})]^{\frac{2}{3}}}{2} \sqrt[3]{mg^2\hbar^2} \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

Gli effetti quantistici non sono percepibili a livello macroscopico. Infatti nel caso di una massa $m = 1 \text{ Kg}$ che cade da un metro di altezza avremmo un'energia

$$E_n = mg\bar{z} = 9.8J$$

mentre l'energia dello stato fondamentale è sarebbe

$$E_1 \simeq \sqrt[3]{mg^2\hbar^2} \simeq (1 \cdot 10^2 \cdot 10^{-68})^{\frac{1}{3}} = 10^{-22} J$$

Poiché per grandi n si ha

$$E_n \sim n^{\frac{2}{3}} E_1$$

avremmo

$$n \sim \left(\frac{E_n}{E_1} \right)^{\frac{3}{2}} \simeq \left(\frac{9.8}{10^{-22}} \right)^{\frac{3}{2}} \simeq 10^{34}.$$

Si tratta di un numero enorme, tuttavia potrebbe darsi che intorno al livello E_n la densità di livelli sia bassa consentendo di rilevare effetti quantistici. Valutiamo, pertanto, la distanza tra i livelli intorno a E_n da

$$\Delta E_n = \frac{dE_n}{dn} \Delta n \quad \text{con } \Delta n = 1.$$

Abbiamo

$$\Delta E_n \simeq \frac{2}{3} E_1 n^{-\frac{1}{3}} \simeq 10^{-11} \cdot 10^{-22} = 10^{-33} J$$

che è estremamente piccola rispetto a $E_n = 9,8 J$.

3. Spettro dell'energia per il potenziale

$$V(x) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x}{a}$$

dove a è una costante positiva.

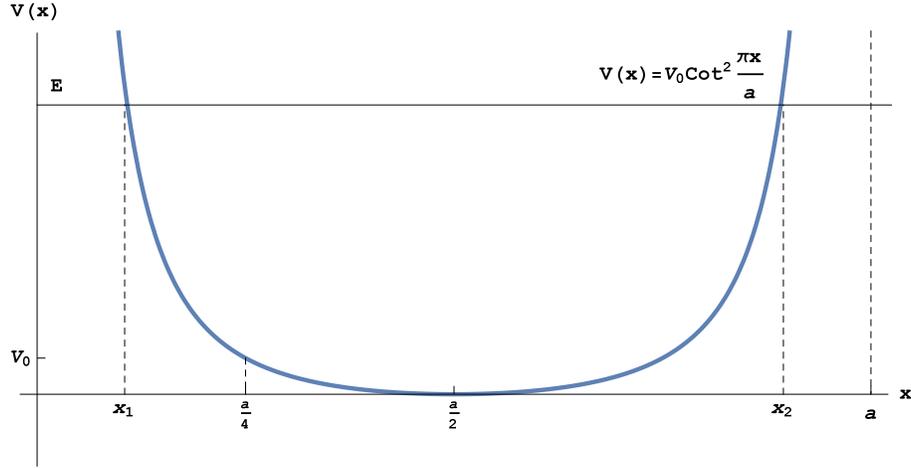


Figura 7.7: Buca di potenziale $V(x) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x}{a}$.

Gli autovalori E_n dell'energia sono determinati dalla relazione

$$I = \pi \hbar \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.24)$$

dove, tenendo conto della simmetria del potenziale,

$$I = 2 \int_{x_1}^{\frac{a}{2}} dx \sqrt{2mV_0} \sqrt{\frac{E}{V_0} - \cot^2 \frac{\pi x}{a}} = \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \int_{\frac{\pi x_1}{a}}^{\frac{\pi}{2}} dy \sqrt{\alpha - \cot^2 y}$$

dove

$$V(x_1) = V_0 \cot^2 \frac{\pi x_1}{a} = E_n \quad \text{e} \quad \alpha = \frac{E_n}{V_0} = \cot^2 \frac{\pi x_1}{a}$$

Consideriamo la sostituzione

$$z = \sqrt{\frac{\alpha - \cot^2 y}{\cot^2 y}} = \sqrt{\alpha \tan^2 y - 1}$$

Da

$$\begin{aligned} z^2 = \alpha \tan^2 y - 1 &\Rightarrow \tan y = \sqrt{\frac{1+z^2}{\alpha}} \\ z^2 = \alpha \frac{1 - \cos^2 y}{\cos^2 y} - 1 &\Rightarrow \cos^2 y = \frac{\alpha}{z^2 + 1 + \alpha} \end{aligned}$$

abbiamo

$$dz = \frac{\alpha \tan y}{z \cos^2 y} dy \quad \Rightarrow \quad dy = \frac{z \cos^2 y}{\alpha \tan y} dz = \frac{z}{\alpha} \frac{\alpha}{z^2 + 1 + \alpha} \sqrt{\frac{\alpha}{1+z^2}} dz$$

e

$$\sqrt{\alpha - \cot^2 y} = \frac{z}{\tan y} = z \sqrt{\frac{\alpha}{1+z^2}},$$

mentre per i limiti di integrazione risulta

$$\begin{aligned} y_1 = \frac{\pi x_1}{a} &\Rightarrow z_1 = \sqrt{\frac{\alpha - \cot^2 \frac{\pi x_1}{a}}{\cot^2 \frac{\pi x_1}{a}}} = 0 \\ y_2 = \frac{\pi}{2} &\Rightarrow z_2 = \sqrt{\frac{\alpha - \cot^2 \frac{\pi}{2}}{\cot^2 \frac{\pi}{2}}} = +\infty \end{aligned}$$

Sostituendo nell'integrale

$$\begin{aligned} I &= \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \int_0^{+\infty} dz \frac{\alpha z^2}{(z^2 + 1 + \alpha)(z^2 + 1)} = \\ &= \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} \int_0^{+\infty} dz \left[\frac{1 + \alpha}{z^2 + 1 + \alpha} - \frac{1}{z^2 + 1} \right] = \\ &= \frac{2a}{\pi} \sqrt{2mV_0} (\sqrt{1 + \alpha} - 1) \frac{\pi}{2} \end{aligned}$$

dove abbiamo utilizzato l'integrale

$$\int_0^{+\infty} dz \frac{1}{z^2 + 1} = [\arctan z]_0^{+\infty} = \frac{\pi}{2}$$

Imponendo la condizione di quantizzazione (7.24) e ricordando che $\alpha = \frac{E_n}{V_0}$, si ottiene lo spettro dell'energia

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 + 2\pi \hbar \sqrt{\frac{V_0}{2ma^2}} \left(n + \frac{1}{2} \right)$$

che per V_0 piccoli riproduce lo spettro del pozzo di potenziale quadrato, mentre per V_0 grandi quello dell'oscillatore armonico (notiamo che V_0 è il valore assunto dal potenziale in $\frac{a}{4}$, vedi Fig. 7.7).

4. Atomo idrogenoide

Calcolare l'energia degli stati legati di un atomo idrogenoide (vedi paragrafo 4.3.6) in approssimazione WKB, considerando che l'equazione radiale di Schrödinger, a fissato stato di momento angolare, è un'equazione unidimensionale di Schrödinger per il potenziale effettivo

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2}.$$

Confrontare il risultato con quello esatto (4.70).

Suggerimento: può risultare utile l'integrale

$$\int_{\alpha}^{\beta} dx \frac{1}{x} \sqrt{(x - \alpha)(\beta - x)} = \frac{\pi}{2} (\sqrt{\beta} - \sqrt{\alpha}) \quad (7.25)$$

Soluzione

Il metodo WKB, in questo caso di calcolo dello spettro discreto, si applica imponendo la condizione

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{2m(E - V(r))} = \left(n_r + \frac{1}{2} \right) \pi \hbar \quad \text{with } n_r = 0, 1, 2, \dots, \quad (7.26)$$

dove r_1 e r_2 sono i punti d'inversione del moto classico, cioè le soluzioni dell'equazione $E - V(r) = 0$. L'energia così determinata dipenderà dal numero quantico orbitale ℓ e dal nuovo numero quantico radiale n_r .

Determiniamo, prima di tutto, r_1 e r_2 . Poichè nel nostro caso l'energia è negativa, possiamo scrivere:

$$\begin{aligned} -|E| \left(1 + \frac{V(r)}{|E|} \right) &= 0 \\ -|E| \left[1 - \frac{Ze^2}{r|E|} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2mr^2|E|} \right] &= 0 \\ -\frac{|E|}{r^2} \left[r^2 - \frac{Ze^2 r}{|E|} + \frac{\hbar^2 \ell(\ell + 1)}{2m|E|} \right] &= 0 \end{aligned}$$

Posto $b = -\frac{Ze^2}{|E|}$ e $c = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m|E|}$, le soluzioni sono date da

$$r_{1/2} = -\frac{b}{2} \pm \sqrt{\frac{b^2}{4} - c},$$

cioè da

$$r_1 = \frac{Ze^2}{2|E|} - \sqrt{\frac{Z^2 e^4}{4|E|^2} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m|E|}} \quad (7.27)$$

$$r_2 = \frac{Ze^2}{2|E|} + \sqrt{\frac{Z^2 e^4}{4|E|^2} - \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m|E|}} \quad (7.28)$$

La condizione (7.26) diventa, quindi,

$$\sqrt{2m|E|} \int_{r_1}^{r_2} dr \sqrt{-1 - \frac{V(r)}{|E|}} = \sqrt{2m|E|} \int_{r_1}^{r_2} dr \frac{1}{r} \sqrt{-(r-r_1)(r-r_2)} = \left(n_r + \frac{1}{2}\right) \pi \hbar$$

cioè

$$\int_{r_1}^{r_2} dr \frac{1}{r} \sqrt{(r-r_1)(r_2-r)} = \frac{(n_r + \frac{1}{2}) \pi \hbar}{\sqrt{2m|E|}}$$

Utilizzando la formula suggerita, ricaviamo

$$(\sqrt{r_2} - \sqrt{r_1})^2 = \frac{2(n_r + \frac{1}{2}) \hbar}{\sqrt{2m|E|}}.$$

Sviluppando il quadrato e tenendo conto delle relazioni $r_1 + r_2 = -b = \frac{Ze^2}{|E|}$ e $r_1 r_2 = c = \frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m|E|}$, otteniamo

$$\frac{Ze^2}{|E|} - 2\sqrt{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m|E|}} = 2\frac{(n_r + \frac{1}{2}) \hbar}{\sqrt{2m|E|}}$$

$$\frac{Ze^2}{\sqrt{|E|}} = 2\sqrt{\frac{\hbar^2 \ell(\ell+1)}{2m}} + 2\frac{(n_r + \frac{1}{2}) \hbar}{\sqrt{2m}}$$

$$\frac{1}{\sqrt{|E|}} = \frac{2\hbar}{Ze^2 \sqrt{2m}} \left[\sqrt{\ell(\ell+1)} + n_r + \frac{1}{2} \right]$$

Introducendo la costante di struttura fine $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$, otteniamo il risultato cercato:

$$E = -|E| = -\frac{1}{2} mc^2 (Z\alpha)^2 \frac{1}{\left[\sqrt{\ell(\ell+1)} + n_r + \frac{1}{2} \right]^2} \quad (7.29)$$

Per quanto riguarda il confronto con il risultato esatto

$$E_n = -\frac{1}{2} mc^2 \frac{(Z\alpha)^2}{n^2}.$$

notiamo che il numero quantico principale n è dato da $n = n_r + \ell + 1$, per cui il risultato del calcolo WKB converge a quello esatto quando si considerano valori alti per entrambi i numeri quantici n_r e ℓ .

7.4 Trasmissione attraverso una barriera di potenziale

Consideriamo una particella che, muovendosi nella direzione positiva dell'asse x , incontra una barriera di potenziale, cioè entra in una regione nella quale l'energia potenziale è maggiore dell'energia totale E della particella. Mentre in Meccanica Classica la particella verrebbe riflessa dalla barriera, in Meccanica Quantistica, come abbiamo visto nel caso della barriera quadrata, vi è una probabilità finita che la particella attraversi la barriera. Vogliamo calcolare tale probabilità utilizzando le funzioni d'onda WKB. Ricordiamo che perché questa approssimazione sia valida occorre che il potenziale vari molto lentamente; la regione classicamente vietata dovrà, quindi, essere molto estesa e ci si aspetta che la probabilità di trasmissione sia piccola. Supporremo inoltre che per grandi $|x|$ l'energia potenziale sia nulla. Facendo riferimento alla figura

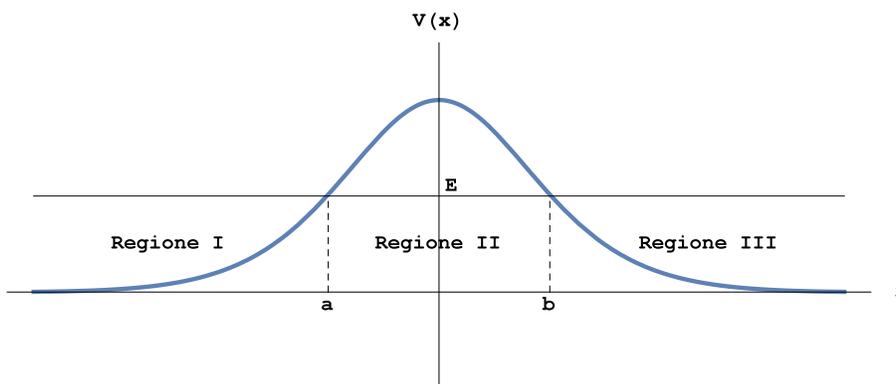


Figura 7.8: Effetto tunnel attraverso una barriera di potenziale. I punti di inversione del moto classico a e b suddividono l'asse x in tre regioni.

7.8, indichiamo con I, II e III le tre regioni nelle quali l'asse x viene suddiviso dai punti di inversione del moto a e b .

Scegliamo la funzione d'onda nella regione I in maniera che essa si comporti per $|x| \rightarrow -\infty$ come la sovrapposizione di un'onda piana che si propaga verso destra e di un'onda piana riflessa che si propaga verso sinistra:

$$\psi_I(x) = \frac{2}{\sqrt{|v(x)|}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right] \quad (7.30)$$

Infatti, nelle ipotesi fatte, esisterà un punto x_0 tale per $x < x_0$ il potenziale può essere considerato nullo e l'impulso costante:

$$\int_a^x dy p(y) \underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} \int_a^{x_0} dy p(y) + \int_{x_0}^x dy p(y) = \text{costante} + p x$$

e quindi, effettivamente,

$$\psi_I(x) \underset{x \rightarrow -\infty}{\sim} \frac{1}{\sqrt{|v(x)|}} \left[e^{i \frac{p x}{\hbar} + i \alpha} + e^{-i \frac{p x}{\hbar} + i \beta} \right].$$

Applicando a questa espressione la definizione di densità di corrente di probabilità

$$j = \frac{1}{2m} [\psi^* \hat{P} \psi - \psi \hat{P} \psi^*]$$

vediamo che, con la normalizzazione scelta, la densità di corrente di probabilità dell'onda incidente è pari a 1.

Usando le formule di raccordo possiamo scrivere l'espressione che la ψ_I assume nella regione II:

$$\psi_{II}^{(I)}(x) = \frac{1}{\sqrt{|v(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^x dy |p(y)|} = \frac{1}{\sqrt{|v(x)|}} e^{-\frac{1}{\hbar} \int_a^b dy |p(y)|} e^{\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)|} \quad (7.31)$$

Nella regione III vogliamo che la funzione d'onda rappresenti una particella che si propaghi verso destra, l'onda trasmessa attraverso la barriera:

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x dy p(y) - \frac{i\pi}{4}}$$

dove la fase è stata scelta in maniera opportuna. Questa funzione d'onda può essere prolungata, tramite le formule di raccordo, nella regione II dove assume la forma

$$\psi_{II}^{(III)}(x) = -\frac{iC}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)|} \quad (7.32)$$

la cui dimostrazione rinviemo per il momento. Perché i due prolungamenti nella regione II (7.31) e (7.32) coincidano occorre che

$$-\frac{iC}{\sqrt{m}} = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dy |p(y)|} \Rightarrow C = \sqrt{m} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dy |p(y)|} e^{i\frac{\pi}{2}}.$$

Pertanto, l'onda trasmessa è data da

$$\psi_{III}(x) = \frac{1}{\sqrt{v(x)}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_a^b dy |p(y)|} e^{i\frac{\pi}{4}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_b^x dy p(y)}$$

e la densità di corrente di probabilità nella regione III è data da

$$T = j_{III}(x) = \frac{\hbar}{2im} [\psi^* \psi' - \psi \psi'^*] = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dy |p(y)|}. \quad (7.33)$$

Avendo scelto la densità di corrente incidente unitaria, j_{III} rappresenta la probabilità di trasmissione T della particella al di là della barriera.

Dimostrazione dell'espressione (7.32). Sappiamo che nella regione II, classicamente proibita, la funzione d'onda WKB ha la forma (7.9)

$$\psi(x) = C'_1 \frac{1}{\sqrt{|p(y)|}} \exp \left\{ \frac{1}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| \right\} + C'_2 \frac{1}{\sqrt{|p(y)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| \right\}.$$

Notiamo che in questa regione la probabilità di trovare la particella deve diminuire al tendere di x a b . Questo è garantito solo dal primo termine che è una funzione decrescente di x . Questo giustifica la scelta della funzione

$$\psi_{II}^{(III)}(x) = \frac{C'}{\sqrt{|p(x)|}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)|} \quad (7.34)$$

come prolungamento nella regione II della funzione

$$\psi_{III}(x) = \frac{C}{\sqrt{|p(x)|}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy p(y)} e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Resta da dimostrare che $C' = -iC$. Chiamiamo questa funzione ψ . Sappiamo che, per il teorema del Wronskiano (vedi Appunti di Meccanica Quantistica I), date due soluzioni dell'equazione di Schrödinger ψ e $\bar{\psi}$ corrispondenti allo stesso autovalore, risulta che il loro Wronskiano è costante:

$$W(x) = \psi \bar{\psi}' - \bar{\psi} \psi' = -(\bar{\psi})^2 \left(\frac{\psi}{\bar{\psi}} \right)' = \text{costante}$$

Per questo, se noi individuassimo un'altra funzione $\bar{\psi}$ della quale conosciamo il prolungamento dalla regione III alla regione II potremmo ottenere la relazione tra C e C' imponendo che il Wronskiano delle due funzioni

abbia lo stesso valore nelle due regioni. Questa funzione ausiliaria ci è fornita dalle relazioni di raccordo (7.19) e (7.20). Sappiamo, infatti, che la funzione

$$\bar{\psi}_{III}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \cos \left[\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy p(y) + \frac{\pi}{4} \right]$$

prende nella regione II la forma

$$\bar{\psi}_{II}(x) = \frac{1}{2\sqrt{|p(x)|}} \exp \left\{ -\frac{1}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| \right\}.$$

Il Wronskiano di ψ e $\bar{\psi}$ nella regione II è dato da

$$W_{II}(x) = -(\bar{\psi})^2 \frac{d}{dx} \left(\frac{\psi}{\bar{\psi}} \right) = -\frac{1}{4|p(x)|} e^{-\frac{2}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)|} \frac{d}{dx} \left[C' 2 e^{\frac{2}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)|} \right] = \frac{C'}{\hbar}$$

mentre il suo valore nella regione III è dato da

$$\begin{aligned} W_{III}(x) &= (\psi)^2 \frac{d}{dx} \left(\frac{\bar{\psi}}{\psi} \right) = \frac{C^2}{|p(x)|} e^{-2[\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| + i\frac{\pi}{4}]} \frac{d}{dx} \left[\frac{e^{\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| + i\frac{\pi}{4}} + e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| - i\frac{\pi}{4}}}{2C e^{-\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| - i\frac{\pi}{4}}} \right] = \\ &= \frac{C}{2|p(x)|} e^{-2[\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| + i\frac{\pi}{4}]} \frac{d}{dx} \left[e^{2\frac{i}{\hbar} \int_x^b dy |p(y)| + i\frac{\pi}{2}} + 1 \right] = \frac{C}{2|p(x)|} \left(-\frac{2i|p(x)|}{\hbar} \right) = -i\frac{C}{\hbar} \end{aligned}$$

Dalla costanza del Wronskiano si ottiene il risultato preannunciato $C' = -iC$.

7.4.1 Esercizi

Valutare la probabilità di attraversamento di una barriera in approssimazione WKB mediante la (7.33)

$$T = e^{-\frac{2}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dy |p(y)|}. \quad (7.35)$$

nei casi seguenti.

1. Barriera triangolare.

Consideriamo la barriera costituita dal potenziale

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \left(1 - \frac{|x|}{a} \right) & \text{se } x < |a| \\ 0 & \text{se } x > |a| \end{cases}$$

Con riferimento alla figura 7.9 i punti di inversione del moto classico sono dati da $\pm \bar{x}$ dove

$$V(\bar{x}) = E \quad \Rightarrow \quad \bar{x} = a \left(1 - \frac{E}{V_0} \right)$$

Data la simmetria del potenziale

$$\ln T = -\frac{4}{\hbar} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{2mV_0} \sqrt{\left(1 - \frac{x}{a} \right) - \frac{E}{V_0}} = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{\frac{\bar{x}}{a} - \frac{x}{a}}$$

Con la sostituzione $y = \frac{\bar{x}}{a} - \frac{x}{a}$ si ottiene

$$\ln T = -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\frac{\bar{x}}{a}} dy \sqrt{y} = -\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \frac{2}{3} \left(\frac{\bar{x}}{a} \right)^{\frac{3}{2}} = -\frac{8}{3} \frac{a\sqrt{2m}}{\hbar V_0} (V_0 - E)^{\frac{3}{2}}.$$

La probabilità di trasmissione al di là della barriera è, in definitiva,

$$T = e^{-\frac{8}{3} \frac{a\sqrt{2m}}{\hbar V_0} (V_0 - E)^{\frac{3}{2}}}.$$

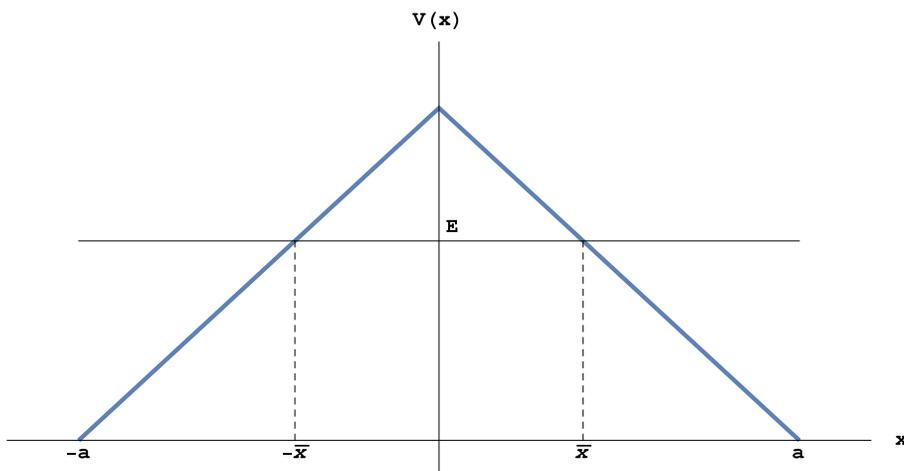


Figura 7.9: Attraversamento di una barriera di potenziale triangolare.

2. Barriera parabolica.

Consideriamo la barriera costituita dal potenziale

$$V(x) = \begin{cases} V_0 \left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right) & \text{se } x < |a| \\ 0 & \text{se } x > |a| \end{cases}$$

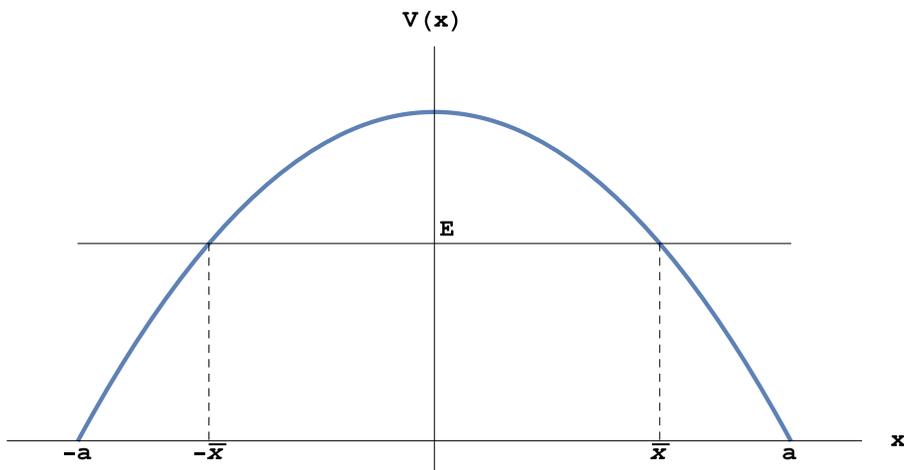


Figura 7.10: Attraversamento di una barriera di potenziale parabolica.

Con riferimento alla figura 7.10 i punti di inversione del moto classico sono dati da $\pm\bar{x}$ dove

$$V(\bar{x}) = E \quad \Rightarrow \quad \bar{x} = a\sqrt{1 - \frac{E}{V_0}}$$

Data la simmetria del potenziale

$$\begin{aligned} \ln T &= -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{\left(1 - \frac{x^2}{a^2}\right) - \frac{E}{V_0}} = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{\frac{\bar{x}^2}{a^2} - \frac{x^2}{a^2}} = \\ &= -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \frac{\bar{x}}{a} \int_0^{\bar{x}} dx \sqrt{1 - \frac{x^2}{\bar{x}^2}} \end{aligned}$$

Con la sostituzione $x = \bar{x} \sin \theta$ si ottiene

$$\ln T = -\frac{4}{\hbar} \sqrt{2mV_0} \frac{\bar{x}^2}{a} \int_0^1 d\theta \cos^2 \theta = -\frac{a\pi}{\hbar\sqrt{2mV_0}} p_E^2$$

dove $p_E = \sqrt{2m(V_0 - E)}$ è l'impulso corrispondente ad un potenziale costante pari a V_0 . La probabilità di trasmissione al di là della barriera è

$$T = e^{-\frac{a\pi}{\hbar\sqrt{2mV_0}} p_E^2}.$$

7.4.2 Applicazione al decadimento α

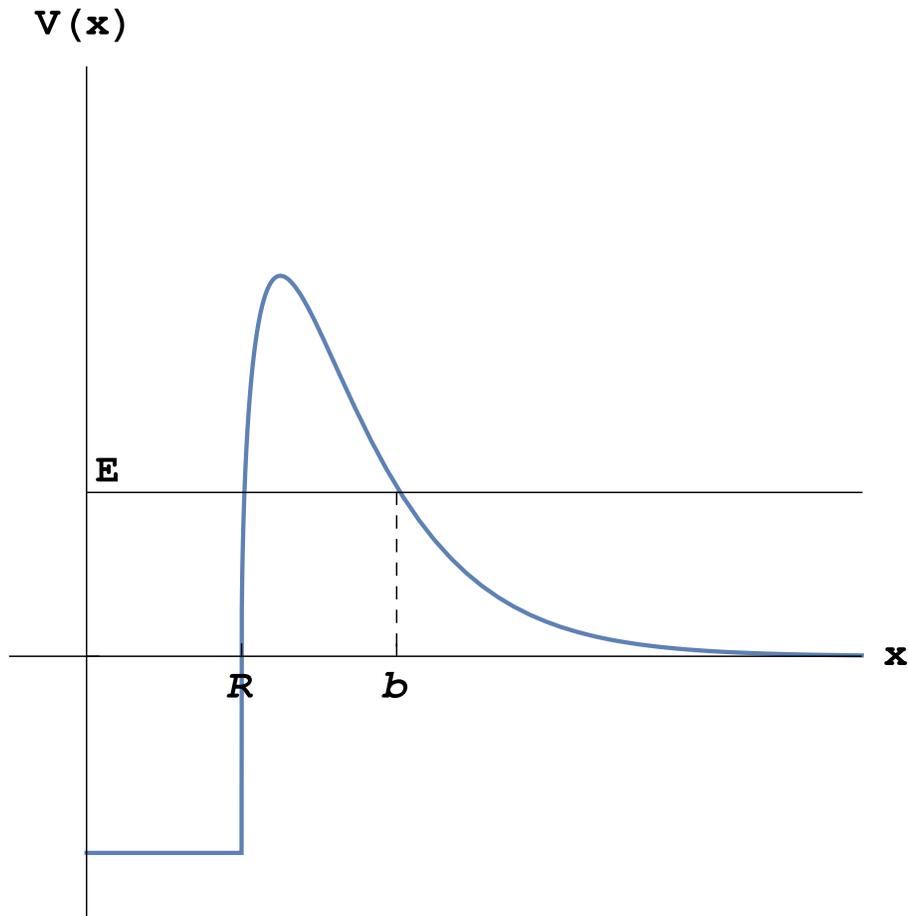


Figura 7.11: Barriera coulombiana vista dalle particelle α in un nucleo radioattivo.

L'emissione di particelle α , nuclei di He con $Z = 2$ e $A = 4$ è, insieme ai decadimenti β e γ , una delle forme della radioattività, un fenomeno caratteristico di molti nuclei instabili. In un modello molto semplificato possiamo considerare i nuclei come composti di particelle indipendenti all'interno di una buca di potenziale che simula l'interazione tra ciascuna particella e il resto del nucleo come un campo medio. Il decadimento α può essere visto il passaggio attraverso una barriera prodotta dal potenziale coulombiano di repulsione tra la particella α e il resto dei componenti con carica positiva del nucleo. Perché questo avvenga la particella α deve essere in uno stato di energia positiva, non in uno stato legato.

A questo modello può essere applicata l'approssimazione WKB per calcolare la probabilità di trasmissione T . Con riferimento alla figura 7.11

$$\ln T = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \int_R^b dr \sqrt{\left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{Er} - 1\right)} = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \int_R^b dr \sqrt{\left(\frac{b}{r} - 1\right)}$$

dove $b = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E}$, $Z_1 e = 2e$ è la carica della particella α e $Z_2 e$ la carica del nucleo residuo generato. Sostituendo $x = r/b$ abbiamo:

$$\ln T = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{2mE} \frac{Z_1 Z_2 e^2}{E} \int_{R/b}^1 dx \sqrt{\frac{1-x}{x}}$$

Dalla relazione $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$ e $\hbar c = 197 \text{ MeV fm}$ ricaviamo $e^2 \simeq 1.5 \text{ MeV fm}$; quindi

$$b \simeq \frac{2 \cdot 120 \cdot 1.5}{E} \text{ MeV} \cdot \text{fm} \simeq \frac{360}{E} \text{ MeV} \cdot \text{fm}$$

Tenendo conto del fatto che le particelle α hanno energie tra 4 e 9 MeV e che R è dell'ordine dei fermi:

$$b \simeq 60 \text{ fm} \gg R \quad \Rightarrow \quad \frac{R}{b} \ll 1$$

Con la sostituzione $x = \sin^2 \theta$ ($dx = 2 \sin \theta \cos \theta d\theta$), l'integrale da calcolare diventa

$$\int_{R/b}^1 dx \sqrt{\frac{1-x}{x}} = \int_{\theta_c}^{\frac{\pi}{2}} d\theta 2 \cos^2 \theta = \int_{\theta_c}^{\frac{\pi}{2}} d\theta (1 + \cos 2\theta) = \frac{\pi}{2} - \theta_c - \frac{1}{2} \sin 2\theta_c$$

dove $\sin^2 \theta_c = \frac{R}{b}$. I termini in θ_c sono trascurabili e possiamo approssimare il risultato cercato con

$$\ln T = -\frac{2}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{E}} Z_1 Z_2 e^2 \frac{\pi}{2} = -\frac{2\pi Z_1 Z_2 e^2}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{2E}} = -2\pi \alpha Z_1 Z_2 \frac{c}{v}$$

dove abbiamo indicato con $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ la velocità della particella α quando è molto lontana dal nucleo.

Supponiamo ora che la particella α vada avanti e indietro nella buca con una velocità dello stesso ordine di grandezza di v , essa urterà le pareti con una frequenza dell'ordine di

$$\nu = \frac{v}{2R}.$$

La probabilità di sfuggire dalla buca nell'unità di tempo è data dal numero ν di urti nell'unità di tempo moltiplicato per la probabilità T di trasmissione attraverso la barriera:

$$\frac{\Delta p}{\Delta t} = \nu T.$$

Data la probabilità per unità di tempo λ che un certo evento si verifichi, la probabilità che nell'intervallo di tempo t si verifichino un numero $n(t)$ di tali eventi è data dalla distribuzione di Poisson

$$P(n, t) = \frac{(\lambda t)^n}{n!} e^{-\lambda t}.$$

In media nell'intervallo t si verificano $\langle n(t) \rangle = \lambda t$. Il tempo di vita medio τ corrisponde all'istante in cui il numero medio assume il valore unitario, cioè $\tau = \frac{1}{\lambda}$. Nel nostro caso $\lambda = \nu T$ e il tempo di vita media è dato da

$$\tau = \frac{1}{\nu T} = \frac{2R}{v} e^{2\pi \alpha Z_1 Z_2 \frac{c}{v}}$$

da cui

$$\ln \tau = \ln \frac{2R}{v} + 2\pi \alpha Z_1 Z_2 \frac{c}{v}$$

che fornisce una relazione quasi lineare tra $\ln \tau$ e $\frac{1}{v} \propto \frac{1}{\sqrt{E}}$. Questa previsione teorica descrive abbastanza bene i dati sperimentali su un vasto range di numeri atomici dei nuclei radioattivi, come è possibile vedere in figura 7.12.

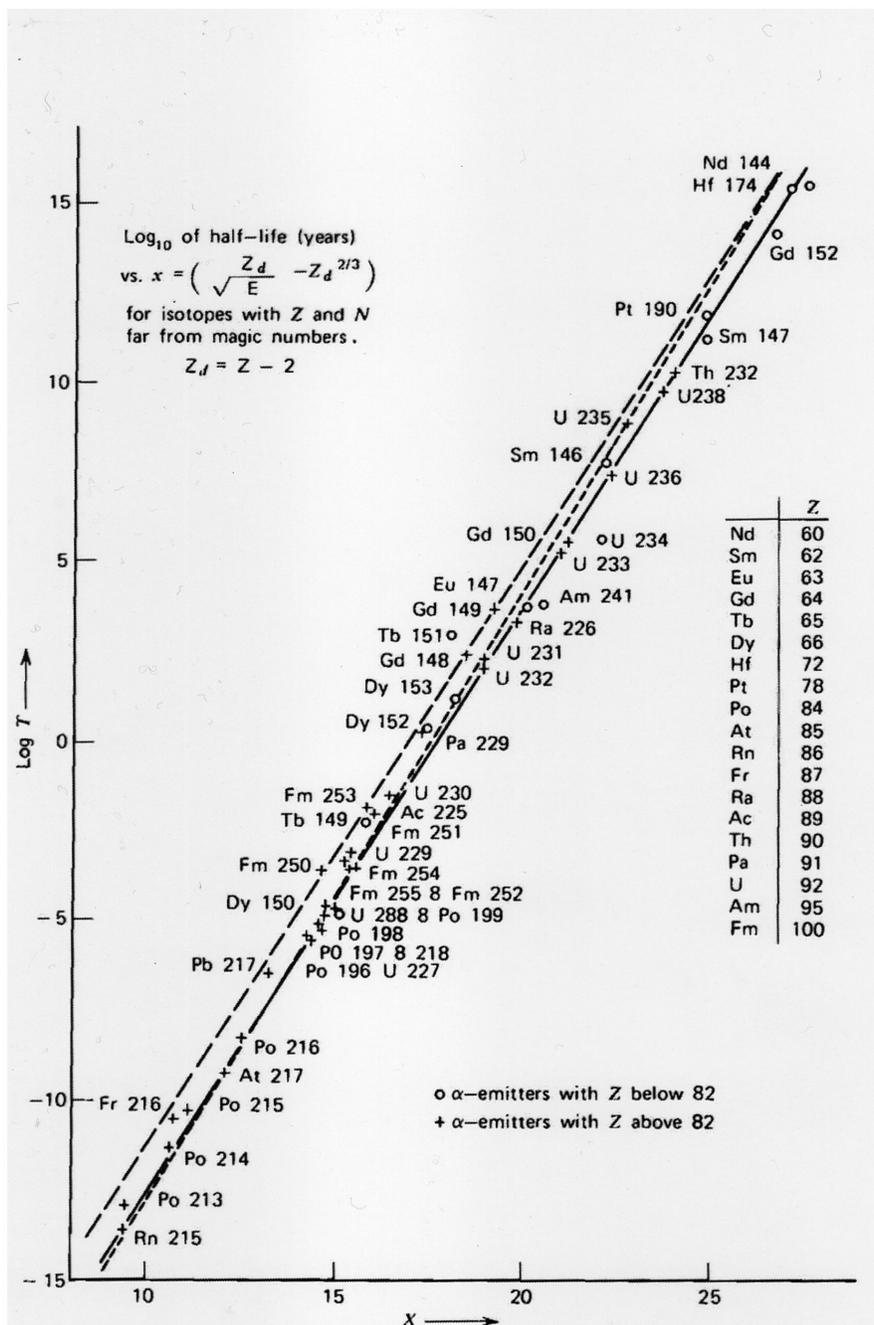


Figura 7.12: Grafico che riporta $\lg_{10} \frac{1}{T}$ in funzione di $C_2 - C_1 \frac{Z_1}{\sqrt{E}}$, dove $C_1 = 1,61$ e $C_2 = 28,9 + 1,6Z_1^{2/3}$ (da [3]).

Capitolo 8

Metodo Variazionale

Bibliografia: La trattazione segue in larga parte il Nardulli [1]. La presentazione del Teorema di Ritz è tratta dal Messiah [2].

8.1 Basi matematiche del Metodo Variazionale

Si tratta di un metodo che si applica ad operatori dotati di spettro discreto e consente di valutare, con buona approssimazione, l'autovalore dello stato fondamentale ed, eventualmente, gli autovalori prossimi ad esso. Considereremo la sua applicazione all'operatore hamiltoniano, anche se il metodo può essere applicato a qualsiasi operatore dotato di spettro discreto.

Dato un ket $|\psi\rangle$, consideriamo il seguente funzionale:

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}$$

Per esso si verifica la seguente proprietà:

Dato un sistema descritto dall'Hamiltoniano \mathcal{H} , per ogni ket $|\psi\rangle$ risulta che il valore E di aspettazione di \mathcal{H} in questo stato è maggiore dell'energia dello stato fondamentale

Infatti (per brevità usiamo solo indici discreti per autovalori e autoket di \mathcal{H}):

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n E_n |\langle E_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle E_n | \psi \rangle|^2} \geq \frac{\sum_n E_0 |\langle E_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle E_n | \psi \rangle|^2} = E_0 \frac{\sum_n |\langle E_n | \psi \rangle|^2}{\sum_n |\langle E_n | \psi \rangle|^2} = E_0. \quad (8.1)$$

Quindi $E[\psi]$ è un maggiorante di E_0 qualsiasi sia $|\psi\rangle$. Ne segue l'algoritmo che consente di valutare un'approssimazione per E_0 :

1. si sceglie opportunamente una classe di ket di prova $|\psi\rangle$ parametrizzata mediante uno o più parametri α, β, \dots :

$$|\psi\rangle = |\psi(\alpha, \beta, \dots)\rangle$$

2. si trova il set di parametri che rende minimo il funzionale

$$\overline{E}_0 = \text{Min}_{\{\alpha, \beta, \dots\}} \frac{\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \geq E_0$$

In questo modo all'interno della classe di ket scelta si trova la migliore approssimazione al livello fondamentale. Dalla (8.1) vediamo che se il set di ket di prova contiene il ket dello stato fondamentale si trova il valore esatto. Il set di ket di prova deve essere scelto in maniera opportuna. Per esempio, se gli stati del set sono ortogonali allo stato fondamentale, dalla (8.1)

$$E[\psi] \geq E_1,$$

troveremo, perciò un'approssimazione al primo stato eccitato. Questo risultato è generalizzato dal **Teorema di Ritz**:

Considerato $E[\psi]$ come funzionale dei ket $|\psi\rangle$, ogni ket che lo rende stazionario è autoket dello spettro discreto di \mathcal{H} e viceversa. L'autovalore corrispondente è il valore stazionario assunto dal funzionale.

Dimostrazione

Dalla definizione del funzionale $E[\psi]$ otteniamo

$$E[\psi] \cdot \langle \psi | \psi \rangle = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle.$$

In presenza di una variazione del ket $|\delta\psi\rangle$ e della corrispondente variazione $\langle \delta\psi |$ del bra, avremo

$$\begin{aligned} \delta E \cdot \langle \psi | \psi \rangle &= \delta[\langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle] - E \cdot \delta \langle \psi | \psi \rangle = \langle \delta\psi | \mathcal{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \mathcal{H} | \delta\psi \rangle - E \langle \delta\psi | \psi \rangle - E \langle \psi | \delta\psi \rangle = \\ &= \langle \delta\psi | \mathcal{H} - E | \psi \rangle + \langle \psi | \mathcal{H} - E | \delta\psi \rangle = 2 \Re \langle \delta\psi | \mathcal{H} - E | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Imponendo la condizione di stazionarietà $\delta E = 0$ otteniamo

$$(\mathcal{H} - E)|\psi\rangle = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \mathcal{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

Come volevasi dimostrare, i ket $|\psi\rangle$ che rendono stazionario $E[\psi]$ sono gli autoket di \mathcal{H} e il valore di E è l'autovalore corrispondente. È evidente che la dimostrazione vale anche in senso inverso. Nel caso dello stato fondamentale il valore stazionario di E è anche il minimo.

A quanto esaminato possiamo aggiungere alcune considerazioni:

1. Sia $|\psi_0\rangle$ un ket per il quale si verifica $\delta E[\psi_0] = 0$ e sia invece $|\bar{\psi}\rangle$ quello trovato limitando la variazione all'interno di un particolare set dello spazio di Hilbert. Lo scarto tra i due valori è

$$E[\bar{\psi}] - E[\psi_0] = \left. \frac{\delta E}{\delta |\psi\rangle} \right|_{|\psi\rangle=|\psi_0\rangle} \left(|\bar{\psi}\rangle - |\psi_0\rangle \right) + O\left(|\bar{\psi}\rangle - |\psi_0\rangle \right)^2 = O\left(|\bar{\psi}\rangle - |\psi_0\rangle \right)^2$$

Quindi l'approssimazione sull'autovalore è di ordine superiore rispetto all'approssimazione sull'autoket.

2. Malgrado ciò, una buona scelta dello spazio dei ket di prova è determinante per ottenere una buona approssimazione. Come abbiamo già detto se i ket di prova hanno proiezione nulla su $|\psi_0\rangle$ staremo calcolando un'approssimazione di scarso significato. Questo, d'altronde, dà un suggerimento su come fare per trovare l'approssimazione agli autovalori dei livelli eccitati.
3. È evidente che quanto abbiamo detto precedentemente per lo stato fondamentale vale anche per gli stati eccitati: se nel set di prova è compreso un autoket, l'applicazione del metodo variazionale consentirà di trovare l'autovalore ad esso corrispondente.
4. Il metodo variazionale approssima bene i livelli vicini a quello fondamentale, la cui presenza è una delle caratteristiche della Meccanica Quantistica. Per questo il metodo variazionale è considerato metodo profondamente quantistico al contrario del metodo WKB che è un metodo semiclassico.
5. Ricordiamo che nella teoria delle perturbazioni al I ordine la valutazione dell'autovalore n -simo è data da $E_n = E_n^0 + E_n^1$. Nel caso dello stato fondamentale

$$E_0 = E_0^0 + E_0^1 = \langle 0^0 | \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1 | 0^0 \rangle.$$

Il metodo Variazionale ci dice anche che il calcolo perturbativo al I ordine sovrastima sempre l'energia dello stato fondamentale, a meno che $|0^0\rangle$ sia anche autoket di \mathcal{H}_1 , nel qual caso il risultato è esatto.

Capitolo 9

Teoria della Diffusione

Bibliografia: Dopo una breve trattazione della diffusione in Meccanica Classica, viene presentata la teoria della diffusione in Meccanica Quantistica, seguendo in larga parte la trattazione di Merzbacher [8].

9.1 Introduzione

Esperimenti di diffusione sono usati per ricavare informazioni sulle interazioni presenti all'interno degli atomi, dei nuclei o dei loro componenti subnucleari. Questi sistemi sono considerati bersagli per fasci di particelle delle quali sono note la natura, la quantità di moto e, in alcuni casi, la polarizzazione. Una volta diffuse le particelle prodotte dall'urto sono rivelate da strumenti che ne misurano l'intensità e l'energia in funzione dell'angolo di diffusione.

Ad esempio, informazioni sulle forze nucleari si possono avere dalla diffusione di nucleoni a varie energie da nuclei, mentre elettroni ad alta energia sono usati per determinare la distribuzione di carica all'interno dei nuclei.

Noi ci limiteremo a studiare la diffusione elastica, cioè senza acquisto o perdita di energia da parte del proiettile. La diffusione viene idealizzata tramite un fascio di particelle che incide lungo l'asse z su un centro diffusore rappresentato da un'energia potenziale $V(r)$ che supporremo centrale e diversa da zero solo in una regione finita di spazio. Quest'ultima limitazione sembra escludere l'interazione coulombiana che ha range infinito, tuttavia, in realtà, per l'effetto di schermo degli elettroni nella materia, anche questo potenziale va a 0 più rapidamente di $\frac{1}{r}$.

Dopo la diffusione le particelle sono rivelate a grande distanza dalla regione di interazione da un rivelatore che sottende un angolo solido $d\Omega$ con centro nel diffusore e conta le particelle che arrivano in questo cono. Se I_0 è il numero di particelle per unità di area inviate sul centro diffusore e $I d\Omega$ il numero di esse che viene diffuso nell'angolo solido $d\Omega$, la sezione d'urto differenziale è definita dalla relazione

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{I(\theta, \phi)}{I_0}. \quad (9.1)$$

Essa rappresenta la grandezza dell'area posta perpendicolarmente alla direzione di volo del fascio incidente utile alla diffusione nell'angolo solido unitario attorno alla direzione (θ, ϕ) . La sezione d'urto totale

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega}. \quad (9.2)$$

rappresenta invece l'area totale disponibile alla diffusione in qualsiasi angolo. Queste quantità possono essere misurate sperimentalmente. Compito della Fisica Teorica è quello di prevederle a partire da un modello di potenziale. Prima di esaminare come questo possa essere conseguito in Meccanica Quantistica, riepiloghiamo il procedimento seguito in Meccanica Classica.

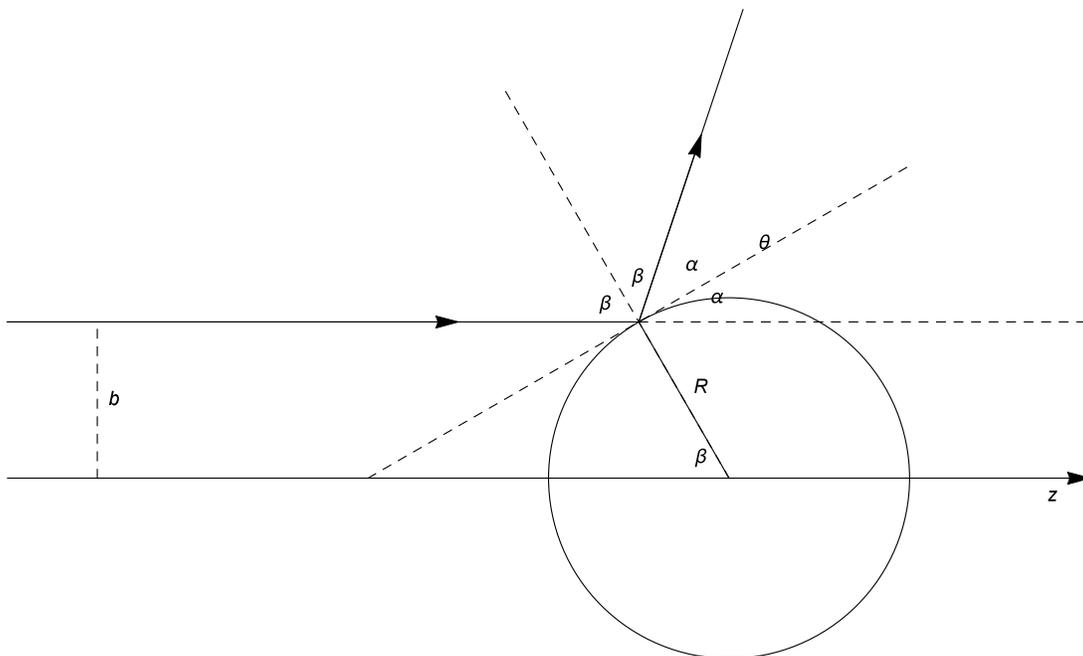


Figura 9.2: Diffusione di una particella da parte di una sfera dura impenetrabile: la particella arriva con parametro d'urto b , l'angolo di deflessione è θ .

- β l'angolo di incidenza rispetto alla normale,
- θ l'angolo di deflessione rispetto alla linea di volo iniziale.

La tangente alla sfera nel punto d'impatto divide l'angolo θ in due angoli uguali, perché entrambi complementari a β , che denominiamo con α :

$$\alpha = \frac{\theta}{2} = \frac{\pi}{2} - \beta$$

Per il parametro d'urto b abbiamo

$$b = R \sin \beta = R \cos \frac{\theta}{2}$$

La sezione d'urto differenziale è, quindi,

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{R \cos \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} \left| R \left(-\frac{1}{2} \sin \frac{\theta}{2} \right) \right| = \frac{R^2}{4}, \quad (9.4)$$

indipendente da θ , e quindi isotropa. La sezione d'urto totale si ottiene integrando su tutto l'angolo solido:

$$\sigma = \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 4\pi \frac{R^2}{4} = \pi R^2, \quad (9.5)$$

risultato, questo, che si poteva facilmente prevedere ricordando il significato geometrico di sezione d'urto.

9.2.2 Diffusione da potenziale coulombiano

Utilizzando le coordinate del Centro di massa e quella relativa, consideriamo la diffusione di una particella di massa ridotta m e carica $Z_1 e$ da parte di un nucleo di carica $Z_2 e$ nel riferimento del Centro di massa.

L'energia potenziale è

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}.$$

La traiettoria, poiché l'energia totale è positiva, è un'iperbole della quale il Centro di massa occupa uno dei

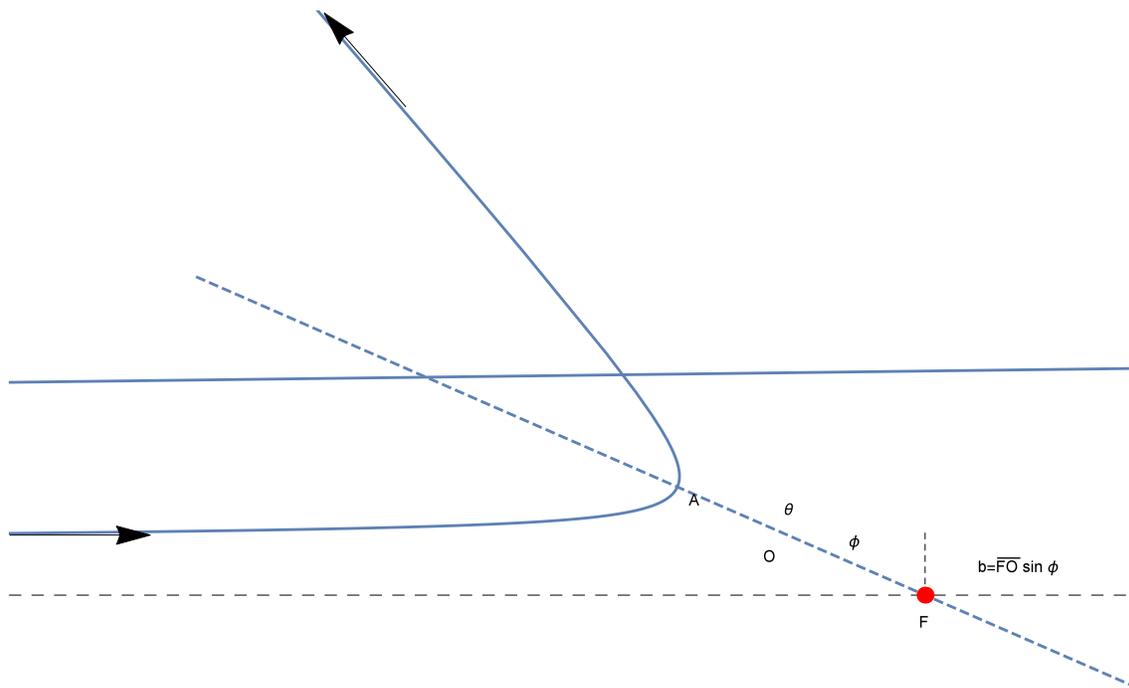


Figura 9.3: Diffusione di una particella da parte del potenziale Coulombiano: F è la posizione del nucleo e coincide con uno dei fuochi della traiettoria iperbolica, la particella arriva con parametro d'urto b , l'angolo di deflessione è θ e A è il perielio.

fuochi.

Con riferimento alla figura 9.3 denotiamo con:

- b il parametro d'urto,
- O il punto d'intersezione tra gli asintoti,
- A la posizione del perielio,
- θ l'angolo di deflessione,
- $\phi = \frac{1}{2}(\pi - \theta)$ è l'angolo tra la direttrice iniziale e la linea passante per O e congiungente A e F , l'asse dell'iperbole,
- v_0 la velocità a grande distanza dal centro diffusore,
- v la velocità nel punto A .

Dalla conservazione del momento angolare abbiamo

$$b v_0 = \overline{FA} v \quad \Rightarrow \quad b^2 = \overline{FA}^2 \frac{v^2}{v_0^2}$$

Dalla conservazione dell'energia

$$\frac{1}{2} m v_0^2 = \frac{1}{2} m v^2 + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{F A}$$

deriva

$$v^2 = v_0^2 - \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{m F A} = v_0^2 \left(1 - \frac{D}{F A}\right) \quad (9.6)$$

dove

$$D = \frac{2Z_1 Z_2 e^2}{m v_0^2} \quad \text{è la distanza minima ottenibile per } b = 0 \text{ quando si annulla anche } v.$$

Combinando le due leggi di conservazione abbiamo:

$$b^2 = \overline{F A}^2 \left(1 - \frac{D}{F A}\right) = \overline{F A}(\overline{F A} - D) \quad (9.7)$$

Ricordiamo che, per calcolare la sezione d'urto, abbiamo bisogno di determinare la relazione tra parametro d'urto e angolo di deflessione θ . Per questo calcoleremo, prima di tutto, $\overline{F A}$ in termini dell'angolo ϕ . L'eccentricità è definita come

$$\epsilon = \frac{\overline{F O}}{\overline{O A}} = \frac{1}{\cos \phi}$$

e, quindi,

$$\overline{F A} = \overline{F O} + \overline{O A} = \overline{F O} \left(1 + \frac{\overline{O A}}{\overline{F O}}\right) = \overline{F O}(1 + \cos \phi).$$

Ma, come si vede nella figura 9.3,

$$b = \overline{F O} \sin \phi$$

e, sostituendo nella espressione precedente, si ottiene

$$\overline{F A} = \frac{b}{\sin \phi} (1 + \cos \phi) = \frac{b}{2 \sin \frac{\phi}{2} \cos \frac{\phi}{2}} 2 \cos^2 \frac{\phi}{2} = b \cot \frac{\phi}{2}.$$

Usando l'espressione per b trovata nella (9.7), si ha

$$\begin{aligned} b^2 &= b \cot \frac{\phi}{2} (b \cot \frac{\phi}{2} - D) \quad \Rightarrow \\ D \cot \frac{\phi}{2} &= b(\cot^2 \frac{\phi}{2} - 1) \quad \Rightarrow \\ D &= b(\cot \frac{\phi}{2} - \tan \frac{\phi}{2}) = 2b \cot \phi \quad \Rightarrow \\ b &= \frac{D}{2 \cot \phi} \end{aligned}$$

Dalla figura notiamo che

$$\phi = \frac{\pi}{2} - \frac{\theta}{2} \quad \Rightarrow \cot \phi = \tan \frac{\theta}{2}$$

pertanto

$$b = \frac{D}{2 \tan \frac{\theta}{2}} = \frac{D}{2} \cot \frac{\theta}{2}.$$

Siamo ora in grado di calcolare la sezione d'urto differenziale utilizzando la (9.3)

$$\begin{aligned} \frac{d\sigma}{d\Omega} &= \frac{b}{\sin \theta} \left| \frac{db}{d\theta} \right| = \frac{D}{2} \frac{\cot \frac{\theta}{2}}{\sin \theta} \frac{D}{2} \left| \frac{d \cot \frac{\theta}{2}}{d\theta} \right| = \\ &= \frac{D^2}{4} \frac{\cot \frac{\theta}{2}}{2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2}} \left| -\frac{1}{2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right| = \frac{D^2}{16} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}} = \\ &= \frac{Z_1^2 Z_2^2 e^4}{16 E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (9.8) \end{aligned}$$

Questa espressione fu derivata per la prima volta da Rutherford nel 1911 e portò alla conferma del suo modello atomico e degli esperimenti condotti negli anni precedenti da Geiger e Marsden in collaborazione con lo stesso Rutherford. Si può notare che la sezione d'urto differenziale:

- dipende solo dal quadrato delle cariche, non distingue tra potenziale attrattivo e repulsivo;
- la distribuzione angolare non dipende dall'energia;
- ad angolo fissato decresce con l'inverso del quadrato dell'energia;
- la probabilità che le particelle proiettile siano diffuse all'indietro è abbastanza grande, incompatibile con il modello "a panettone" di Thomson.

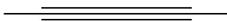
Per trovare la sezione d'urto totale occorre integrare sugli angoli, ma, poiché la singolarità in $\theta = 0$ non è integrabile, essa diverge. Questo comportamento è collegato al range infinito dell'interazione coulombiana.



9.3 La diffusione in Meccanica Quantistica

In Meccanica Quantistica, dato che nella diffusione gli stati rappresentano particelle che possono trovarsi a grande distanza dal centro del potenziale, siamo interessati alla parte continua dello spettro dell'operatore hamiltoniano. Nello studio della parte discreta dello spettro l'aspetto più interessante, sul piano del confronto con i dati sperimentali, è la determinazione degli autovalori, i quali consentono, a loro volta, di ricavare gli spettri di emissione e di assorbimento. Nel caso della diffusione i dati sperimentali riguardano stati con energia fissata (quella del fascio incidente), e le misure riguardano intensità al rivelatore. Come sappiamo, le intensità, essendo misure di probabilità, sono legate alle autofunzioni. Tuttavia, la connessione tra funzioni d'onda e intensità non è così diretta come quella tra spettro degli autovalori e spettro di emissione/assorbimento; per questo lo studio di questa connessione sarà il nostro primo obiettivo.

L'altra questione rilevante, che differenzia la formulazione quantistica della diffusione da quella classica, è collegata alla perdita del concetto di traiettoria. Come abbiamo appena visto, il calcolo delle sezioni d'urto classiche poggia sulla conoscenza dell'equazione della traiettoria. Il comportamento classico può approssimare la realtà solo quando le lunghezze d'onda sono piccole rispetto alla regione di interazione. Al crescere della lunghezza d'onda diventa sempre più importante l'impossibilità di definire contemporaneamente l'impulso (che determina la direzione di moto del fascio) e la posizione (che contribuisce a determinare il parametro d'urto). In particolare, dobbiamo rinunciare a descrivere le particelle con stati di energia e impulso completamente definiti, le onde piane, perché questi stati coprono tutto lo spazio e non consentono di distinguere tra il prima, il durante e il dopo l'interazione. All'opposto, non possiamo usare stati di posizione definita, perché essi non sono adeguati a descrivere un fascio di particelle, essendo energia e impulso completamente indefiniti. Siamo così obbligati a descrivere le particelle incidenti con pacchetti d'onda che costituiscano un compromesso efficace tra l'esigenza di avere energia e direzione di moto ben definita e quella di localizzazione della particella.



9.4 Diffusione di un Pacchetto d'onda

Da un punto di vista formale il moto di una particella è descritto da un Hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}) = \mathcal{H}_0 + V(\vec{r})$$

dove m è la massa ridotta e $V(\vec{r})$ è apprezzabilmente diverso da 0 in una sfera di raggio a intorno all'origine. Al tempo $t = 0$ la particella non ha ancora interagito con il potenziale ed è rappresentata da un pacchetto d'onda

$$\psi(\vec{r}, 0) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\vec{r}-\vec{r}_0)} \quad (9.9)$$

dove $\phi(\vec{k})$ è una funzione "liscia" (con bassa varianza), diversa da 0 solo in una regione ristretta $\Delta \vec{k}$ intorno ad un valore medio \vec{k}_0 . La (9.9) rappresenta, quindi, un pacchetto d'onda con impulso $\hbar\vec{k}$ sufficientemente definito e localizzato intorno a \vec{r}_0 : infatti, se $\vec{r} - \vec{r}_0$ è grande, la funzione integranda è una funzione fortemente oscillante il cui integrale si annulla. Se supponiamo che \vec{k}_0 abbia la stessa direzione di \vec{r}_0 , ma verso opposto, il pacchetto d'onda per $t > 0$ si muoverà verso l'origine. Supponiamo inoltre che \vec{r}_0 sia abbastanza grande rispetto alle dimensioni del pacchetto in modo che ψ sia tutta concentrata a sinistra dell'origine.

Il nostro problema è ora quello di determinare la forma di ψ ad un tempo t successivo, quando ci sarà stata una distorsione del pacchetto dovuta all'interazione del potenziale e il pacchetto sarà arrivato al rivelatore. In linea di principio la risposta è semplice. È sufficiente conoscere al tempo $t = 0$ lo sviluppo di ψ in autofunzioni di \mathcal{H} (stati stazionari):

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int d\vec{k} c(\vec{k}) \psi_{\vec{k}}(\vec{r})$$

per determinare la funzione d'onda al tempo t :

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{k} c(\vec{k}) e^{-\frac{iE(\vec{k})t}{\hbar}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}).$$

Nel nostro caso, però, non abbiamo lo sviluppo di in autofunzioni dell'Hamiltoniano \mathcal{H} , bensì in autofunzioni di \mathcal{H}_0 che sono le onde piane presenti nella (9.9). Dimosteremo, tuttavia, che, sostituendo le onde piane con delle particolari autofunzioni di \mathcal{H} , il pacchetto d'onda resta invariato. Queste autofunzioni sono denominate $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ ed hanno il comportamento asintotico

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_{\vec{k}}(\hat{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \right], \quad (9.10)$$

cioè un comportamento che, oltre alle onde piane, presenta un'onda sferica uscente.

Per ora rimandiamo la dimostrazione di queste due proprietà.

Possiamo dunque scrivere,

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$$

dove abbiamo usato il comportamento asintotico (9.10) e il fatto che, come si è detto, l'onda sferica non contribuisce al pacchetto d'onda iniziale. Questo ci consente di ottenere l'espressione per ψ ad ogni istante successivo:

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0 - i\omega t} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$$

dove abbiamo posto

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

Assumendo ora che il rivelatore sia ad una distanza dell'ordine di r_0 dall'origine, il pacchetto d'onda lo starà attraversando all'istante

$$T \sim 2r_0 \frac{m}{\hbar k_0}.$$

Notiamo che

$$\omega = \frac{\hbar}{2m} k^2 = \frac{\hbar}{2m} \left[k_0^2 + (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \right] = \frac{\hbar}{2m} \left[2\vec{k}_0 \cdot \vec{k} - k_0^2 + (\vec{k} - \vec{k}_0)^2 \right]$$

Faremo ora l'ipotesi ragionevole che il pacchetto d'onda, nel corso della sua evoluzione, abbia mantenuto una dispersione in \vec{k} controllata dalla $\phi(\vec{k})$. L'integrale continuerà a prendere contributi solo da valori di \vec{k} molto vicini a \vec{k}_0 e potremo trascurare nell'espressione precedente il termine $(\vec{k} - \vec{k}_0)^2$. È lecito, quindi, scrivere

$$\psi(\vec{r}, t) = \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_0 + \frac{\hbar}{m} \vec{k}_0 t) + i\hbar \frac{k_0^2 t}{2m}} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}).$$

Quando il pacchetto d'onda transita per la posizione del rivelatore $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ può essere di nuovo sostituita dall'espressione asintotica; questa volta, però, l'onda piana non può più essere trascurata, dato che ora le fasi si sono modificate e il pacchetto d'onda non è più quello iniziale. Avremo, dunque,

$$\psi(\vec{r}, t) \sim \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_0 + \vec{v}_0 t) + i\omega_0 t} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_{\vec{k}}(\hat{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \right].$$

dove abbiamo posto

$$\vec{v}_0 = \frac{\hbar \vec{k}_0}{m} \quad \text{e} \quad \hbar\omega_0 = \frac{1}{2} m v_0^2.$$

Confrontando ora questa espressione con il pacchetto d'onda iniziale (9.9), possiamo scrivere

$$\psi(\vec{r}, t) \sim \psi(\vec{r} - \vec{v}_0 t, 0) e^{i\omega_0 t} + \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{f_{\vec{k}_0}(\hat{r})}{r} e^{i\omega_0 t} \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{i[kr - \vec{k} \cdot (\vec{r}_0 + \vec{v}_0 t)]} \quad (9.11)$$

dove abbiamo fatto l'ulteriore ipotesi che $f_{\vec{k}}(\hat{r})$ non vari molto con \vec{k} nella regione in cui $\phi(\vec{k})$ è diversa da 0. In questa regione accade anche che $\hat{k} \simeq \hat{k}_0$, per cui possiamo porre

$$kr = \vec{k} \cdot \hat{k}_0 r.$$

In definitiva l'espressione per il pacchetto d'onda quando attraversa il rivelatore è data da

$$\psi(\vec{r}, t) \sim \psi(\vec{r} - \vec{v}_0 t, 0) e^{i\omega_0 t} + \frac{f_{\vec{k}_0}(\hat{r})}{r} e^{i\omega_0 t} \psi(r \hat{k}_0 - \vec{v}_0 t, 0) \quad (9.12)$$

A parte il fattore di fase $e^{i\omega_0 t}$, il primo termine rappresenta il pacchetto d'onda iniziale traslato, senza cambiare forma, di $\vec{v}_0 t$, come se il potenziale non avesse influito. Il secondo termine rappresenta un pacchetto d'onda che ricorda ancora il pacchetto d'onda iniziale modulato da un'ampiezza funzione della direzione \hat{r} e attenuato di $\frac{1}{r}$. Il primo termine non viene visto dal rivelatore se esso è posto al di fuori della linea di volo iniziale, mentre il secondo termine, diverso da zero in tutte le direzioni \hat{r} in cui possiamo posizionare il rivelatore, rappresenta la parte del pacchetto d'onda iniziale che è stata diffusa dal potenziale.

La grandezza $f_{\vec{k}_0}(\hat{r})$ è detta **Ampiezza di scattering**. L'Ampiezza di scattering potrebbe dipendere fortemente dall'energia. In questi casi le componenti d'impulso, la cui sovrapposizione genera il pacchetto d'onda, sono diffuse in maniera diversa; questo genera una forte distorsione del pacchetto e toglie validità alle approssimazioni usate. Si parla, in questo caso, di fenomeni di **risonanza**, per i quali si rende necessaria una trattazione particolare.

Determiniamo ora la sezione d'urto. La probabilità di osservare una particella diffusa nel volume dV è data da

$$\frac{|f_{\vec{k}_0}(\hat{r})|^2}{r^2} |\psi(r \hat{k}_0 - \vec{v}_0 t, 0)|^2 dV$$

Se vogliamo la probabilità di passaggio attraverso un rivelatore che copre l'angolo solido $d\Omega$ dovremo porre $dV = r^2 dr d\Omega$. La probabilità di passaggio attraverso il rivelatore nell'unità di tempo è la probabilità che la particella si trovi nel volume infinitesimo con $dr = v_0 dt$. Essa è data da

$$\frac{|f_{\vec{k}_0}(\hat{r})|^2}{r^2} |\psi(r \hat{k}_0 - \vec{v}_0 t, 0)|^2 v_0 r^2 d\Omega dt.$$

La probabilità totale che una particella attraversi il rivelatore è data da

$$v_0 |f_{\vec{k}_0}(\hat{r})|^2 d\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi((r - v_0 t) \hat{k}_0, 0)|^2 dt = |f_{\vec{k}_0}(\hat{r})|^2 d\Omega \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\xi \hat{k}_0, 0)|^2 d\xi.$$

Supponendo che il fascio sia composto da un numero grande N di particelle, il numero di particelle diffuse nell'angolo solido $d\Omega$ è

$$I(\theta, \phi) d\Omega = |f_{\vec{k}_0}(\hat{r})|^2 d\Omega \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_i(\xi \hat{k}_0, 0)|^2 d\xi.$$

D'altra parte, la probabilità che una particella passi attraverso la superficie unitaria posta perpendicolarmente al fascio, è pari alla probabilità che essa si trovi all'istante iniziale nel parallelepipedo di superficie di base unitaria e lunghezza infinita nella direzione di \hat{k}_0 :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(\xi \hat{k}_0, 0)|^2 d\xi.$$

Il numero di particelle incidenti per unità di area è dato, di conseguenza, da

$$I_0 = \sum_{i=1}^N \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi_i(\xi \hat{k}_0, 0)|^2 d\xi.$$

Troviamo, così, il risultato fondamentale

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\hat{k}_0}(\hat{r})|^2 \quad (9.13)$$

che determina la relazione tra sezione d'urto differenziale e ampiezza di scattering in Meccanica Quantistica.

9.5 Funzioni di Green

Per completare la trattazione precedente è necessario dimostrare che

a) esistono le autofunzioni $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ di \mathcal{H} che hanno il comportamento asintotico (9.14)

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f_{\vec{k}}(\hat{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \quad (9.14)$$

b) è corretto sostituire le $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ al posto delle onde piane nel pacchetto d'onda iniziale

$$\psi(\vec{r}, 0) = \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}_0} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$$

Il metodo che utilizziamo è quello delle funzioni di Green, che ha portata molto più generale. Trasformiamo l'equazione di Schrödinger

$$(\nabla^2 + k^2) \psi = U \psi, \text{ dove abbiamo posto } k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad U = \frac{2mV}{\hbar^2}, \quad (9.15)$$

in un'equazione integrale.

Per ottenere questo risultato, consideriamo temporaneamente $U\psi$ come una disomogeneità (solo formalmente, in quanto contiene la funzione ψ). Se introduciamo la funzione di Green $G(\vec{r}, \vec{r}')$ come soluzione dell'equazione

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}, \vec{r}') = -4\pi\delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (9.16)$$

otteniamo che la funzione

$$-\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi(\vec{r}')$$

è, per le proprietà della funzione δ , una soluzione particolare della (9.15). L'integrale generale della (9.15) può essere ottenuto sommando ad essa un integrale generale dell'equazione omogenea associata, che è l'equazione di Schrödinger per una particella libera:

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' G(\vec{r}, \vec{r}') U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}(\vec{r}'). \quad (9.17)$$

Abbiamo ottenuto, come previsto, un'equazione integrale, detta di Lippmann e Schwinger. L'energia E vincola solo il modulo di \vec{k} , quindi, come nel caso della particella libera, abbiamo una degenerazione infinita. Tuttavia, anche se fissiamo il vettore \vec{k} , la soluzione della (9.17) non risulta definita perchè possiamo scegliere come funzione di Green una qualsiasi soluzione dell'equazione (9.16). La scelta della particolare funzione $G(\vec{r}, \vec{r}')$ è legata alle particolari condizioni al contorno da imporre sulle autofunzioni $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Consideriamo, prima di tutto, delle funzioni di Green che soddisfano la condizione

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = G(\vec{r} - \vec{r}')$$

che consentono di semplificare l'equazione (9.16) in

$$(\nabla^2 + k^2) G(\vec{r}) = -4\pi\delta(\vec{r}) \quad (9.18)$$

Introduciamo la rappresentazione di Fourier per la $G(\vec{r})$

$$G(\vec{r}) = \int d\vec{k}' g(\vec{k}') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$$

e per la $\delta(\vec{r})$

$$\delta(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}.$$

Sostituendo entrambe nella (9.18) si ottiene

$$\int d\vec{k}' g(\vec{k}') (-k'^2 + k^2) e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} = -4\pi \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{k}' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}$$

dalla quale risulta

$$g(\vec{k}') = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{k'^2 - k^2}$$

e, tornando alla $G(\vec{r})$,

$$G(\vec{r}) = \frac{1}{2\pi^2} \int d\vec{k}' \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{k'^2 - k^2}.$$

Integrando sugli angoli:

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \frac{1}{2\pi^2} \int dk' k'^2 d\cos\theta d\phi \frac{e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}}}{k'^2 - k^2} = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk' \frac{k'^2}{k'^2 - k^2} \int_{-1}^{+1} d\cos\theta e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}} = \\ &= \frac{1}{\pi} \int_0^\infty dk' \frac{k'^2}{k'^2 - k^2} \frac{1}{ik'r} (e^{ik'r} - e^{-ik'r}) \end{aligned}$$

dove abbiamo integrato su $\cos\theta$ scegliendo \vec{r} parallelo all'asse z (l'integrale è su tutti gli angoli tra \vec{r} e \vec{k}' e, quindi, non dipende dalla direzione di \vec{r}). Proseguiamo nel calcolo della $G(\vec{r})$:

$$\begin{aligned} G(\vec{r}) &= \frac{1}{i\pi r} \int_0^\infty dk' \frac{k'}{k'^2 - k^2} (e^{ik'r} - e^{-ik'r}) = \\ &= \frac{1}{i\pi r} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{k' e^{ik'r}}{k'^2 - k^2} = -\frac{1}{\pi r} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{ik' e^{ik'r}}{k'^2 - k^2} = \\ &= -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{e^{ik'r}}{k'^2 - k^2}. \end{aligned}$$

Questo integrale è privo di significato perchè la funzione integranda ha due poli sull'asse reale in $k' = \pm k$. Possiamo, tuttavia, introdurre un parametro $\eta > 0$ e considerare la funzione

$$G_{+\eta}(r) = -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \int_{-\infty}^\infty dk' \frac{e^{ik'r}}{k'^2 - (k^2 + i\eta)}.$$

Ora si può procedere all'integrazione, perché i poli sono stati spostati fuori dal cammino di integrazione. Ciò fatto considereremo la funzione

$$G_+(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0} G_{+\eta}(r).$$

Il calcolo dell'integrale viene effettuato nel piano complesso di k' (vedi figura 9.4). I poli della funzione

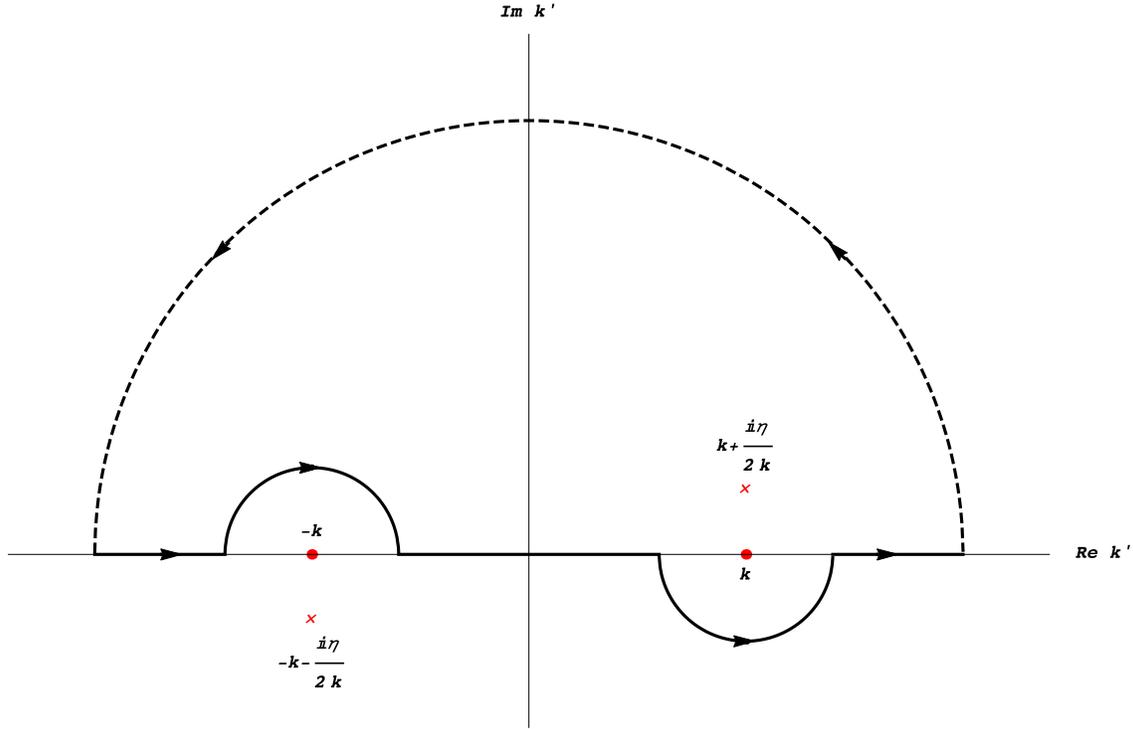


Figura 9.4: Percorso d'integrazione nel piano complesso di k' .

integranda sono in

$$k' = \pm \sqrt{k^2 + i\eta} \simeq \pm \left(k + \frac{i\eta}{2k}\right)$$

e il cammino di integrazione va da $-\infty$ a $+\infty$ sull'asse reale. Fissato $R \in \mathfrak{R}^+$, consideriamo il circuito d'integrazione C che comprende il segmento $[-R, R]$ sull'asse reale ed è chiuso superiormente da un semicerchio di centro nell'origine e raggio R . Nel limite di raggio infinito l'integrale sul semicerchio è nullo, però ci consente di usare il teorema dei residui. Il circuito chiuso di integrazione contiene il polo di destra in $k + \frac{i\eta}{2k}$. L'integrale non varia, inoltre se introduciamo un semicerchio nel semipiano con parte immaginaria negativa e di piccolo raggio intorno al punto $k' = k$, come mostrato in figura, possiamo effettuare il limite per $\eta \rightarrow 0$ prima di integrare:

$$G_+(r) = \lim_{\eta \rightarrow 0} G_{+\eta}(r) = -\frac{1}{\pi r} \frac{d}{dr} \int_C dk' \frac{e^{ik'r}}{k'^2 - k^2}.$$

Per il Teorema dei Residui l'integrale vale $2\pi i \frac{e^{ikr}}{2k}$. Sostituendo abbiamo:

$$G_+(r) = \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Ritornando a $\vec{r} - \vec{r}'$ al posto di \vec{r} :

$$G_+(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^{ik|\vec{r} - \vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (9.19)$$

Procedendo in maniera analoga, ma cambiando $\eta \rightarrow -\eta$, si può ottenere un'altra funzione di Green:

$$G_-(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{e^{-ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|}. \quad (9.20)$$

Si può verificare che effettivamente queste funzioni e le loro combinazioni lineari sono tutte soluzioni dell'equazione (9.16).

Sostituendo le espressioni (9.19) e (9.20) nell'equazione integrale (9.17) abbiamo

$$\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{\pm ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{r}') \quad (9.21)$$

Come avevamo annunciato l'equazione di Schrödinger è stata trasformata in un'equazione integrale. Anche se non si ha una espressione esplicita per le soluzioni, essa è suscettibile di una soluzione iterativa. Possiamo, inoltre, estrarne alcune proprietà. Ad esempio, possiamo ora verificare che $\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r})$ soddisfa le proprietà a) e b).

a) **Andamento asintotico**

Nella (9.21) notiamo che la funzione integranda è diversa da zero solo per $r' < a$ (entro il range del potenziale). Ha senso, quindi, considerare uno sviluppo in serie di potenze per r' nell'esponente

$$k|\vec{r} - \vec{r}'| = k\sqrt{r^2 - 2\vec{r}\vec{r}' + r'^2} = k \left(r - \hat{r} \cdot \vec{r}' + \frac{(\hat{r} \times \vec{r}')^2}{2r} + \dots \right)$$

Se ci poniamo a r grandi, in modo che risulti $\frac{ka^2}{r} \ll 1$, il second'ordine è trascurabile. Inoltre, nella (9.21), possiamo trascurare anche \vec{r}' nel termine $|\vec{r} - \vec{r}'|$ al denominatore, ottenendo

$$\psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{e^{\pm ikr}}{4\pi r} \int d\vec{r}' e^{\mp i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{\pm}(\vec{r}') \quad (9.22)$$

dove abbiamo introdotto il vettore d'onda nella direzione di \vec{r}' (del rivelatore)

$$\vec{k}' = k \hat{r}$$

La (9.22) può risciversi nella forma

$$\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} + \frac{e^{\pm ikr}}{r} f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\hat{r}) \right] \quad (9.23)$$

dove

$$f_{\vec{k}}^{(\pm)}(\hat{r}) = -\frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{4\pi} \int d\vec{r}' e^{\mp i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{r}'). \quad (9.24)$$

La (9.23) mostra che, effettivamente, $\psi^{(+)}$ e $\psi^{(-)}$, quando si considera anche il fattore $\exp(-\frac{iEt}{\hbar})$, contengono un termine di onda sferica entrante e uscente, rispettivamente. La $\psi^{(+)}$ è quella che soddisfa le condizioni al contorno da noi richieste e sarà l'unica che considereremo. Per questo il simbolo (+) per l'ampiezza di scattering $f_{\vec{k}}^{(+)}(\hat{r})$, d'ora in poi, sarà omesso.

b) **Contributo al pacchetto d'onda iniziale**

Resta da dimostrare che possiamo sostituire, nel pacchetto d'onda iniziale, l'onda piana con la $\psi^{(+)}$, cioè che il termine di onda sferica non dà contributo a $t = 0$. Utilizzando la (9.21) questo equivale a dimostrare:

$$\int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_0} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r} - \vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') = 0 \quad (9.25)$$

A tal fine basta dimostrare che l'integrazione su \vec{k} dà risultato nullo:

$$\int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_0 + ik|\vec{r}-\vec{r}'|} \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}') = 0 \quad (9.26)$$

e basta dimostrarlo per $r' < a$. Supponendo sempre di essere lontano da fenomeni di risonanza, possiamo assumere che $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}')$ vari poco con \vec{k} . Inoltre, poichè $\phi(\vec{k})$ è diversa da 0 solo in un intorno di \vec{k}_0 possiamo approssimare:

$$k|\vec{r}-\vec{r}'| \simeq \hat{k}_0 \cdot \vec{k}|\vec{r}-\vec{r}'|$$

e l'integrale (9.26) diventa

$$\psi_{\vec{k}_0}^{(+)}(\vec{r}') \int d\vec{k} \phi(\vec{k}) e^{i\vec{k}\cdot(\hat{k}_0|\vec{r}-\vec{r}'|-\vec{r}_0)} = (2\pi)^{\frac{3}{2}} \psi_{\vec{k}_0}^{(+)}(\vec{r}') \psi(\hat{k}_0|\vec{r}-\vec{r}'|, 0)$$

che è nullo, poichè contiene il pacchetto d'onda iniziale calcolato in un punto che si trova a destra del centro diffusore dove ha ampiezza nulla (ricordiamo che $r' < a$).

9.6 Approssimazione di Born

Abbiamo appena visto che, se particelle con impulso $\hbar\vec{k}$ incidono su un potenziale $V(r)$, la sezione d'urto differenziale è data da

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}}(\hat{r})|^2$$

dove l'ampiezza di scattering $f_{\vec{k}}(\hat{r})$ è definita come

$$f_{\vec{k}}(\hat{r}) = -\frac{(2\pi)^{\frac{3}{2}}}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}'). \quad (9.27)$$

Questa espressione non si può calcolare, anche se si conosce $V(r)$, perchè occorrerebbe la forma esplicita delle $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$. Tuttavia da essa si può ottenere un'approssimazione, se sostituiamo al posto della $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ il primo termine della (9.21)

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{+ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r}'),$$

cioè l'onda piana, ottenendo così:

$$\begin{aligned} f_{\vec{k}}(\hat{r}) &\simeq -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{r}' e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{r}'} V(r') e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'} = \\ &= -\frac{m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' r'^2 V(r') \int_{-1}^{+1} d\cos\theta e^{iqr' \cos\theta} = \\ &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr' r' V(r') \sin qr', \end{aligned} \quad (9.28)$$

dove ci siamo limitati a considerare potenziali centrali, in modo da poter integrare su ϕ e θ , e abbiamo posto $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$. La (9.28) è nota come (prima) **approssimazione di Born**. Essa presenta un'ampiezza di scattering proporzionale all'elemento di matrice del potenziale tra i due stati di particella libera prima e dopo la diffusione e corrisponde alla prima iterazione della (9.17). Vediamo ora sotto quali ipotesi l'approssimazione di Born può essere considerata valida. In questa approssimazione stiamo trascurando il termine della (9.21) contenente l'integrale rispetto all'onda piana. Una stima dell'approssimazione si ha valutando il termine con l'integrale sostituendo alla $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ di nuovo l'onda piana:

$$-\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{+ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} U(\vec{r}') \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}'}.$$

Notiamo, anche, che nella espressione (9.27), che stiamo approssimando, la $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{r})$ prende valori solo dai punti nei quali $V(\vec{r})$ è diverso da zero; possiamo perciò trascurare r :

$$-\frac{1}{4\pi} \int d\vec{r}' \frac{e^{i\vec{k}\vec{r}'}}{r'} U(\vec{r}') \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\vec{k}'\vec{r}'}.$$

Limitandoci ancora al caso di potenziali centrali, possiamo integrare sugli angoli

$$-\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \int_0^\infty dr' r'^2 \frac{e^{ikr'}}{r'} U(r') \frac{\sin kr'}{kr'} = -\frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \frac{2m}{\hbar^2 k} \int_0^\infty dr' e^{ikr'} V(r') \sin kr'$$

che può essere trascurato rispetto all'onda piana solo se

$$\frac{2m}{\hbar^2 k} \left| \int_0^\infty dr' e^{ikr'} V(r') \sin kr' \right| \ll 1$$

Desumiamo che l'approssimazione di Born è affidabile per potenziali deboli ad alte energie del fascio incidente. L'approssimazione di Born consente una rapida stima della sezione d'urto e, per questo motivo, è stata molto popolare tra i fisici atomici e nucleari. Tuttavia, come abbiamo visto, non è possibile neanche valutare la sua accuratezza con precisione. Questo ci indica la necessità di un metodo di calcolo esatto.

9.7 Esercizi sull'approssimazione di Born

9.7.1 Potenziale di Yukawa e potenziale coulombiano

Determinare in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale per la diffusione elastica dal potenziale di Yukawa:

$$V(r) = V_0 \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r}$$

e il potenziale Coulombiano:

$$V(r) = \frac{q_1 q_2}{r}.$$

Soluzione

Applicando la formula (9.28) al caso del potenziale di Yukawa otteniamo

$$\begin{aligned} f_B(q) &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) \frac{e^{-\alpha r}}{\alpha r} r = \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q \alpha} \Im \int_0^\infty dr e^{-\alpha r + iqr} = \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q \alpha} \Im \frac{1}{\alpha - iq} = \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 \alpha} \frac{1}{\alpha^2 + q^2}, \end{aligned}$$

dove $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$. La sezione d'urto è quindi

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2 \alpha} \right)^2 \left(\frac{1}{\alpha^2 + 4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right)^2$$

dove θ è l'angolo tra la direzione d'incidenza e la direzione di diffusione.

Possiamo ottenere i risultati per il potenziale Coulombiano dalle formule precedenti mediante il limite

$$\alpha \rightarrow 0 \quad V_0 \rightarrow 0 \quad \frac{V_0}{\alpha} \rightarrow q_1 q_2$$

Il risultato è

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \frac{q_1^2 q_2^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}} \quad (9.29)$$

dove $E = \hbar^2 k^2 / 2m$ l'energia della particella incidente sul centro di forza. Il risultato coincide con quello classico di Rutherford e con il risultato quantistico esatto (notare che la sezione d'urto non dipende da \hbar).

9.7.2 Potenziale gaussiano

Determinare in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale e totale per la diffusione elastica dal potenziale

$$V(x) = V_0 e^{-\alpha^2 r^2}.$$

Soluzione

Utilizzando la formula (9.28) e la definizione $\vec{q} = \vec{k} - \vec{k}'$, abbiamo

$$\begin{aligned} f_B(q) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) V(r) r = \\ &= -\frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) r e^{-\alpha^2 r^2} = \\ &= -\frac{\sqrt{\pi} m V_0}{2\hbar^2 \alpha^3} e^{-\frac{q^2}{4\alpha^2}}. \end{aligned}$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo usato il risultato (10.47). Tenendo conto del fatto che $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$, la sezione d'urto differenziale è

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_B(q)|^2 = \frac{\pi m^2 V_0^2}{4\hbar^4 \alpha^6} e^{-2\frac{k^2}{\alpha^2} \sin^2 \frac{\theta}{2}}.$$

Calcoliamo infine la sezione d'urto totale.

$$\begin{aligned} \sigma &= \int d\Omega \frac{d\sigma}{d\Omega} = 2\pi \frac{\pi m^2 V_0^2}{4\hbar^4 \alpha^6} \int_{-1}^{+1} d\cos \theta e^{-\frac{k^2}{\alpha^2} (1-\cos \theta)} = \\ &= \frac{\pi^2 m^2 V_0^2}{2\hbar^4 \alpha^4 k^2} \left(1 - e^{-2\frac{k^2}{\alpha^2}}\right) = \\ &= \frac{\pi^2 m V_0^2}{4\hbar^2 \alpha^4 E} \left(1 - e^{-4m\frac{E}{\hbar^2 \alpha^2}}\right), \end{aligned}$$

dove si è introdotta l'energia delle particelle diffuse $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

9.7.3 Scattering da sfera opaca

Determinare in approssimazione di Born la sezione d'urto differenziale e totale per la diffusione elastica dal potenziale:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{se } r \in [0, a], \\ 0 & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Soluzione

Utilizzando la formula (9.28)

$$\begin{aligned}
 f_B(q) &= -\frac{2m}{\hbar^2 q} \int_0^\infty dr \sin(qr) V(r) r = \\
 &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q} \int_0^a dr \sin(qr) r = \\
 &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} \int_0^{qa} dx x \sin x = \\
 &= \frac{2mV_0}{\hbar^2 q^3} [\sin(qa) - qa \cos(qa)] = \\
 &= \frac{2mV_0 a^3}{\hbar^2} \varphi(qa),
 \end{aligned}$$

dove, essendo j_p le funzioni di Bessel sferiche,

$$\varphi(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^3} = \frac{1}{x} j_1(x).$$

La sezione d'urto è quindi

$$\frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \left(\frac{2mV_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 \varphi^2(2ka \sin \frac{\theta}{2})$$

dove θ è l'angolo tra la direzione d'incidenza e la direzione di diffusione.

Studiamo l'andamento della sezione d'urto differenziale. Poiché

$$\begin{aligned}
 \lim_{x \rightarrow 0} \varphi(x) &= \frac{1}{3} \\
 \lim_{x \rightarrow \infty} \varphi(x) &= 0,
 \end{aligned}$$

la sezione d'urto presenta un massimo in $\theta = 0$, oscillazioni smorzate come q^{-2} e zeri nelle soluzioni di $x = \tan x$, con $x = 2ka \sin \frac{\theta}{2}$. Per $ka \ll 1$ si ha scattering isotropo; per $ka \gg 1$, poiché la sezione d'urto va rapidamente a zero, la diffusione avviene essenzialmente in avanti.

Calcoliamo ora la sezione d'urto totale in approssimazione di Born.

$$\begin{aligned}
 \sigma_B &= \int d\Omega \frac{d\sigma_B}{d\Omega} = \\
 &= 2\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 \int_0^\pi d\theta 2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} \varphi^2(2ka \sin \frac{\theta}{2}) = \\
 &= 8\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 \frac{1}{(2ka)^2} \int_0^{2ka} dx x \varphi^2(x) = \\
 &= 8\pi \left(\frac{2mV_0 a^3}{\hbar^2} \right)^2 G(2ka)
 \end{aligned}$$

dove

$$G(y) = \frac{1}{y^2} \int_0^y dx \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^5} = \frac{\cos 2y + 2y \sin 2y + 2y^4 - 2y^2 - 1}{8y^6}$$

Questa funzione tende a un valore costante pari a $1/18$ per $y \rightarrow 0$ ed è monotona decrescente. Il suo andamento è riportato in Fig. 9.5

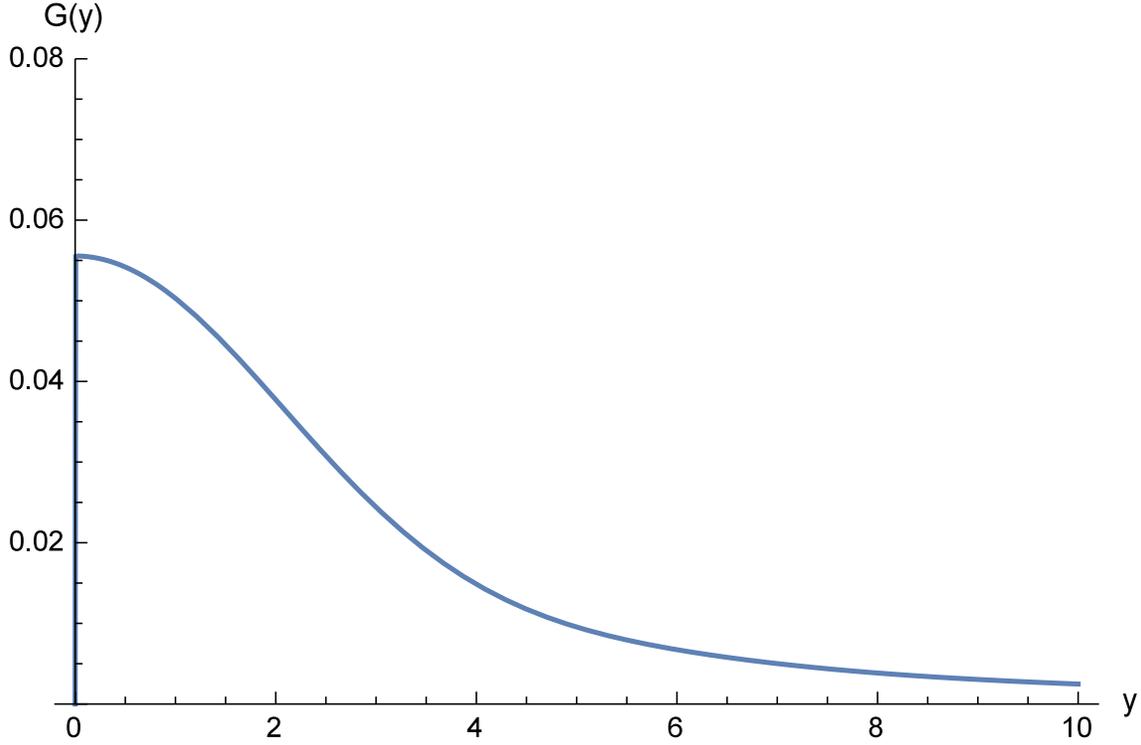


Figura 9.5: Andamento nella variabile $y = 2ka$ della sezione d'urto totale (a parte costanti) in approssimazione di Born per la diffusione da una sfera opaca.

9.8 Onde parziali e sfasamenti

Per una determinazione esatta delle sezioni d'urto è necessario risolvere l'equazione di Schrödinger. Manteniamo l'ipotesi che il potenziale sia centrale. Le soluzioni presentano, in questo caso, simmetria cilindrica intorno alla direzione di incidenza. Se, quindi, scegliamo l'asse z parallelo a \vec{k} , $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ dipende solo da r e da θ .

Ricordiamo che stiamo cercando soluzioni dell'equazione di Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V(r)\psi = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \psi$$

aventi comportamento asintotico

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(r, \theta) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{ikr \cos \theta} + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\theta) \right]. \quad (9.30)$$

Cerchiamo ora la connessione tra queste autofunzioni e le autofunzioni comuni ad \mathcal{H} , L^2 e L_z

$$\psi_{k,\ell,m}(r, \theta, \phi) = \frac{U_{k,\ell}(r)}{r} Y_{\ell,m}(\theta, \phi)$$

dove indichiamo con $U_{k,\ell}$ la soluzione dell'equazione radiale

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{2m}{\hbar^2} V(r) + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - k^2 \right] U_{k,\ell}(r) = 0 \quad (9.31)$$

che soddisfa la condizione

$$\lim_{r \rightarrow 0} U_{k,\ell}(r) = 0.$$

Poiché l'equazione radiale è a coefficienti reali, possiamo fare in modo che lo sia anche $U_{k,\ell}$ (sia la parte reale che la parte immaginaria sono soluzioni della stessa equazione).

Per $r > a$ il potenziale svanisce e l'equazione di Schrödinger diventa l'equazione per una particella libera. Le soluzioni per la funzione

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{U_{k,\ell}(r)}{r}$$

sono le funzioni di Bessel sferiche e l'integrale generale può essere scritto

$$R_{k,\ell}(r) = A_\ell j_\ell(kr) + B_\ell y_\ell(kr) \quad (9.32)$$

dove abbiamo considerato anche la soluzione irregolare nell'origine, dato che si tratta della soluzione nella regione $r > a$.

L'andamento asintotico di questa funzione è dato da

$$R_{k,\ell}(r) = \frac{U_{k,\ell}(r)}{r} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} A_\ell \frac{\sin(kr - \ell\frac{\pi}{2})}{kr} - B_\ell \frac{\cos(kr - \ell\frac{\pi}{2})}{kr}. \quad (9.33)$$

In assenza di potenziale il comportamento nell'origine escluderebbe la soluzione irregolare e comporterebbe $B_\ell = 0$. Quindi il rapporto $\frac{B_\ell}{A_\ell}$ è una misura dell'intensità della diffusione.

Per trovare $\frac{B_\ell}{A_\ell}$ occorre trovare le soluzioni dell'equazione di Schrödinger (9.31) per $r < a$ e raccordarle con le soluzioni per $r > a$ date dalla (9.32). Questo si può fare solo una volta fissato il potenziale $V(r)$. Possiamo, tuttavia, evitare di specificare il potenziale e trattare $\frac{B_\ell}{A_\ell}$ come un parametro e cercare di capire come esso influenza la sezione d'urto.

Poiché stiamo considerando soluzioni reali, B_ℓ e A_ℓ sono reali e possiamo porre

$$\frac{B_\ell}{A_\ell} = -\tan \delta_\ell \quad (9.34)$$

δ_ℓ è detto **sfasamento**; se $V = 0$ ovunque, esso si annulla per ogni ℓ . Il suo nome deriva dal fatto che il comportamento asintotico di $R_{k,\ell}(r)$ si può scrivere come

$$R_{k,\ell}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C_\ell \frac{\sin(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}{kr}. \quad (9.35)$$

Esso misura, quindi, di quanto la fase della funzione radiale, nel comportamento asintotico, differisce, a ℓ fissato, da quello del I termine della 9.33, l'unico presente nel caso di assenza di diffusione. Naturalmente

$$\delta_\ell = \delta_\ell(k).$$

Procediamo a calcolare come ampiezza di scattering e sezione d'urto dipendono da δ_ℓ .

Ricordiamo che, nel caso della particella libera, abbiamo considerato la relazione tra la base delle autofunzioni comuni ad \mathcal{H} e \vec{P} (onde piane) e quelle comuni ad \mathcal{H} , L^2 e L_z (onde sferiche, dette anche onde parziali):

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{\ell=0}^{\infty} i^\ell (2\ell + 1) j_\ell(kr) P_\ell(\cos \theta). \quad (9.36)$$

Come dicevamo, stiamo cercando una relazione simile tra le $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ e le onde parziali relative al potenziale $V(r)$. Scriviamo, dunque, considerando \vec{k} diretto lungo l'asse z e il fatto che per potenziali centrali vi è simmetria per rotazioni intorno a quest'asse,

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)} = \sum_{\ell=0}^{\infty} a_\ell(k) P_\ell(\cos \theta) R_{k,\ell}(r).$$

In termini di δ_ℓ avremo un andamento asintotico dato da:

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}^{(+)} &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{a_\ell(k)}{kr} P_\ell(\cos \theta) \sin(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell) = \\ &= \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{a_\ell(k)}{kr} P_\ell(\cos \theta) \frac{e^{i(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)} - e^{-i(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}}{2i} \end{aligned} \quad (9.37)$$

D'altra parte, nell'andamento asintotico (9.30) possiamo inserire lo sviluppo delle onde piane in onde parziali (9.36):

$$\begin{aligned} \psi_{\vec{k}}^{(+)} &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[\sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell+1) j_{\ell}(kr) P_{\ell}(\cos \theta) + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\theta) \right] = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[\sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{i^{\ell} (2\ell+1) P_{\ell}(\cos \theta)}{kr} \frac{e^{i(kr - \ell \frac{\pi}{2})} - e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2})}}{2i} + \frac{e^{ikr}}{r} f_k(\theta) \right] \end{aligned} \quad (9.38)$$

dove abbiamo tenuto conto anche dell'andamento asintotico delle funzioni di Bessel sferiche (10.30). Ugualgiando ora i coefficienti dei termini contenenti

$$\frac{P_{\ell}(\cos \theta) e^{-i(kr - \ell \frac{\pi}{2})}}{kr}$$

nelle (9.37) e (9.38) otteniamo

$$a_{\ell}(k) = \frac{i^{\ell} (2\ell+1)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\delta_{\ell}}$$

Pertanto l'andamento asintotico (9.37) della $\psi_{\vec{k}}^{(+)}$ può essere riscritto come

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)} \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \sum_{\ell=0}^{\infty} i^{\ell} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \frac{\sin(kr - \ell \frac{\pi}{2} + \delta_{\ell})}{kr} P_{\ell}(\cos \theta), \quad (9.39)$$

che differisce dallo sviluppo di un'onda piana (9.36) solo per la presenza di δ_{ℓ} e viene, per questo motivo, chiamata onda piana distorta.

Confrontando, invece, i coefficienti di e^{ikr} presenti nella (9.37) e nella (9.38) otteniamo:

$$f_k(\theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \frac{e^{2i\delta_{\ell}} - 1}{2ik} P_{\ell}(\cos \theta) \quad (9.40)$$

o, ancora,

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) = \sum_{\ell=0}^{\infty} f_{\ell,k}(\theta) \quad \text{dove } f_{\ell,k} = \frac{1}{k} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta). \quad (9.41)$$

Quest'ultima espressione è molto importante: essa esprime l'ampiezza di scattering come una sovrapposizione di ampiezze relative a onde parziali di ℓ fissato, nella quale ciascuna ampiezza parziale dipende dallo sfasamento ad essa relativo. Sul piano fisico possiamo considerare due situazioni opposte:

- $ka \gg 1$ In questo caso siamo in un regime semiclassico, stiamo considerando, cioè, lunghezze d'onda piccole rispetto alla regione di interazione. Dato che si tratta di potenziali intensi vicino all'origine e che decrescono rapidamente con r , ci aspettiamo, come in analogia con il caso classico, che soltanto le onde parziali con ℓ piccolo, cioè parametro d'urto $b = \frac{\ell \hbar}{p} = \frac{\ell}{k} < a$, siano diffuse molto intensamente (dando luogo a sfasamenti notevoli) rispetto alle onde con $\ell > ka$, che dovranno essere poco distorte.
- $ka \ll 1$ In questo caso siamo in un regime profondamente quantistico, a bassa energia. Le onde incidenti hanno lunghezza d'onda grande rispetto alla zona d'interazione e, a istante di tempo fissato, la fase varia poco all'interno di tale regione. Come avviene in ottica ondulatoria, si perde ogni direzione privilegiata (direzione in cui varia la fase) e l'ampiezza di scattering diventa indipendente dall'angolo θ . Dalla (9.41), poiché solo P_0 non dipende da θ , si vede che questo avviene solo se $\delta_{\ell} = 0$ per ogni ℓ fuorché per $\ell = 0$. L'unico sfasamento non nullo è dunque δ_0 e, in questo caso, si parla di diffusione isotropa o in pura onda S .

Possiamo, quindi, concludere che l'analisi in onde parziali diventa particolarmente utile se, da considerazioni fisiche, si attendono contributi solo da un numero limitato di momenti angolari.

In generale, quando il potenziale non è conosciuto si cerca di determinare gli sfasamenti in funzione di k in maniera empirica confrontando i dati sperimentali a varie energie con la formula

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}}(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) e^{i\delta_{\ell}} \sin \delta_{\ell} P_{\ell}(\cos \theta) \right|^2. \quad (9.42)$$

Un risultato più semplice si ottiene calcolando la sezione d'urto totale, grazie alle proprietà di ortonormalità dei polinomi di Legendre:

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}. \quad (9.43)$$

La (9.43) si può anche esprimere come $\sigma = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sigma_{\ell}$, dove definiamo

$$\sigma_{\ell} = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \sin^2 \delta_{\ell}. \quad (9.44)$$

Nella sezione d'urto differenziale si ha sovrapposizione coerente di onde parziali (cioè si tiene conto dei termini d'interferenza), mentre nella sezione d'urto totale la sovrapposizione è incoerente.

Confrontando la (9.43) con l'analisi in onde parziali dell'ampiezza di scattering (9.41), troviamo il risultato

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \Im \{f_k(0)\}, \quad (9.45)$$

Che collega la sezione d'urto totale con la parte immaginaria dell'ampiezza di scattering *in avanti* ($\theta = 0$) e viene detto **Teorema Ottico**.

9.9 Determinazione degli sfasamenti.

Per calcolare gli sfasamenti occorre risolvere l'equazione di Schrödinger a ℓ fissato e trovare l'andamento asintotico delle soluzioni. Una volta ottenuta la funzione d'onda all'interno della regione d'interazione e raccordata alle soluzioni esterne (9.32), gli sfasamenti sono espressi in termini delle derivate logaritmiche calcolate sulla frontiera $r = a$:

$$\beta_{\ell} = \frac{a}{R_{\ell}} \frac{dR_{\ell}}{dr} \Big|_{r=a} \quad (9.46)$$

Proprietà. I β_{ℓ} sono funzioni decrescenti dell'energia.

Ricordiamo che il I Corollario del Teorema del Wronskiano (vedi Appunti - parte I) stabilisce che:

Detto y_1 e y_2 due soluzioni dell'equazione

$$y''(x) + [\epsilon - U(x)]y(x) = 0 \quad (9.47)$$

corrispondenti agli autovalori ϵ_1 e ϵ_2 , risulta, per ogni intervallo (a, b) compreso nel dominio di definizione delle soluzioni:

$$W(y_1, y_2) \Big|_a^b = (y_1 y_2' - y_1' y_2) \Big|_a^b = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_a^b dx y_1(x) y_2(x) \quad (9.48)$$

Applichiamo il corollario a due soluzioni dell'equazione radiale (9.31) corrispondenti a due diversi autovalori ϵ_1 e ϵ_2 , ma per un unico fissato valore di ℓ . Ponendo gli estremi dell'intervallo pari a $a = 0$ e $b = a$, si ottiene

$$(U_{k_1, \ell} U'_{k_2, \ell} - U_{k_2, \ell} U'_{k_1, \ell}) \Big|_a = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_0^a dr U_{k_1, \ell} U_{k_2, \ell},$$

dove abbiamo tenuto conto del fatto che $\lim_{r \rightarrow 0} U_{k,\ell}(r) = 0$. Poiché $U_{k,\ell}(r) = r R_{k,\ell}(r)$ e $\epsilon = \frac{2mE}{\hbar^2}$, abbiamo

$$(r^2 R_{k_1,\ell} R'_{k_2,\ell} - r^2 R_{k_2,\ell} R'_{k_1,\ell})|_a = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - E_2) \int_0^a dr r^2 R_{k_1,\ell} R_{k_2,\ell}.$$

Dividendo entrambi i membri di questa relazione per $a R_{k_1,\ell}(a) R_{k_2,\ell}(a)$ si ottiene

$$\beta_\ell(E_2) - \beta_\ell(E_1) = -\frac{2m(E_2 - E_1) \int_0^a dr r^2 R_{k_1,\ell} R_{k_2,\ell}}{\hbar^2 a R_{k_1,\ell}(a) R_{k_2,\ell}(a)}.$$

Sia ora $E_1 = E$ e $E_2 = E + dE$; abbiamo $R_{k_2,\ell} = R_{k,\ell} + \frac{dR_{k,\ell}}{dE} dE + \dots$ e, al I ordine in dE risulta

$$d\beta_\ell = \beta_\ell(E + dE) - \beta_\ell(E) = -\frac{2m dE \int_0^a dr r^2 R_{k,\ell}^2}{\hbar^2 a R_{k,\ell}(a) R_{k,\ell}(a)}.$$

dalla quale si ricava $\frac{d\beta_\ell}{dE} < 0$ e, di conseguenza, la proprietà risulta dimostrata.

Ricordiamo ora che, a parte un fattore costante, nella regione esterna risulta

$$R_{k,\ell}(r) = \cos \delta_\ell j_\ell(kr) - \sin \delta_\ell y_\ell(kr).$$

Da questa relazione possiamo subito calcolare la relazione tra i β_ℓ e gli sfasamenti:

$$\beta_\ell(k) = ka \frac{j'_\ell(ka) \cos \delta_\ell - y'_\ell(ka) \sin \delta_\ell}{j_\ell(ka) \cos \delta_\ell - y_\ell(ka) \sin \delta_\ell}.$$

Questa relazione può essere invertita

$$e^{2i\delta_\ell} = -\frac{j_\ell - iy_\ell}{j_\ell + iy_\ell} \left(1 + ka \frac{\frac{j'_\ell + iy'_\ell}{j_\ell + iy_\ell} - \frac{j'_\ell - iy'_\ell}{j_\ell - iy_\ell}}{\beta_\ell - ka \frac{j'_\ell + iy'_\ell}{j_\ell + iy_\ell}} \right), \quad (9.49)$$

dove si sottintende che tutte le funzioni di Bessel e le loro derivate sono calcolate in ka . La (9.49) consente di calcolare esplicitamente gli sfasamenti, una volta risolta l'equazione di Schrödinger nella regione di interazione e ottenuti i β_ℓ . Per semplificare questa relazione, introduciamo la fase reale ξ_ℓ mediante la relazione

$$e^{2i\xi_\ell} = -\frac{j_\ell - iy_\ell}{j_\ell + iy_\ell}$$

e i parametri reali Δ_ℓ e s_ℓ definiti tramite la relazione

$$ka \frac{j'_\ell + iy'_\ell}{j_\ell + iy_\ell} = \Delta_\ell + is_\ell.$$

Si vede subito che s_ℓ è una quantità definita positiva. Infatti

$$\Delta_\ell + is_\ell = ka \frac{j'_\ell j_\ell + y'_\ell y_\ell + i(j_\ell y'_\ell - j'_\ell y_\ell)}{j_\ell^2 + y_\ell^2}$$

e, utilizzando la proprietà delle funzioni di Bessel

$$j_\ell(z) y'_\ell(z) - j'_\ell(z) y_\ell(z) = \frac{1}{z^2},$$

troviamo

$$s_\ell = \Im\{\Delta_\ell + is_\ell\} = \frac{1}{ka(j_\ell^2 + y_\ell^2)}$$

che è una quantità sicuramente positiva. Introducendo queste definizioni nella (9.49), troviamo

$$e^{2i(\delta_\ell - \xi_\ell)} = \frac{\beta_\ell - \Delta_\ell + i s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell}. \quad (9.50)$$

Dalla (9.50) possiamo anche dimostrare che

$$e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell = e^{2i\xi_\ell} \left[\frac{s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell} + e^{-i\xi_\ell} \sin \xi_\ell \right]. \quad (9.51)$$

Dimostrazione Tenendo conto della (9.50), possiamo scrivere

$$e^{2i\delta_\ell} = e^{2i\xi_\ell} \frac{\beta_\ell - \Delta_\ell + i s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell},$$

per cui, per successivi passaggi,

$$\begin{aligned} \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2i} &= \frac{1}{2i} \left[e^{2i\xi_\ell} \frac{\beta_\ell - \Delta_\ell + i s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell} - 1 \right]. \\ e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell &= \frac{e^{2i\xi_\ell}}{2i} \left[\frac{\beta_\ell - \Delta_\ell + i s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell} - e^{-2i\xi_\ell} - 1 + 1 \right] = \\ &= \frac{e^{2i\xi_\ell}}{2i} \left[\frac{2i s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell} + e^{-i\xi_\ell} (e^{+i\xi_\ell} - e^{-i\xi_\ell}) \right] = \\ &= e^{2i\xi_\ell} \left[\frac{s_\ell}{\beta_\ell - \Delta_\ell - i s_\ell} + e^{-i\xi_\ell} \sin \xi_\ell \right], \end{aligned}$$

come volevasi dimostrare.

La relazione (9.51), che abbiamo appena dimostrato, è importante perché esprime in termini delle soluzioni calcolate in ka il fattore dipendente dai δ_ℓ presente nello sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di scattering (9.41):

$$f_k(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta).$$

Prima di mostrare un esempio di applicazione di questa formula, approfondiamo il significato dei ξ_ℓ . Dalla (9.50) notiamo che essi coincidono con gli sfasamenti δ_ℓ quando $\beta_\ell \rightarrow \infty$, cioè quando la funzione d'onda si azzera. Ma questo avviene per ogni valore di ℓ quando il potenziale è rappresentato da una *sfera dura* impenetrabile di raggio a . Per questo motivo le fasi ξ_ℓ prendono il nome di **sfasamenti da sfera dura**. Torneremo a parlarne più a lungo alla fine del paragrafo.

Ora vediamo di applicare i risultati trovati al caso di una sfera opaca, cioè una buca di potenziale di raggio a e profondità V_0 .

Calcolo della sezione d'urto per una sfera opaca nel limite di basse energie. Come abbiamo già visto nello studio degli stati legati, la funzione d'onda all'interno della buca è data da

$$R_{k',\ell}(r) = \frac{U_{k',\ell}(r)}{r} = j_\ell(k'r),$$

dove

$$k' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0)}, \quad \text{laddove} \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}.$$

Quindi

$$\beta_\ell = k'a \frac{j'_\ell(k'a)}{j_\ell(k'a)}.$$

Consideriamo il caso $\ell = 0$:

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad \text{e} \quad y_0(z) = -\frac{\cos z}{z}.$$

Troviamo facilmente:

$$\xi_0 = -ka \quad , \quad \Delta_0 = -1 \quad , \quad s_0 = ka \quad \text{e} \quad \beta_0 = k'a \cot k'a - 1.$$

(Si può controllare facilmente che, in effetti, β_0 è una funzione decrescente dell'energia). Sostituendo queste quantità nella relazione (9.51), troviamo l'ampiezza di scattering in onda S:

$$f_0 = e^{i\delta_0} \sin \delta_0 = \frac{e^{-2ika}}{k} \left(\frac{k}{k' \cot k'a - ik} - e^{ika} \sin ka \right)$$

Ricordando che ci si aspetta che l'onda S sia l'unico contributo importante a bassa energia, vediamo cosa accade in questo limite:

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_0 = a \left(\frac{\tan k'_0 a}{k'_0 a} - 1 \right) \quad \text{dove} \quad k'_0 = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}$$

Questa quantità cambiata di segno viene detta, in generale, *lunghezza di diffusione* (scattering length). In questo limite la sezione d'urto totale è data da

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma_0 = \lim_{k \rightarrow 0} \sigma = 4\pi a^2 \left(\frac{\tan k'_0 a}{k'_0 a} - 1 \right)^2$$

9.10 Risonanze e stati metastabili

Il calcolo che abbiamo visto può essere ripetuto per altre onde parziali. Nelle figure 9.6 e 9.7 sono mostrati alcuni risultati relativi sempre alla diffusione da buca quadrata per le prime onde parziali. Si vede che, effettivamente, a bassa energia l'onda P è diffusa meno dell'onda S. Questo vale anche per le altre onde parziali: se non vi è abbastanza energia si sente l'effetto del potenziale centrifugo che allontana le particelle dal centro di interazione.

In generale le sezioni d'urto σ_ℓ tendono a diminuire al crescere dell'energia e del momento angolare. Tuttavia in figura 9.6 possiamo notare che δ_1 cresce molto rapidamente intorno al valore $ka \simeq 0.7$ e, dato che passa per il valore $\frac{3}{2}\pi$, dove $\sin^2 \delta_1 = 1$, la sezione d'urto parziale P assume il suo massimo valore pari a $\frac{12\pi}{k^2}$ (9.44). Questi cambiamenti improvvisi sono dovuti ad una forte dipendenza della derivata logaritmica β_ℓ dall'energia. Supponiamo di approssimare β_ℓ in un piccolo intervallo di energia con l'andamento lineare:

$$\beta_\ell = c + bE.$$

Sostituendo nella (9.50) abbiamo

$$e^{2i(\delta_\ell - \xi_\ell)} \simeq \frac{E - E_0 - i\frac{\Gamma}{2}}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}}. \quad (9.52)$$

dove abbiamo posto

$$E_0 = \frac{\Delta_\ell - c}{b} \quad \text{e} \quad \frac{\Gamma}{2} = -\frac{s_\ell}{b}.$$

Dalla (9.52) ricaviamo

$$\tan(\delta_\ell - \xi_\ell) = \frac{\sin(\delta_\ell - \xi_\ell)}{\cos(\delta_\ell - \xi_\ell)} = \frac{1}{i} \frac{e^{2i(\delta_\ell - \xi_\ell)} - 1}{e^{2i(\delta_\ell - \xi_\ell)} + 1} \simeq \frac{\Gamma}{2(E_0 - E)}. \quad (9.53)$$

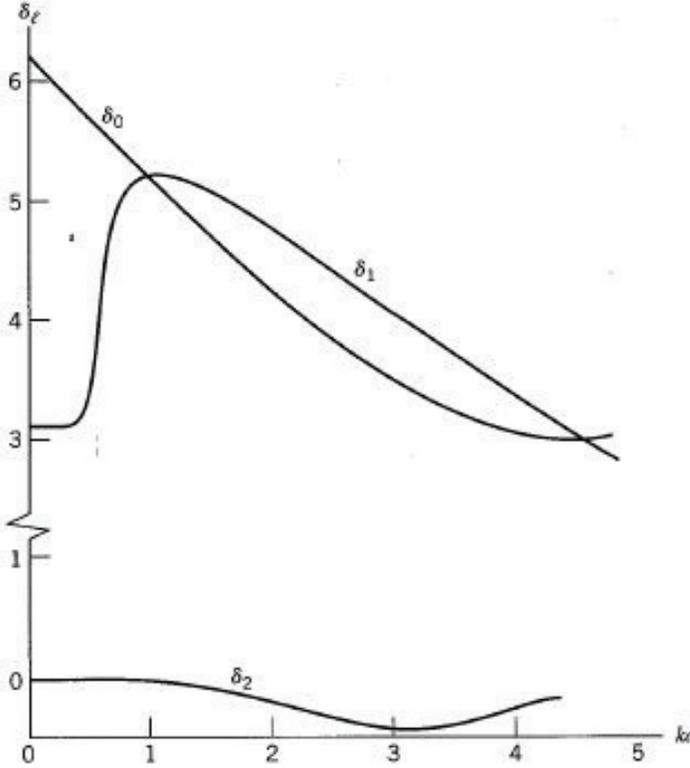


Figura 9.6: Diffusione da buca quadrata di potenziale di raggio a e $k'_0 = 6.2$: gli sfasamenti S, P e D in funzione di ka .

Notiamo che, come abbiamo visto all'inizio del paragrafo, β_ℓ è funzione decrescente dell'energia e quindi $b < 0$, e $s_\ell > 0$. Quindi Γ è una quantità sicuramente positiva.

Supponiamo ora che E_0 e Γ siano ragionevolmente costanti e che l'approssimazione lineare per β_ℓ sia valida in un intervallo di energia grande paragonato a Γ . Dalla (9.53), con l'aiuto della figura 9.8, vediamo che $\delta_\ell - \xi_\ell$ cambia di π passando per E_0 in un intervallo di energia dell'ordine di $[E - \frac{\Gamma}{2}, E + \frac{\Gamma}{2}]$. Se si suppone che lo sfasamento da sfera dura ξ_ℓ , che calcoleremo tra poco, sia quasi costante, è δ_ℓ che varia di π e la sezione d'urto parziale, che è proporzionale a $\sin^2 \delta_\ell$, varia bruscamente. Queste variazioni improvvise degli sfasamenti e delle sezioni d'urto sono dette risonanze. E_0 è l'energia della risonanza e Γ la larghezza (width) della risonanza; la sua grandezza si riflette, infatti, sull'intervallo necessario per produrre la escursione di π per δ_ℓ , e, quindi, sulla larghezza del picco della sezione d'urto.

Dalla (9.51) possiamo ricavare l'ampiezza di scattering parziale in prossimità della risonanza:

$$\begin{aligned} f_{l,k}(\theta) &= \frac{2\ell+1}{k} e^{i\delta_\ell} \sin \delta_\ell P_\ell(\cos \theta) \simeq \\ &\simeq \frac{2\ell+1}{k} e^{2i\xi_\ell} \left(\frac{\frac{\Gamma}{2}}{E_0 - E - i\frac{\Gamma}{2}} + e^{-i\xi_\ell} \sin \xi_\ell \right) P_\ell(\cos \theta) \end{aligned}$$

Notiamo che nell'ampiezza $f_{l,k}$ compare una parte risonante separata nettamente da una parte non risonante che dipende solo dai ξ_ℓ . Un qualsiasi potenziale può essere assimilato ad una sfera dura tutt'al più nel limite semiclassico ad alte energie; se ci troviamo a basse energie e ad alti valori del momento angolare, i ξ_ℓ sono trascurabili ed hanno, come vedremo tra poco, una dipendenza debole dall'energia. La parte risonante predomina, quindi, nella sezione d'urto parziale:

$$\sigma_\ell \simeq \frac{4\pi}{k^2} (2\ell+1) \frac{\Gamma^2}{4(E - E_0)^2 + \Gamma^2} \quad (9.54)$$

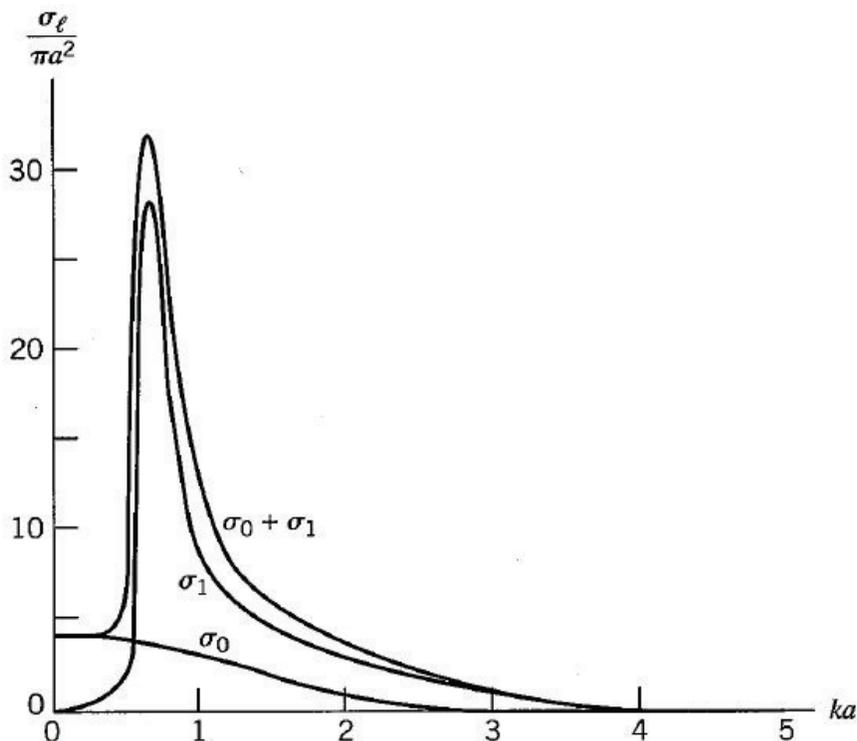


Figura 9.7: Diffusione da buca quadrata di potenziale di raggio a e $k'_0 = 6.2$: dipendenza da ka delle sezioni d'urto in onda S e P e della loro somma

Se Γ è piccolo, la σ_ℓ presenta un massimo accentuato centrato intorno a E_0 e questo si riflette sull'andamento della sezione d'urto totale. La (9.54) prende il nome di **formula di Breit e Wigner**.

Notiamo che i risultati esposti sono stati ricavati in termini dei β_ℓ , le derivate logaritmiche sulla frontiera della regione di interazione. Essi sono quindi indipendenti dal meccanismo particolare che opera in questa regione, che può essere vista, a tutti gli effetti, come una *scatola nera* caratterizzata solo dai valori delle derivate logaritmiche sulla sua superficie. In particolare non è necessario che lo sfasamento derivi da un'interazione con un semplice potenziale, possono essere in gioco meccanismi più complicati.

Una risonanza deriva da una forte interazione all'interno della scatola ad un fissato intervallo di energia, da qualche meccanismo capace di trattenere la particella nella scatola e farla interagire intensamente. Il fatto che noi possiamo trascurare i ξ_ℓ è un altro indice di una grande penetrabilità della regione di diffusione. Tutto questo può avvenire come risultato di interferenze costruttive legate a brusche variazioni del potenziale, come nel caso della buca quadrata; ma può essere dovuto, come avviene in alcune reazioni nucleari, come risultato della interazione di un neutrone lento con tutti i nucleoni che compongono un nucleo complesso e di una successiva riemissione ritardata. In questi casi si generano stati metastabili che, a causa delle proprietà ondulatorie della materia, possono avvenire solo intorno ad energie fissate, le energie della risonanza. A basse energie la sezione d'urto di neutroni su nuclei di alto Z mostra numerosi massimi stretti: essi possono essere visti come il residuo della struttura a livelli discreti esistente per $E < 0$.

9.11 Relazione tra risonanze e stati legati

Introduciamo la **matrice S in onde parziali** definita dalla relazione

$$S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell} \simeq \frac{E - E_0 - i\frac{\Gamma}{2}}{E - E_0 + i\frac{\Gamma}{2}}, \quad (9.55)$$

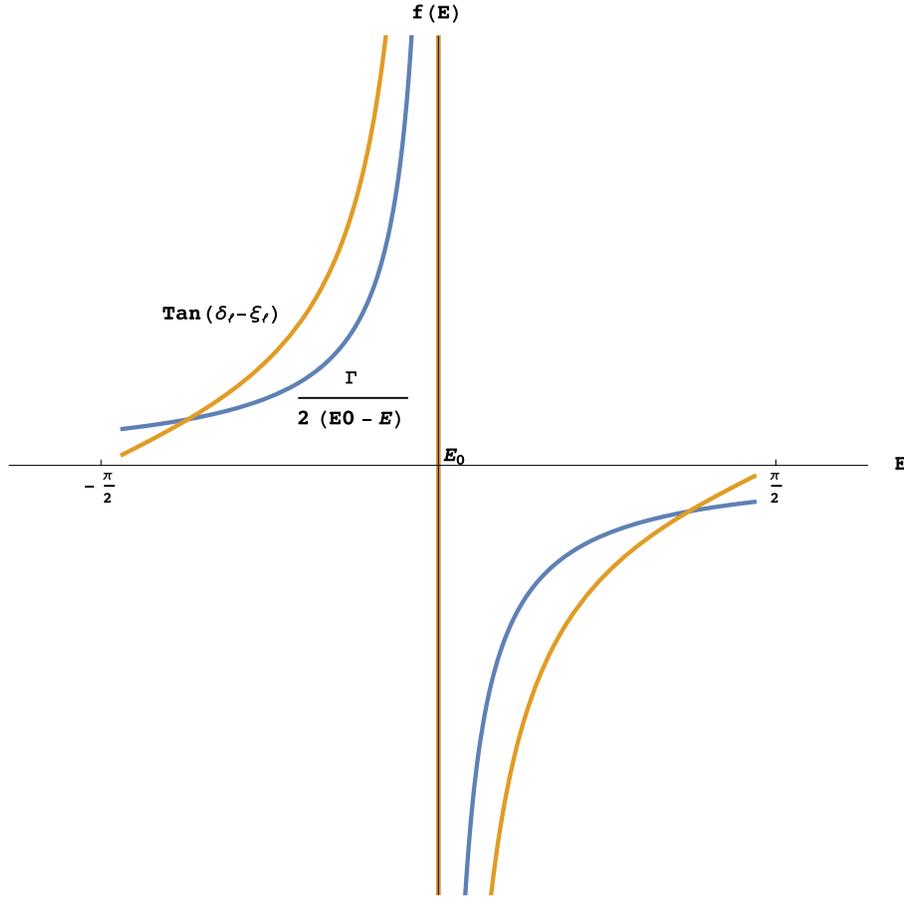


Figura 9.8: La funzione tangente confrontata con $\frac{\Gamma}{2(E_0 - E)}$ con le opportune traslazioni e cambiamenti di scala.

dove abbiamo supposto di trovarci in prossimità di una risonanza e abbiamo trascurato il contributo dei ξ_ℓ . Come funzione dell'energia essa presenta un polo in corrispondenza del punto

$$E = E_0 - i\frac{\Gamma}{2} \quad (9.56)$$

Associato a tale polo, la matrice S_ℓ presenta una singolarità anche nella variabile k . Infatti

$$k^2 = k_0^2 - i\frac{\Gamma m}{\hbar^2} \Rightarrow k = \sqrt{k_0^2 - i\frac{\Gamma m}{\hbar^2}} \simeq k_0 - i\frac{\Gamma m}{2\hbar^2 k_0} = k_0 - i\frac{\Gamma}{2\hbar v_0}$$

In generale la quantità $\frac{\Gamma}{2\hbar v_0}$ è piccola rispetto a k_0 e i poli corrispondenti alle risonanze sono situati, nel piano complesso k , in prossimità dell'asse reale.

Quando abbiamo introdotto gli sfasamenti abbiamo visto che, in termini di essi, l'andamento asintotico della funzione radiale è dato da (9.35)

$$\begin{aligned} R_{k,\ell}(r) &\underset{r \rightarrow \infty}{\sim} C_\ell \frac{\sin(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}{kr} = \\ &= C_\ell \frac{e^{i(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)} - e^{-i(kr - \ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}}{2ikr} = \\ &= A \frac{e^{ikr}}{r} + B \frac{e^{-ikr}}{r}, \end{aligned} \quad (9.57)$$

con

$$A = C_\ell \frac{e^{\iota(-\ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}}{2ik} \quad \text{e} \quad B = -C_\ell \frac{e^{-\iota(-\ell\frac{\pi}{2} + \delta_\ell)}}{2ik}.$$

Notiamo, a questo punto, che

$$S_\ell(k) = e^{2i\delta_\ell} = -e^{i\ell\pi} \frac{A}{B} = -(-1)^\ell \frac{A}{B}.$$

Nei fenomeni di diffusione si considerano stati di energia positiva e k reali. Nulla ci impedisce di estendere la definizione di S_ℓ anche a k complessi utilizzando la formula precedente. Dovremo, cioè, risolvere l'equazione radiale per k complessi, trovarne l'andamento asintotico e calcolare il rapporto $\frac{A}{B}$.

Ad esempio, i valori immaginari di k corrispondono ad energie negative. Infatti

$$k = i\alpha \quad \text{con} \quad \alpha \in \mathbb{R} \quad \Rightarrow \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 \alpha^2}{2m} < 0.$$

Per questi valori di k la funzione d'onda radiale, come si vede dalla (9.57), si comporta asintoticamente come una sovrapposizione di due esponenziali reali:

$$R_{k,\ell}(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} A \frac{e^{-\alpha r}}{r} + B \frac{e^{\alpha r}}{r}$$

e in generale non è accettabile come funzione d'onda. Sappiamo, però che esistono dei valori di k per i quali essa descrive degli stati legati. Per tali valori accade che

$$B = 0$$

e, quindi,

$$S_\ell = \infty.$$

Possiamo quindi affermare che gli stati legati corrispondono a poli sull'asse immaginario di k . Quindi, sia le risonanze che gli stati legati hanno natura simile, corrispondono a poli della matrice S_ℓ . Tuttavia, da un punto di vista fisico c'è una notevole differenza. Supponiamo, infatti, di considerare uno stato legato con energia E_0 . Sappiamo che la sua evoluzione temporale produce un fattore

$$e^{-\iota \frac{E_0 t}{\hbar}}.$$

Nel caso della risonanza (9.56) al posto E_0 c'è $E_0 - \iota \frac{\Gamma}{2}$ e, quindi, la sua evoluzione temporale è data dal fattore

$$e^{-\iota \frac{E_0 - \iota \frac{\Gamma}{2}}{\hbar} t} = e^{-\iota \frac{E_0}{\hbar} t} e^{-\frac{\Gamma}{2\hbar} t}.$$

Si può intendere la risonanza come uno stato simile ad uno stato legato di energia E_0 , la cui norma, però, diminuisce esponenzialmente con un tempo di vita media

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \tag{9.58}$$

A differenza degli stati legati che restano immutati nel tempo (a parte la fase), le risonanze rappresentano quindi stati metastabili.

Un esempio riguarda un fenomeno che abbiamo già studiato tra le applicazioni del metodo WKB, il decadimento α . In questo processo c'è inizialmente un nucleo instabile; quando la particella α riesce ad attraversare la barriera essa lascia un nucleo con Z e A più bassi, ma, in generale, più stabile. Se immaginiamo il processo inverso abbiamo il nucleo stabile e la particella α che si dirige verso la barriera. Quando riesce ad attraversarla si forma un nuovo nucleo il quale, come sappiamo, è però uno stato metastabile che decadrà di nuovo con il suo tipico tempo di decadimento.

Come abbiamo visto Γ rappresenta l'indeterminazione dell'energia che caratterizza gli stati metastabili. La relazione (9.58) la mette in rapporto con τ , l'indeterminazione sul tempo di vita di questi stati. La relazione ha l'aspetto di un principio di indeterminazione, ma, chiaramente, qui non si tratta della variabile tempo, che in Meccanica Quantistica non relativistica è un parametro e non una variabile dinamica, bensì di un tempo tipico di un particolare processo. Questo principio di indeterminazione non si può tradurre nella frase: "non è possibile misurare contemporaneamente il tempo e l'energia".

Tornando alle risonanze, il tempo τ è l'intervallo di tempo che il pacchetto d'onda trascorre nella zona d'interazione e che produce il picco nella sezione d'urto a causa di un'interazione prolungata. Nel corso di questo intervallo la presenza della particella vicino al centro di diffusione è particolarmente probabile, come avviene per uno stato legato. La differenza è che per lo stato legato questo tempo è infinito, mentre l'energia ha un valore ben definito, per cui uno stato legato rappresenta un caso limite per la relazione (9.58) con $\Gamma = 0$.

9.12 Scattering da sfera dura

Vediamo ora la diffusione quantistica da parte di un potenziale da sfera dura di raggio R

$$V(r) = \begin{cases} 0, & \text{per } r > R; \\ \infty, & \text{per } r < R. \end{cases} \quad (9.59)$$

Abbiamo già visto che la derivata logaritmica sulla sfera diverge e che questo comporta che gli sfasamenti δ_ℓ coincidono con i ξ_ℓ . Ricordiamo che ξ_ℓ è definito dalla relazione

$$e^{2i\xi_\ell} = -\frac{j_\ell - iy_\ell}{j_\ell + iy_\ell}$$

dove le funzioni di Bessel sono calcolate in kR . Con semplici passaggi si ottiene

$$\begin{aligned} \cos 2\xi_\ell + i \sin 2\xi_\ell &= -\frac{(j_\ell - iy_\ell)^2}{j_\ell^2 + y_\ell^2} \\ \cos 2\xi_\ell &= -\frac{j_\ell^2 - y_\ell^2}{j_\ell^2 + y_\ell^2} \\ \sin^2 \xi_\ell &= \frac{1 - \cos 2\xi_\ell}{2} = \frac{j_\ell^2}{j_\ell^2 + y_\ell^2} \end{aligned}$$

che ci consente di calcolare il contributo dell'onda parziale ℓ -sima all'ampiezza di scattering (9.40, 9.41)

$$f_{\ell,k} = (2\ell + 1) \frac{e^{2i\delta_\ell} - 1}{2ik} P_\ell(\cos \theta) = -\frac{1}{ik} (2\ell + 1) \frac{j_\ell(kR)}{j_\ell(kR) + iy_\ell(kR)} P_\ell(\cos \theta)$$

e alla sezione d'urto (9.44)

$$\sigma_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \sin^2 \delta_\ell = \frac{4\pi}{k^2} (2\ell + 1) \frac{j_\ell^2(kR)}{j_\ell^2(kR) + y_\ell^2(kR)}.$$

A bassa energia sappiamo che la sezione d'urto coincide con quella in pura onda S, che si ottengono utilizzando le espressioni (10.22) e (10.26):

$$\begin{aligned} f_{0,k} &= -\frac{1}{ik} \frac{j_0(kR)}{j_0(kR) + iy_0(kR)} = -\frac{R}{ikR} \frac{\sin(kR)}{\sin(kR) - i \cos(kR)} \\ \sigma_0 &= \frac{4\pi}{k^2} \sin^2 \delta_0 = \frac{4\pi}{k^2} \frac{j_0^2(kR)}{j_0^2(kR) + y_0^2(kR)} = \frac{4\pi}{k^2} \frac{\sin^2(kR)}{\sin^2(kR) + \cos^2(kR)}. \end{aligned}$$

Nel limite $k \rightarrow 0$ otteniamo:

$$\lim_{k \rightarrow 0} f_k = \lim_{k \rightarrow 0} f_{0,k} = -R.$$

e

$$\lim_{k \rightarrow 0} \sigma = \lim_{k \rightarrow 0} \sigma_0 = \lim_{k \rightarrow 0} 4\pi R^2.$$

Notiamo che, in questo caso, la *scattering length*

$$a = -\lim_{k \rightarrow 0} f_0$$

coincide proprio con il range R del potenziale.

Trovare il comportamento delle sezioni d'urto **ad alta energia**, cioè per lunghezze d'onda piccole rispetto a R dove ci aspettiamo di ritrovare i risultati classici (9.4 e 9.5), è più complicato. Senza procedere al calcolo, diamo il risultato, ottenuto sfruttando le proprietà asintotiche delle funzioni di Bessel, per la sezione d'urto differenziale

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{4} R^2 \left[1 + \cot^2 \frac{\theta}{2} J_1^2(kR \sin \theta) \right]$$

e la sezione d'urto totale

$$\sigma = \int \frac{d\sigma}{d\Omega} d\Omega \underset{k \rightarrow \infty}{\sim} 2\pi R^2.$$

Per piccole lunghezze d'onda non si trova, dunque, come ci si attendeva, il risultato classico

$$\sigma_{classica} = \pi R^2,$$

ma un valore doppio. Analogamente, come abbiamo visto, la sezione d'urto differenziale classica è data da

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{classica} = \frac{R^2}{4},$$

uguale al solo primo termine di quella quantistica.

Il motivo è che, come sappiamo, il limite classico è quello in cui le lunghezze d'onda diventano abbastanza piccole, in modo di poter considerare costante il potenziale all'interno di una lunghezza d'onda; tuttavia, in questo caso, questo non può mai verificarsi, in quanto il potenziale ha una discontinuità in $r = R$. L'aspetto ondulatorio non può mai essere trascurato e il fenomeno è analogo a quello della diffrazione che si riscontra in ottica. I due termini della sezione d'urto differenziale possono essere interpretati: il primo, come un termine di riflessione isotropa, identico al risultato corpuscolare classico, il secondo, invece, come un termine di diffrazione fortemente anisotropo, dato che, per la caratteristica della funzione di Bessel J_1 , il suo contributo è limitato a piccoli angoli.

9.13 Diffusione da potenziale coulombiano

Visto che il potenziale Coulombiano $V(r) = \frac{q_1 q_2}{r}$ ha un range infinito, molti dei risultati derivati nell'ipotesi di range finito non sono immediatamente applicabili, a meno di una dimostrazione separata. Ad esempio, il concetto stesso di sezione d'urto totale è privo di significato, perché ogni particella incidente, qualsiasi sia il suo "parametro d'urto", viene diffusa e σ diverge. Questo lo si vede anche a partire dell'espressione per $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ trovata in approssimazione di Born.

Di conseguenza, è necessaria una trattazione particolare, risolvendo l'equazione di Schrödinger e verificando se quanto detto per i potenziali a range finito è ancora valido.

Il metodo per risolvere l'equazione di Schrödinger che seguiremo utilizza la proprietà di separabilità dell'equazione in coordinate paraboliche. Esse sono definite da

$$\xi = r + z, \quad \eta = r - z, \quad \phi = \arctan \frac{y}{x}$$

In queste coordinate l'equazione di Schrödinger diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} \right) + \frac{4}{\xi + \eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\xi \eta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \psi(\xi, \eta, \phi) + \frac{2q_1 q_2}{\xi + \eta} \psi(\xi, \eta, \phi) = E \psi(\xi, \eta, \phi) \quad (9.60)$$

Siamo alla ricerca di soluzioni che si prestino alla descrizione di un esperimento di diffusione. Poiché il potenziale è centrale esse non devono dipendere dalla coordinata ϕ , in quanto l'asse z è asse di simmetria, quindi $\psi = \psi(\xi, \eta)$. Tentiamo, inoltre, la separazione delle variabili restanti:

$$\psi(\xi, \eta) = f_1(\xi) f_2(\eta).$$

Sostituendo nella (9.60) si trova, in effetti, che f_1 e f_2 soddisfano le equazioni

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\xi \frac{\partial f_1(\xi)}{\partial \xi} \right) + \frac{k^2}{4} \xi f_1(\xi) - c_1 f_1(\xi) &= 0 \\ \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial f_2(\eta)}{\partial \eta} \right) + \frac{k^2}{4} \eta f_2(\eta) - c_2 f_2(\eta) &= 0 \end{aligned}$$

dove

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{e deve verificarsi che} \quad c_1 + c_2 = \frac{q_1 q_2 m}{\hbar^2}.$$

Imponiamo che le soluzioni abbiano un andamento asintotico del tipo

$$e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}.$$

Poiché

$$e^{ikz} = e^{i\frac{k}{2}(\xi - \eta)}$$

e

$$e^{ikr} = e^{i\frac{k}{2}(\xi + \eta)}$$

è opportuno cercare la soluzione particolare per la prima equazione

$$f_1(\xi) = e^{i\frac{k}{2}\xi},$$

che, effettivamente, è soluzione dell'equazione nella variabile ξ , purché

$$c_1 = i\frac{k}{2}.$$

Questo comporta

$$c_2 = \frac{q_1 q_2 m}{\hbar^2} - i\frac{k}{2},$$

perciò l'equazione per $f_2(\eta)$ diventa

$$\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\eta \frac{\partial f_2(\eta)}{\partial \eta} \right) + \frac{k^2}{4} \eta f_2(\eta) - \left(\frac{q_1 q_2 m}{\hbar^2} - i\frac{k}{2} \right) f_2(\eta) = 0.$$

Il comportamento asintotico richiesto suggerisce la sostituzione

$$f_2(\eta) = e^{-i\frac{k}{2}\eta} g(\eta)$$

che conduce all'equazione per $g(\eta)$

$$\eta \frac{\partial^2 g(\eta)}{\partial \eta^2} + (1 - ik\eta) \frac{\partial g(\eta)}{\partial \eta} + n' k g(\eta) = 0,$$

$$\text{dove} \quad n' = -\frac{q_1 q_2 m}{\hbar^2 k}.$$

Nello studio degli stati legati dell'atomo d'idrogeno abbiamo visto che n' svolge il ruolo di numero quantico principale.

Con un ultimo cambiamento di variabile

$$z = ik\eta$$

otteniamo che l'equazione per $g(\eta)$ è l'equazione Ipergeometrica Confluente:

$$z \frac{\partial^2 g(z)}{\partial z^2} + (1-z) \frac{\partial g(z)}{\partial z} - in' g(z) = 0,$$

la cui soluzione regolare nell'origine è data dalla funzione Ipergeometrica Confluente

$$g(\eta) = {}_1F_1(in'; 1; ik\eta).$$

La funzione Ipergeometrica Confluente ha il comportamento asintotico

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} (-t)^{-\alpha} + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^t (t)^{\alpha - \gamma}$$

Nel nostro caso $t = ik\eta$ è immaginario puro positivo, per cui

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; t) \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} |t|^{-\alpha} e^{i\alpha \frac{\pi}{2}} + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^t |t|^{\alpha - \gamma} e^{i(\alpha - \gamma) \frac{\pi}{2}}.$$

Per $g(\eta)$ otteniamo, pertanto, il comportamento asintotico

$$\begin{aligned} g(\eta) &\underset{\eta \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-n' \frac{\pi}{2}}}{\Gamma(1 - in')} (k\eta)^{-in'} + \frac{e^{i(in'-1) \frac{\pi}{2}}}{\Gamma(in')} e^{ik\eta} (k\eta)^{in'-1} \\ &= \frac{e^{-n' \frac{\pi}{2}}}{\Gamma(1 - in')} e^{-in' \ln(k\eta)} + \frac{n' e^{-n' \frac{\pi}{2}}}{k\eta \Gamma(1 + in')} e^{ik\eta + in' \ln(k\eta)}. \end{aligned}$$

Ricordando che la funzione Γ di Eulero gode delle proprietà

$$\Gamma(1+z) = z\Gamma(z), \quad \Gamma(z^*) = \Gamma^*(z),$$

e introducendo la fase $\sigma_{n'}$ in modo che

$$\Gamma(1 + in') = |\Gamma(1 + in')| e^{i\sigma_{n'}},$$

troviamo

$$g(\eta) \underset{\eta \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-n' \frac{\pi}{2}}}{|\Gamma(1 + in')|} \left[e^{-i(n' \ln(k\eta) - \sigma_{n'})} + \frac{n'}{k\eta} e^{i(k\eta + n' \ln(k\eta) - \sigma_{n'})} \right].$$

In definitiva, la soluzione particolare trovata è data da

$$\psi(\xi, \eta) = e^{i \frac{k}{2} (\xi - \eta)} {}_1F_1(in'; 1; ik\eta).$$

Il suo andamento asintotico, tornando alle variabili r e z , è dato da

$$\psi(\xi, \eta) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} \frac{e^{-n' \frac{\pi}{2}}}{|\Gamma(1 + in')|} \left[e^{i(kz - n' \ln k(r-z) + \sigma_{n'})} + \frac{n'}{k(r-z)} e^{i(kr + n' \ln k(r-z) - \sigma_{n'})} \right] \quad (9.61)$$

Questo andamento asintotico, essendo stato calcolato per grandi $\eta = r - z$, è valido anche per grandi distanze dal centro di diffusione, fuorché nella direzione in avanti, $\theta = 0$.

L'equazione (9.61) chiarisce come non sia possibile, nel caso del potenziale coulombiano, ottenere una soluzione che abbia un andamento asintotico composto da un'onda piana e da un'onda sferica uscente. La causa di ciò risiede nel range infinito, che impedisce all'onda incidente e all'onda diffusa di avere un comportamento da autofunzione di una particella libera.

É interessante, tuttavia, notare che il potenziale coulombiano modifica il comportamento asintotico dei potenziali a corto range introducendo delle fasi aggiuntive nelle onde incidenti e diffuse. Questi termini di fase hanno una dipendenza logaritmica in r e possono essere trascurate. Può essere ripetuta, quindi, l'analisi in termini di pacchetto d'onda riottenendo i risultati validi per i potenziali a corto range. Più precisamente, si può dimostrare che le correzioni logaritmiche alle fasi producono nelle correnti incidente e trasmessa dei termini correttivi in $\frac{1}{r}$, che possono essere trascurati a grande distanza nel calcolo della sezione d'urto. In conclusione, possiamo utilizzare anche in questo caso la relazione (9.13)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}}(\theta)|^2,$$

dove $f_{\vec{k}}(\theta)$ è il fattore che moltiplica l'onda sferica asintotica, una volta normalizzata l'onda incidente, cioè

$$f_{\vec{k}}(\theta) = \frac{n'}{k(1 - \cos \theta)} e^{i(n' \ln k(r-z) - \sigma_{n'})}$$

La sezione d'urto differenziale è

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{n'^2}{k^2(1 - \cos \theta)^2} = \frac{q_1^2 q_2^2}{16E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Abbiamo ritrovato, quindi, lo stesso risultato trovato da Rutherford in Fisica Classica (9.8), che è anche lo stesso che si ottiene in approssimazione di Born.

In coordinate paraboliche la separazione di variabili avviene solo se il potenziale dipende da $\frac{1}{r}$. Se si usano energie in grado di penetrare la struttura nucleare, altre interazioni sono coinvolte ed è necessario tornare alle coordinate sferiche.

Anche per il potenziale coulombiano è possibile l'analisi in onde parziali. Tuttavia essa è di scarsa utilità in quanto, dato il range infinito, lo sviluppo in onde parziali di $f(\theta)$ converge molto lentamente. Quando, però, sono coinvolti, come nelle situazioni prima citate, anche potenziali a corto range, essa ridiventa utile perché la conoscenza dell'ampiezza di scattering per il potenziale coulombiano consente di sottrarla all'ampiezza di scattering totale e lo sviluppo in onde parziali di

$$f_{totale}(\theta) - f_{coulombiana}(\theta)$$

converge molto rapidamente.



Capitolo 10

Appendice

10.1 Coordinate sferiche

La dipendenza del potenziale dal modulo della distanza suggerisce il passaggio dalle coordinate cartesiane $\vec{r} \equiv (x, y, z)$ a quelle sferiche $\vec{r} \equiv (r, \theta, \phi)$, mostrato in figura 10.1.

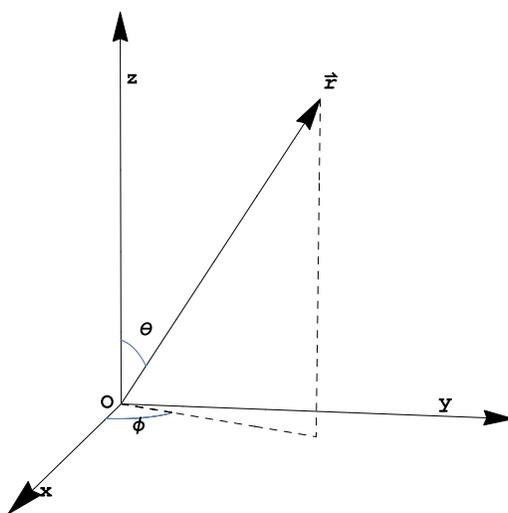


Figura 10.1: Passaggio alle coordinate sferiche.

Le coordinate sferiche si ottengono dalle coordinate cartesiane mediante la trasformazione:

$$\begin{cases} r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} & r \in [0, +\infty[\\ \phi = \arctan \frac{y}{x} & \phi \in [0, 2\pi] \\ \theta = \arctan \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{z} & \theta \in [0, \pi] \end{cases} \quad (10.1)$$

mentre la trasformazione inversa è data da

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \phi \\ y = r \sin \theta \sin \phi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad (10.2)$$

Notare che la trasformazione non è biunivoca, in quanto per i punti dell'asse z l'angolo ϕ è indefinito e per l'origine lo è anche θ . Questo fa in modo di introdurre singolarità spurie nelle equazioni differenziali ottenute dal passaggio alle coordinate sferiche.

Riportiamo alcune formule utili che si ricavano da queste trasformazioni.

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} = \cos \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \cos \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} - \frac{1}{r} \frac{\sin \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial y} = \sin \phi \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \sin \phi \cos \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r} \frac{\cos \phi}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} \\ \frac{\partial}{\partial z} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \end{cases} \quad (10.3)$$

La derivata rispetto ad r si esprime in termini delle coordinate cartesiane nel modo seguente:

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial x}{\partial r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial z}{\partial r} \frac{\partial}{\partial z} = \frac{x}{r} \frac{\partial}{\partial x} + \frac{y}{r} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{z}{r} \frac{\partial}{\partial z}$$

Dalla quale si ottiene l'espressione

$$r \frac{\partial}{\partial r} = x \frac{\partial}{\partial x} + y \frac{\partial}{\partial y} + z \frac{\partial}{\partial z} = \vec{r} \cdot \vec{\nabla} = \frac{i}{\hbar} \vec{r} \cdot \vec{p} \quad (10.4)$$

Infine, l'elemento differenziale di volume in coordinate sferiche si esprime nel modo seguente:

$$d\vec{r} = dx dy dz = \sin \theta d\theta d\phi r^2 dr \quad (10.5)$$

10.2 Armoniche Sferiche

10.2.1 Definizione

$$Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2\ell + 1}{4\pi} \frac{(\ell - |m|)!}{(\ell + |m|)!}} P_{\ell}^m(\cos \theta) e^{im\phi} \quad (10.6)$$

dove P_{ℓ}^m sono le funzioni associate di Legendre definite per $|z| \leq 1$

$$P_{\ell}^m(z) = (-1)^m (1 - z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dz^{|m|}} P_{\ell}(z) \quad (10.7)$$

e $P_{\ell}(z)$ sono i polinomi di Legendre

$$P_{\ell}(z) = (-1)^{\ell} \frac{1}{2^{\ell} \ell!} \frac{d^{\ell}}{dz^{\ell}} (1 - z^2)^{\ell} \quad (10.8)$$

che sono polinomi ortogonali

$$\int_{-1}^{+1} dz P_{\ell}(z) P_{\ell'}(z) = \frac{2}{2\ell + 1} \delta_{\ell, \ell'}. \quad (10.9)$$

Valori particolari dei polinomi di Legendre e delle funzioni associate di Legendre

$$P_{\ell}(\pm 1) = (\pm 1)^{\ell} \quad P_{\ell}^m(\pm 1) = 0 \text{ per } m \neq 0 \quad (10.10)$$

Primi polinomi di Legendre

$$P_0(z) = 1, \quad P_1(z) = z, \quad P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1), \quad (10.11)$$

$$P_3(z) = \frac{1}{2}(5z^3 - 3z), \quad P_4(z) = \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2 + 3) \quad (10.12)$$

subsectionRelazione di ortonormalizzazione

$$\int d\Omega Y_{\ell', m'}^*(\theta, \phi) Y_{\ell, m}(\theta, \phi) = \delta_{\ell, \ell'} \delta_{m, m'} \quad (10.13)$$

10.2.2 Relazione di ricorrenza

$$\cos \theta Y_{\ell,m}(\theta, \phi) = a_{\ell,m} Y_{\ell+1,m}(\theta, \phi) + a_{\ell-1,m} Y_{\ell-1,m}(\theta, \phi) \quad (10.14)$$

dove

$$a_{\ell,m} = \sqrt{\frac{(\ell+1+m)(\ell+1-m)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}} \quad (10.15)$$

10.2.3 Teorema di Somma

Se (Θ, Φ) e (θ', ϕ') sono due direzioni dello spazio e θ è l'angolo compreso tra di esse, un polinomio di Legendre si può esprimere in termini delle armoniche sferiche:

$$P_\ell(\cos \theta) = \frac{4\pi}{2\ell+1} \sum_{m=-\ell}^{+\ell} Y_{\ell,m}(\Theta, \Phi)^* Y_{\ell,m}(\theta', \phi') \quad (10.16)$$

10.2.4 Le prime Armoniche Sferiche

$$Y_{0,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \quad (10.17)$$

$$Y_{1,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\phi} \quad (10.18)$$

$$Y_{2,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1), \quad Y_{2,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta e^{\pm i\phi},$$

$$Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi} \quad (10.19)$$

$$Y_{3,0}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta), \quad Y_{3,\pm 1}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) e^{\pm i\phi}$$

$$Y_{3,\pm 2}(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_{3,\pm 3}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta e^{\pm 3i\phi} \quad (10.20)$$

10.3 Funzioni di Bessel

Le funzioni di Bessel sferiche sono soluzioni dell'equazione di Bessel sferica

$$z^2 \frac{d^2}{dz^2} \phi(z) + 2z \frac{d}{dz} \phi(z) + [z^2 - \ell(\ell+1)] \phi(z) = 0. \quad (10.21)$$

10.3.1 Funzioni di Bessel sferiche di I e II specie

Due integrali linearmente indipendenti sono dati dalle funzioni di Bessel sferiche di prima e seconda specie j_ℓ e $y_\ell = (-1)^{\ell+1} j_{-\ell-1}$. Le prime di esse per valori interi di ℓ sono

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \quad (10.22)$$

$$j_1(z) = \frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z} \quad (10.23)$$

$$j_2(z) = \left(\frac{3}{z^2} - 1 \right) \frac{\sin z}{z} - \frac{3 \cos z}{z^2} \quad (10.24)$$

$$j_3(z) = \left(\frac{15}{z^3} - \frac{6}{z} \right) \frac{\sin z}{z} - \left(\frac{15}{z^2} - 1 \right) \frac{\cos z}{z} \quad (10.25)$$

e

$$y_0(z) = -\frac{\cos z}{z} \quad (10.26)$$

$$y_1(z) = -\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z} \quad (10.27)$$

$$y_2(z) = \left(-\frac{3}{z^2} + 1 \right) \frac{\cos z}{z} - \frac{3 \sin z}{z^2} \quad (10.28)$$

$$y_3(z) = \left(-\frac{15}{z^3} + \frac{6}{z} \right) \frac{\cos z}{z} - \left(\frac{15}{z^2} - 1 \right) \frac{\sin z}{z} \quad (10.29)$$

Il loro andamento asintotico è dato da

$$j_\ell(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} \cos \left(z - \frac{\ell+1}{2} \pi \right) \quad (10.30)$$

e

$$y_\ell(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} \sin \left(z - \frac{\ell+1}{2} \pi \right), \quad (10.31)$$

mentre l'andamento nell'origine è dato da

$$j_\ell(z) \underset{z \rightarrow 0}{\sim} \frac{z^\ell}{(2\ell+1)!!} \quad (10.32)$$

e

$$y_\ell(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} -\frac{(2\ell-1)!!}{z^{\ell+1}}. \quad (10.33)$$

10.3.2 Funzioni di Hankel sferiche

Altre possibili soluzioni linearmente indipendenti dell'equazione di Bessel sferica sono le funzioni di Hankel sferiche di I e II specie definite da

$$h_\ell^{(1)}(z) = j_\ell(z) + iy_\ell(z) \quad (10.34)$$

e

$$h_\ell^{(2)}(z) = j_\ell(z) - iy_\ell(z) \quad (10.35)$$

L'andamento asintotico delle funzioni di Hankel è dato da

$$h_\ell^{(1)}(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} e^{i(z - \frac{\ell+1}{2} \pi)} \quad (10.36)$$

e

$$h_\ell^{(2)}(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{z} e^{-i(z - \frac{\ell+1}{2} \pi)} \quad (10.37)$$

Quando l'argomento è immaginario puro le funzioni di Hankel hanno un comportamento asintotico di tipo esponenziale:

$$h_\ell^{(1)}(iz) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{iz} e^{(-z - i \frac{\ell+1}{2} \pi)} \quad (10.38)$$

e

$$h_\ell^{(2)}(iz) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{iz} e^{(z + i \frac{\ell+1}{2} \pi)} \quad (10.39)$$

10.4 Polinomi di Laguerre

I polinomi di Laguerre sono definiti da:

$$L_n(z) = e^z \frac{d^n}{dz^n} (e^{-z} z^n) \quad (10.40)$$

mentre i polinomi associati di Laguerre da

$$L_n^k(z) = (-1)^k \frac{d^k}{dz^k} L_{n+k}(z). \quad (10.41)$$

Essi soddisfano la seguente relazione di ortonormalizzazione:

$$\int_0^{+\infty} dz e^{-z} z^k L_n^k(z) L_p^k(z) = \frac{[(n+k)!]^3}{n!} \delta_{n,p}. \quad (10.42)$$

10.5 Integrali di uso frequente

10.5.1 Integrali Gaussiani

$$I_0(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (10.43)$$

Per $n = 1, 2, \dots$ si ha

$$I_{2n+1}(\alpha) = 0, \quad I_{2n}(\alpha) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx x^{2n} e^{-ax^2} = (-1)^n \frac{\partial^n}{\partial \alpha^n} \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (10.44)$$

Per i primi valori di n si ottiene

$$I_0 = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}; \quad I_2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^3}}; \quad I_4 = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha^5}}. \quad (10.45)$$

Altro integrale gaussiano di uso frequente è

$$I(\alpha, \beta) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \quad (10.46)$$

che consente anche di calcolare

$$\begin{aligned} I(\alpha, \beta) &= \int_0^{+\infty} dx x \sin(\beta x) e^{-\alpha^2 x^2} = \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx x \frac{e^{i\beta x} - e^{-i\beta x}}{2i} e^{-\alpha^2 x^2} = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{e^{i\beta x} + e^{-i\beta x}}{i} e^{-\alpha^2 x^2} = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[e^{-(\alpha x + i\frac{\beta}{2\alpha})^2} + e^{-(\alpha x - i\frac{\beta}{2\alpha})^2} \right] = \\ &= -\frac{1}{4} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}} 2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} = \\ &= \frac{\sqrt{\pi}\beta}{4\alpha^3} e^{-\frac{\beta^2}{4\alpha^2}} \end{aligned} \quad (10.47)$$

10.5.2 Integrali con funzioni esponenziali

$$\begin{aligned}
 \int_0^{+\infty} dx x^n e^{-x} &= \left[(-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \int_0^{+\infty} dx e^{-\alpha x} \right]_{\alpha=1} = \\
 &= \left[(-1)^n \frac{d^n}{d\alpha^n} \frac{1}{\alpha} \right]_{\alpha=1} = \\
 &= n!
 \end{aligned} \tag{10.48}$$

In maniera analoga si trova il risultato più generale

$$I_n(a, b) = \int_a^b dx x^n e^{-\beta x} = (-1)^n \frac{d^n}{d\beta^n} I_0(a, b) \tag{10.49}$$

Per $a = 0$ e $b = \infty$ si ottiene

$$I_0(0, \infty) = \frac{1}{\beta}; \quad I_1(0, \infty) = -\frac{d}{d\beta} \frac{1}{\beta} = \frac{1}{\beta^2}; \quad I_2(0, \infty) = \frac{d^2}{d\beta^2} \frac{1}{\beta} = \frac{2}{\beta^3} \tag{10.50}$$

Bibliografia

- [1] G. Nardulli. *Meccanica Quantistica*, volume I e II. Franco Angeli Milano, 2001.
- [2] A. Messiah. *Mecanique Quantique*, volume I e II. Dunod Paris, 1962.
- [3] S. Gasiorowicz. *Quantum Physics*. Wiley New York, 1966.
- [4] M. Abramowitz and I. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Dover New York, 1972.
- [5] R. Shankar. *Principles of Quantum Mechanics*. Plenum Press New York, ii edition, 1994.
- [6] L. Landau and E. Lifchitz. *Phys. Theor. vol. III (Mecanique Quantique)*. Mir Moscou, 1974.
- [7] J.J. Sakurai e J. Napolitano. *Meccanica quantistica moderna*. Zanichelli - Bologna, 2014.
- [8] E. Merzbacher. *Quantum Mechanics*. Wiley New York, 1970.