

Algoritmi numerici per lo studio della diffusione da potenziale centrale in meccanica quantistica

Matteo Rossi
Relatore Prof. Enrico Onofri

Laurea Triennale in Fisica
Università degli Studi di Parma

24 luglio 2012

Diffusione da potenziale centrale

Descrizione classica e quantistica della diffusione
Sviluppo in onde parziali e sfasamenti

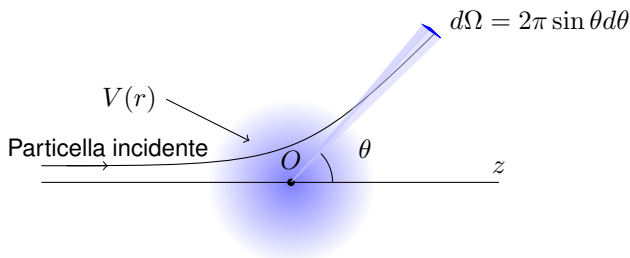
Metodi numerici per la determinazione degli sfasamenti

Soluzione dell'equazione di Schrödinger radiale
Metodo della funzione di fase
Implementazione degli algoritmi

Esempio di applicazione

Determinazione di risonanze

Descrizione classica della diffusione



- ▶ L'urto viene descritto, nel sistema del centro di massa, come l'interazione di una particella (proiettile) di massa ridotta μ con un potenziale costante $V(\mathbf{r})$
- ▶ L'interazione con il potenziale determina una deviazione della traiettoria della particella

Osservabili in un esperimento di scattering

► **Sezione d'urto differenziale:**

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{n}^\circ \text{ particelle diffuse nell'angolo solido } d\Omega \text{ nell'unità di tempo}}{\text{n}^\circ \text{ particelle incidenti per unità di tempo e di area}}$$

► **Sezione d'urto totale:**

$$\sigma = \int_{\Omega} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega$$

Ipotesi:

- Particelle prive di spin
- Urto elastico
- Il potenziale è *centrale*: $V(\mathbf{r}) \equiv V(r)$
- Il raggio d'azione del potenziale è limitato

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$$

- Si pone $\hbar = 2m = 1$

Osservabili in un esperimento di scattering

► Sezione d'urto differenziale:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\text{n° particelle diffuse nell'angolo solido } d\Omega \text{ nell'unità di tempo}}{\text{n° particelle incidenti per unità di tempo e di area}}$$

► Sezione d'urto totale:

$$\sigma = \int_{\Omega} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right) d\Omega$$

Ipotesi:

- Particelle prive di spin
- Urto elastico
- Il potenziale è *centrale*: $V(\mathbf{r}) \equiv V(r)$
- Il raggio d'azione del potenziale è limitato

$$\lim_{r \rightarrow \infty} rV(r) = 0$$

- Si pone $\hbar = 2m = 1$

Descrizione in meccanica quantistica

Si studiano gli autostati dell'hamiltoniana $H = H_0 + V$.

H_0 è l'hamiltoniana di una particella libera:

$$H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle$$

In presenza del potenziale $H = H_0 + V$

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle$$

con $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ per $V \rightarrow 0$.

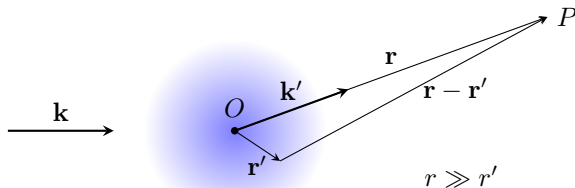
Possiamo ottenere un'equazione integrale per $|\psi\rangle$ rendendo complesso l'operatore $E - H_0$ (*equazione di Lippmann-Schwinger*):

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle$$

con $\epsilon \rightarrow 0$ reale.

Proiettiamo l'equazione di Lippmann-Schwinger sulla base $|\mathbf{r}\rangle$:

$$\langle \mathbf{r} | \psi^\pm \rangle = \langle \mathbf{r} | \phi \rangle + \int d^3 r' \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{r}' \right\rangle \langle \mathbf{r}' | V | \psi^\pm \rangle$$



Si dimostra che

$$G_\pm(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \left\langle \mathbf{r} \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\epsilon} \right| \mathbf{r}' \right\rangle = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$$

Il raggio di azione limitato di $V(\mathbf{r})$ consente di porre $r \gg r'$, dunque

$$|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \simeq r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}' \implies e^{\pm ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq e^{\pm ikr} e^{\mp i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'}$$

Si ottengono i due stati

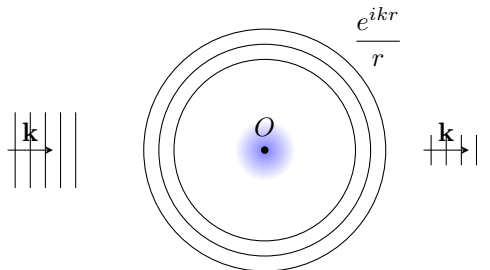
$$\langle \mathbf{r} | \psi^{(\pm)} \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + \frac{e^{\pm ikr}}{r} f^{(\pm)}(\mathbf{k}', \mathbf{k})$$

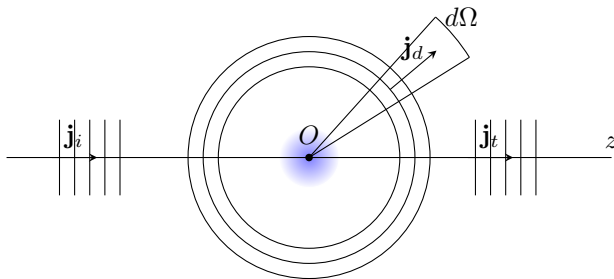
dove

$$f^{(\pm)}(\mathbf{k}', \mathbf{k}) = -\frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{\mp i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}')$$

è la **funzione ampiezza di scattering**.

Asintoticamente, lo stato $|\psi^{(+)}\rangle$ è la sovrapposizione di un'onda piana e di un'onda sferica uscente.





Studiando le correnti di probabilità si ricava la sezione d'urto differenziale

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{r^2 |\mathbf{j}_d|}{|\mathbf{j}_i|} = |f(\mathbf{k}', \mathbf{k})|^2$$

Se il potenziale $V(r)$ è centrale, $f(\mathbf{k}', \mathbf{k})$ dipende solo dal modulo di \mathbf{k} e dall'angolo θ tra \mathbf{k} e \mathbf{k}' :

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2$$

Sviluppo in onde parziali

Data la simmetria del potenziale, conviene utilizzare la base delle onde sferiche libere, autostati degli operatori H_0 , L^2 e L_z .

$$\langle \mathbf{r} | k, l, m \rangle = \phi_{k,l,m}^{(0)}(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{2k^2}{\pi}} j_l(kr) Y_l^m(\theta, \phi)$$

$j_l(kr)$ è l' l -esima funzione di Bessel sferica non singolare nell'origine, che ha andamento asintotico

$$j_l(kr) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr} e^{-il\pi/2} - e^{-ikr} e^{il\pi/2}}{2ikr} = \frac{\sin(kr - l\pi/2)}{kr}$$

Si può dimostrare che

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

È possibile scrivere il seguente sviluppo per la funzione $f(\theta)$:

$$f(\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l(k) P_l(\cos \theta)$$

si ottiene lo *sviluppo in onde parziali*

$$\begin{aligned} \psi^{(+)}(r) &\longrightarrow e^{ikz} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r} = \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{P_l(\cos \theta)}{2ik} \left[(1 + 2ik f_l(k)) \frac{e^{ikr}}{r} - \frac{e^{-i(kr-l\pi)}}{r} \right] \end{aligned}$$

- ▶ L'onda diffusa è dalla sovrapposizione di onde sferiche libere entranti e uscenti.
- ▶ La presenza del potenziale $V(r)$ influisce solo sull'onda uscente mediante il termine $S_l(k) = 1 + 2ik f_l(k)$

Sfasamenti

Per ogni onda parziale, il flusso netto della corrente di probabilità attraverso una superficie sferica molto grande dev'essere nullo (**relazione di unitarietà**), dunque

$$|S_l(k)| = 1 \iff S_l(k) = e^{2i\delta_l}$$

δ_l è chiamato **sfasamento** (dipende da k). Si ha

$$f_l(k) = \frac{S_l - 1}{2ik} = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} = \frac{e^{i\delta_l} \sin \delta_l}{k}$$

La conoscenza degli sfasamenti consente quindi di calcolare immediatamente le grandezze osservabili:

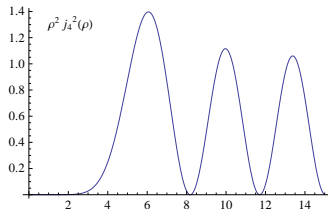
$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \right|^2$$

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l$$

La sommatoria su l ha infiniti termini, ma il numero di termini significativi è finito:

La densità di probabilità dell' l -esima onda parziale per r piccolo ha l'andamento $(kr)^{2l+2}$, quindi è praticamente nulla a una distanza inferiore a

$$b_l(k) = \frac{\sqrt{l(l+1)}}{k}$$



- ▶ se il potenziale ha raggio d'azione finito, esiste un valore l_M a partire dal quale $V(r) \simeq 0$ per $r > b_l(k)$, quindi l'effetto di V sull'onda parziale è trascurabile.
- ▶ b_l è il *parametro d'urto* classico
- ▶ Abbiamo così una stima del numero di sfasamenti δ_l che occorre calcolare.

Metodi per la determinazione degli sfasamenti

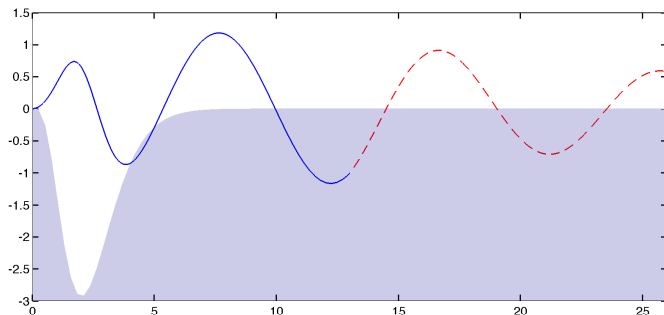
Soluzione dell'equazione di Schrödinger radiale

- ▶ Si pone $\psi_l(\mathbf{r}) = \frac{u_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \phi)$
- ▶ Sia R il raggio d'azione del potenziale
- ▶ Si risolve la parte radiale dell'equazione di Schrödinger nel tratto $[0, R]$

$$\begin{cases} \left[\frac{d^2}{dr^2} + k^2 - V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(r) = 0 \\ u_l(0) = 0 \end{cases}$$

- ▶ Si raccorda in R la $u_l(r)$ e la sua derivata con la soluzione libera per $r > R$, espressa in funzione degli sfasamenti δ_l

$$u_l^0(r) = \alpha [\cos \delta_l \hat{j}_l(kr) - \sin \delta_l \hat{n}_l(kr)]$$



$$\begin{cases} u_l(R) = \alpha [\cos \delta_l \hat{j}_l(kR) - \sin \delta_l \hat{n}_l(kR)] \\ u'_l(R) = k\alpha [\cos \delta_l \hat{j}'_l(kR) - \sin \delta_l \hat{n}'_l(kR)] \end{cases}$$

Si ottiene

$$\tan \delta_l = \frac{j_l(kR)u'_l(R) - k j'_l(kR)u_l(R) - j_l u_l(R)/R}{n_l(kR)u'_l(R) - k n'_l(kR)u_l(R) - n_l u_l(R)/R}$$

Metodo della funzione di fase

- ▶ Si considera il raccordo a r qualunque

$$\begin{aligned}u_l(r) &= \alpha(r) [\cos \delta_l(r) \hat{j}_l(kr) - \sin \delta_l(r) \hat{n}_l(kr)] \\ u'_l(r) &= k\alpha'(r) [\cos \delta_l(r) \hat{j}'_l(kr) - \sin \delta_l(r) \hat{n}'_l(kr)]\end{aligned}$$

- ▶ Con alcune manipolazioni si ottiene l'equazione differenziale non lineare del prim'ordine nell'incognita $\delta_l(r)$

$$\delta'_l(r) = \frac{V(r)}{k} [\cos \delta_l(r) \hat{j}_l(kr) - \sin \delta_l(r) \hat{n}_l(kr)]^2$$

- ▶ $\delta_l(r)$ è chiamata **funzione di fase** e rappresenta lo sfasamento δ_l che si otterrebbe troncando il potenziale nel punto r .

- ▶ Entrambi i metodi prevedono la soluzione di ODE con condizione iniziale. Vengono utilizzate le funzioni ode di MATLAB
 - ▶ Raccordo: equazione lineare del second'ordine
 - ▶ Funz. di fase: equazione non lineare del prim'ordine
- ▶ Metodo di integrazione tipo Runge-Kutta: l'intervallo di integrazione viene discretizzato e l'equazione viene integrata in ciascun intervallo
- ▶ I due algoritmi producono risultati consistenti in tutti i casi presi in esame
- ▶ Il metodo della funzione di fase riduce il tempo di esecuzione dal 30% al 50% a seconda del potenziale
- ▶ L'equazione di fase può avere un comportamento "stiff" se il potenziale ammette stati legati, con conseguente aumento dei tempi di esecuzione.

- ▶ Entrambi i metodi prevedono la soluzione di ODE con condizione iniziale. Vengono utilizzate le funzioni ode di MATLAB
 - ▶ Raccordo: equazione lineare del second'ordine
 - ▶ Funz. di fase: equazione non lineare del prim'ordine
- ▶ Metodo di integrazione tipo Runge-Kutta: l'intervallo di integrazione viene discretizzato e l'equazione viene integrata in ciascun intervallo
- ▶ I due algoritmi producono risultati consistenti in tutti i casi presi in esame
- ▶ Il metodo della funzione di fase riduce il tempo di esecuzione dal 30% al 50% a seconda del potenziale
- ▶ L'equazione di fase può avere un comportamento "stiff" se il potenziale ammette stati legati, con conseguente aumento dei tempi di esecuzione.

- ▶ Entrambi i metodi prevedono la soluzione di ODE con condizione iniziale. Vengono utilizzate le funzioni ode di MATLAB
 - ▶ Raccordo: equazione lineare del second'ordine
 - ▶ Funz. di fase: equazione non lineare del prim'ordine
- ▶ Metodo di integrazione tipo Runge-Kutta: l'intervallo di integrazione viene discretizzato e l'equazione viene integrata in ciascun intervallo
- ▶ I due algoritmi producono risultati consistenti in tutti i casi presi in esame
- ▶ Il metodo della funzione di fase riduce il tempo di esecuzione dal 30% al 50% a seconda del potenziale
- ▶ L'equazione di fase può avere un comportamento "stiff" se il potenziale ammette stati legati, con conseguente aumento dei tempi di esecuzione.

- ▶ Entrambi i metodi prevedono la soluzione di ODE con condizione iniziale. Vengono utilizzate le funzioni ode di MATLAB
 - ▶ Raccordo: equazione lineare del second'ordine
 - ▶ Funz. di fase: equazione non lineare del prim'ordine
- ▶ Metodo di integrazione tipo Runge-Kutta: l'intervallo di integrazione viene discretizzato e l'equazione viene integrata in ciascun intervallo
- ▶ I due algoritmi producono risultati consistenti in tutti i casi presi in esame
- ▶ Il metodo della funzione di fase riduce il tempo di esecuzione dal 30% al 50% a seconda del potenziale
- ▶ L'equazione di fase può avere un comportamento "stiff" se il potenziale ammette stati legati, con conseguente aumento dei tempi di esecuzione.

- ▶ Entrambi i metodi prevedono la soluzione di ODE con condizione iniziale. Vengono utilizzate le funzioni ode di MATLAB
 - ▶ Raccordo: equazione lineare del second'ordine
 - ▶ Funz. di fase: equazione non lineare del prim'ordine
- ▶ Metodo di integrazione tipo Runge-Kutta: l'intervallo di integrazione viene discretizzato e l'equazione viene integrata in ciascun intervallo
- ▶ I due algoritmi producono risultati consistenti in tutti i casi presi in esame
- ▶ Il metodo della funzione di fase riduce il tempo di esecuzione dal 30% al 50% a seconda del potenziale
- ▶ L'equazione di fase può avere un comportamento "stiff" se il potenziale ammette stati legati, con conseguente aumento dei tempi di esecuzione.

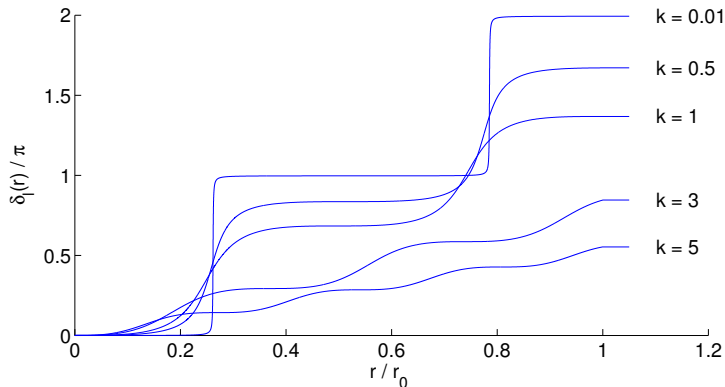


Figura: Funzione di fase per $l = 0$ per una buca sferica di profondità $V_0 = -9$

Teorema di Levinson: per $k \rightarrow 0$, $\delta_l = n\pi$

Determinazione di risonanze

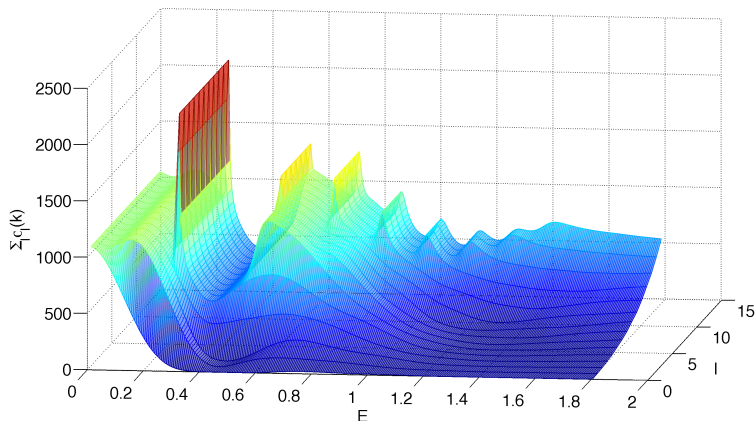
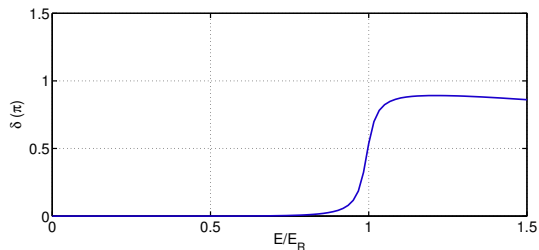
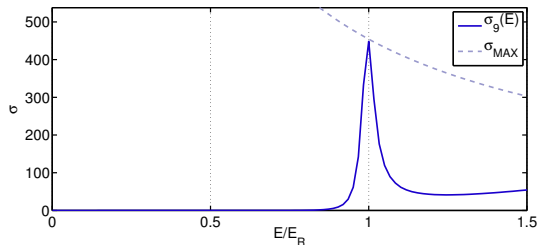


Figura: Sezione d'urto cumulativa ($\sum_l \sigma_l$) in funzione dell'energia per una buca di potenziale sferica di profondità $V_0 = -1$, raggio $r_0 = 10$

Picco di risonanza
per $l = 9$, confron-
tato con la sezione
d'urto massima per-
messa dalla condi-
zione di unitarietà:

$$\sigma = 4\pi(2l + 1)/k^2$$



Quando lo sfasamento raggiunge $\pi/2$, si ha ($\cot \pi/2 = 0$)

$$\cot \delta_l \simeq \frac{d(\cot \delta_l)}{dE}(E - E_R) + \dots = -\frac{\Gamma}{2}(E - E_R) + \dots$$

dove

$$\frac{d(\cot \delta_l)}{dE} \equiv -\frac{\Gamma}{2}$$

si trova la **distribuzione di Breit-Wigner**

$$\begin{aligned}\sigma_l &= \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \frac{1}{1 + \cot^2 \delta_l} \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \frac{(2l+1)\Gamma^2/4}{(E - E_R)^2 + \Gamma^2/4}\end{aligned}$$

Si può dimostrare che Γ è l'inverso del tempo di vita medio della risonanza.

Le risonanze, come gli stati legati, sono poli della matrice S nel piano complesso k .

- ▶ Gli stati legati hanno $E < 0$ e corrispondono a poli per k immaginario puro
- ▶ Le risonanze si hanno per poli con parte reale $E_R > 0$ e parte complessa negativa.
- ▶ Alla parte complessa è associata l'ampiezza Γ della risonanza, inversamente proporzionale al tempo di vita medio.

Mentre le energie degli stati legati possono essere calcolate numericamente con metodi efficienti di calcolo degli autovalori, il calcolo degli sfasamenti è il metodo più immediato per la determinazione delle risonanze nella teoria della diffusione da potenziale.

Le risonanze, come gli stati legati, sono poli della matrice S nel piano complesso k .

- ▶ Gli stati legati hanno $E < 0$ e corrispondono a poli per k immaginario puro
- ▶ Le risonanze si hanno per poli con parte reale $E_R > 0$ e parte complessa negativa.
- ▶ Alla parte complessa è associata l'ampiezza Γ della risonanza, inversamente proporzionale al tempo di vita medio.

Mentre le energie degli stati legati possono essere calcolate numericamente con metodi efficienti di calcolo degli autovalori, il calcolo degli sfasamenti è il metodo più immediato per la determinazione delle risonanze nella teoria della diffusione da potenziale.

Riferimenti



F. Calogero.

Variable phase approach to potential scattering.

Mathematics in science and engineering. Academic Press, 1967.



C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, and F. Laloë.

Quantum mechanics. (Mécanique quantique). Vol. 1-2.

Wiley, 1977.



J.J. Sakurai.

Meccanica quantistica moderna.

Zanichelli, 1996.

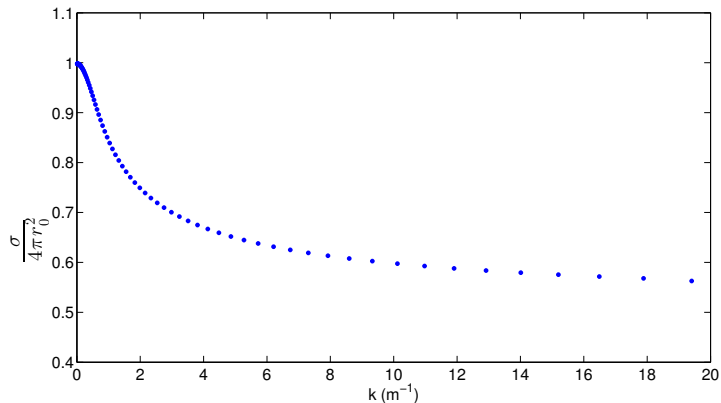


M.D. Scadron.

Advanced quantum theory and its applications through Feynman diagrams.

Springer-Verlag, New York, NY, 1979.

Sfera riflettente



- ▶ per $k \rightarrow 0$, $\sigma = 4\pi r_0^2$
- ▶ per $k \rightarrow \infty$, $\sigma = 2\pi r_0^2$