

Introduzione allo Studio dei Processi di Diffusione

Raimondo ANNI

Dipartimento di Fisica dell'Università di Lecce
e
Istituto Nazionale di Fisica Nucleare Sezione di Lecce

Si autorizza la duplicazione di questa opera, nella sua presente forma, per la sua distribuzione, senza fini di lucro, agli studenti del Corso di Laurea in Fisica dell'Università di Lecce.

Contenuto

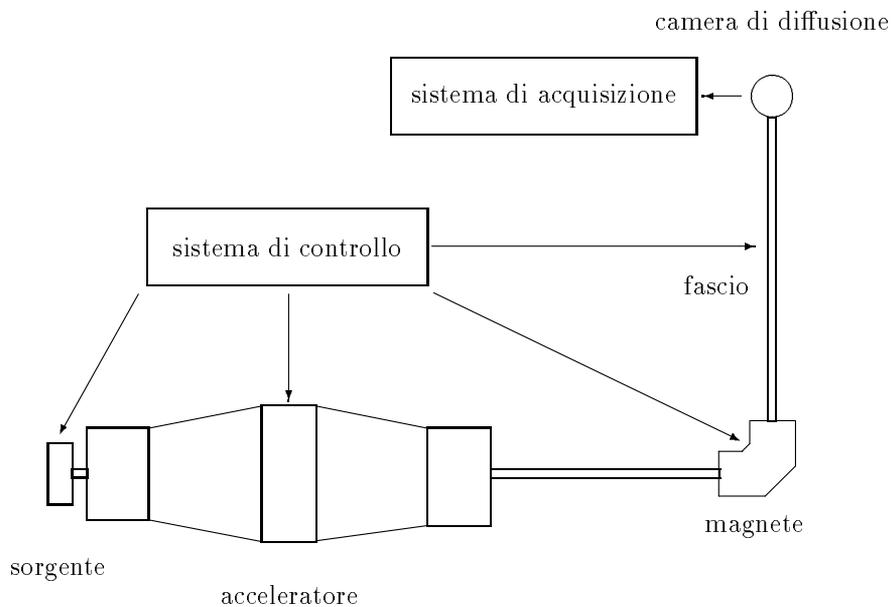
1	Generalità sui Processi di Diffusione	3
1.1	Caratteristiche Generali	3
1.2	Sezione d'Urto	4
1.2.1	Sezione d'Urto Totale	4
1.2.2	Sezione d'Urto Differenziale	5
2	Processi d'Urto in Meccanica Classica	7
2.1	Introduzione	7
2.2	Potenziali Centrali: Leggi Orarie ed Equazione della Traiettoria	8
2.3	Diffusione da un Potenziale Centrale	11
2.4	Proprietà della Funzione di Deflessione	12
2.5	Sezione d'Urto Classica	13
2.5.1	Diffusione da una Sfera Impenetrabile	15
2.5.2	Diffusione da una Sfera Omogenea Attrattiva	16
2.5.3	Diffusione da un Potenziale Coulombiano	17
2.6	Singularità della Sezione d'Urto Classica	18
2.6.1	Gloria	18
2.6.2	Arcobaleno	18
3	Processi d'Urto in Meccanica Quantistica	20
3.1	Introduzione	20
3.2	Diffusione di due Particelle Puntiformi	20
3.3	Equazione Integrale per la Diffusione	22
3.4	Approssimazione di Born per l'Ampiezza di Diffusione	25
3.5	Sviluppo in Onde Parziali dell'Ampiezza di Diffusione	26
3.6	Proprietà della Funzione di Diffusione	30
3.7	Sezioni d'Urto Parziali e Integrale	31
3.8	Calcolo della Sezione d'Urto per la Diffusione da un Potenziale Centrale	33
3.8.1	Ampiezza dell'Intervallo di Integrazione Numerica	33
3.8.2	Integrazione Numerica dell'Equazione Radiale	33
3.8.3	Calcolo dell'Ampiezza di Diffusione e della Sezione d'Urto	34
3.9	Calcolo di Sezioni d'Urto per Semplici Potenziali	35
3.9.1	Diffusione da una Sfera Impenetrabile	35
3.9.2	Diffusione da una Sfera Omogenea Attrattiva	37
3.9.3	Dipendenza della Sezione d'Urto Totale dalla Profondità del Potenziale	40
3.9.4	Diffusione Gloria e Arcobaleno	43
3.9.5	Diffusione da un Potenziale di Saxon-Woods	46
4	Appendice	48
4.1	Calcolo di Sezioni d'Urto Differenziali, Parziali e Totali	48
4.1.1	Diffusione da una Sfera Impenetrabile	48
4.1.2	Diffusione da una Sfera Omogenea Attrattiva	51
4.1.3	Diffusione da un Potenziale di Saxon-Woods	53

1 Generalità sui Processi di Diffusione

1.1 Caratteristiche Generali

Un processo di diffusione, o d'urto, è un processo in cui dei proiettili, che possono essere particelle o agglomerati di particelle opportunamente preparati, vengono lanciati verso una regione dello spazio in cui sono localizzati dei bersagli, altre particelle o agglomerati di particelle, da una distanza tanto grande da poter inizialmente trascurare l'interazione fra proiettili e bersagli. La successiva interazione fra proiettili e bersagli modifica il loro stato iniziale e lo studio di tali modifiche consente di ottenere informazioni sulle caratteristiche dell'interazione.

Di solito i proiettili vengono preparati fissando la loro quantità di moto \mathbf{p} in modo tale che siano diretti verso la regione dello spazio contenente i bersagli inizialmente fermi ed il sistema di riferimento in cui il bersaglio è inizialmente fermo viene denominato *sistema di riferimento del laboratorio*. Quello che si osserva è che dalla regione contenente i bersagli emerge per effetto dell'interazione una varietà di altre particelle che si allontanano dalla regione di interazione nelle direzioni più disparate. La natura di queste particelle e le quantità di moto con le quali emergono contengono informazioni sul processo di interazione fra proiettili e bersagli che si vuole comprendere.



Nella figura sono schematicamente rappresentati i principali dispositivi utilizzati per lo studio di un processo di diffusione in fisica nucleare: nuclei di tipo a vengono preparati da una sorgente, accelerati da un acceleratore, analizzati in energia da un magnete e collimati tramite un sistema di lenti magnetiche e di fenditure. Il fascio così preparato viene fatto incidere su nuclei di tipo A contenuti in un bersaglio predisposto all'interno di una camera di diffusione.

Un sistema di rivelazione registra l'emissione dei nuclei provenienti dalla regione del bersaglio, identificando il tipo di processo che si vuole studiare.

La densità del fascio incidente è di solito tanto bassa da poter trascurare le interazioni fra i diversi nuclei che lo compongono, e la probabilità che ha ogni singolo proiettile di interagire con un singolo bersaglio è anch'essa, di solito, tanto piccola da poter trascurare

la possibilità che il proiettile, o i suoi prodotti, interagiscano con altri nuclei del bersaglio. In queste condizioni gli effetti che si osservano sono una manifestazione dell'interazione di un singolo proiettile a con un singolo bersaglio A .

Vengono di solito studiati:

- **Processi elastici** che vengono rappresentati simbolicamente con la notazione $a + A \rightarrow a + A$ o $A(a, a)A$, in cui l'interazione non ha modificato lo stato interno nè del proiettile nè del bersaglio.
- **Processi anelastici**, indicati con la notazione $a + A \rightarrow a + A^*$ o $A(a, a)A^*$, che nel caso indicato specifica che l'interazione ha indotto una transizione di A dal suo stato fondamentale ad uno stato eccitato A^* .
- **Reazioni di trasferimento**, rappresentate con la notazione $a + A \rightarrow b + B$ o $A(a, b)B$, in cui l'interazione ha causato una ridistribuzione dei nucleoni inizialmente ripartiti in a e A in due nuclei b e B . Nella notazione usata b viene denominato *eiettile* e B *residuo*.
- **Reazioni di frammentazione**, indicate con la notazione $a + A \rightarrow b + c + B$ o $A(a; b, c)B$, in cui l'interazione ha causato una ridistribuzione dei nucleoni inizialmente ripartiti in a e A in tre nuclei b , c e B .

Si osservi come la notazione usata, con l'utilizzazione di lettere maiuscole per i bersagli e minuscole per i proiettili, sia in qualche modo influenzata dal fatto che di solito sono usati come proiettili i nuclei di massa minore, analogamente la denominazione di eiettile suggerisce che lo stesso sia stato formato a partire dal proiettile e che il residuo sia il risultato della trasformazione del bersaglio.

Considerata la grande varietà dei processi che l'interazione può determinare, la notazione è necessariamente ambigua e non è corretto associare alla notazione usata un definito meccanismo di reazione.

Si consideri ad esempio il processo:



il processo può essere considerato un processo elastico in cui l'eiettile coincide con il proiettile, ma il processo elastico è sperimentalmente indistinguibile dalla reazione di trasferimento da ${}^{16}\text{O}$ a ${}^{12}\text{C}$ di quattro nucleoni (2 protoni e 2 neutroni).

La notazione va pertanto considerata solamente come indicativa dei nuclei che vengono fatti collidere nel *canale iniziale* e dei nuclei che si osservano nel *canale finale* prodotti dall'interazione.

Ciò che si osserva nello studio sperimentale dei prodotti dei fenomeni d'urto è che non tutte le possibili ripartizioni, che rispettino i principi di conservazione, dei costituenti elementari di a e A in due o più diversi loro agglomerati sono egualmente probabili, né sono egualmente probabili le emissioni dei prodotti di reazione nelle diverse direzioni. Queste asimmetrie contengono informazioni sulle proprietà dei diversi agglomerati e sulla loro interazione.

Risulta pertanto opportuno definire delle grandezze idonee ad esprimere quantitativamente la preferenza del sistema ad evolvere nei diversi sistemi possibili, causando l'emissione dei prodotti della reazione preferibilmente lungo certe direzioni piuttosto che lungo altre.

1.2 Sezione d'Urto

1.2.1 Sezione d'Urto Totale

Supposto che il fascio di particelle a , di energia cinetica E_a , immesso nella camera di diffusione sia omogeneo e corrisponda ad un flusso J_a (numero di nuclei a che attraversano

nell'unità di tempo l'unità di superficie disposta trasversalmente alla direzione del fascio) e che nell'area del bersaglio investita dal fascio siano presenti N_A nuclei A , il numero n_t di processi che, nell'unità di tempo, causano la modifica dello stato iniziale del sistema (a, A) risulta trivialmente eguale, a meno di una costante di proporzionalità avente le dimensioni di un'area, al prodotto $J_a N_A$

$$n_t = \sigma_{\alpha t}(E_a) J_a N_A. \quad (1.2)$$

La costante di proporzionalità, che è stata indicata con $\sigma_{\alpha t}(E_a)$, viene denominata *sezione d'urto totale*.

Nella notazione funzionale utilizzata l'indice α sottolinea che la sezione d'urto totale è caratteristica della particolare coppia (a, A) presente nel canale iniziale e la variabile che la stessa dipende dall'energia del proiettile.

Per la sua stessa definizione la sezione d'urto totale fornisce una misura dell'area utile, ad ogni singolo lancio di un nucleo a contro un nucleo A , ai fini di modificare lo stato iniziale del sistema, indipendentemente dal particolare tipo di processo (elastico, anelastico, ecc.) che ha determinato tale modifica, e il rapporto fra la sezione d'urto totale e l'area del fascio esprime la probabilità che l'evento si verifichi.

Le misure dell'attenuazione del flusso del fascio causate dall'attraversamento di bersagli, contenenti nuclei A , di diverso spessore consentono di determinare la sezione d'urto totale. Supposto infatti che il materiale del bersaglio sia puro e contenga \mathcal{N}_A nuclei per unità di volume, un suo spessore dx investito da un fascio di sezione S contiene

$$N_A = \mathcal{N}_A S dx \quad (1.3)$$

nuclei. Per la definizione di sezione d'urto totale, dei $J_a S$ nuclei del fascio che investono nell'unità di tempo il bersaglio un numero pari a

$$\sigma_{\alpha t}(E_a) J_a \mathcal{N}_A S dx \quad (1.4)$$

risulterà mancante dopo l'attraversamento dello spessore dx e di conseguenza il flusso avrà subito una variazione data da

$$dJ_a = -\sigma_{\alpha t}(E_a) J_a \mathcal{N}_A dx. \quad (1.5)$$

Separando le variabili ed integrando si ottiene il flusso $J_a(x)$, che può essere misurato, dopo l'attraversamento di uno spessore x del bersaglio,

$$J_a(x) = J_a(0) e^{-\sigma_{\alpha t}(E_a) \mathcal{N}_A x} \quad (1.6)$$

ove si è indicato con $J_a(0)$ il flusso iniziale del fascio.

1.2.2 Sezione d'Urto Differenziale

La sezione d'urto totale $\sigma_{\alpha t}(E_a)$ è idonea a esprimere in modo quantitativo l'efficacia dell'interazione, ma la esprime in modo globale disinteressandosi del particolare processo che ha determinato la variazione dello stato iniziale sia per quanto riguarda il canale finale in cui lo stato iniziale è andato ad evolvere, sia per quanto riguarda le direzioni nello spazio lungo le quali vengono emessi i nuclei del canale finale. Per poter esprimere quantitativamente l'efficacia dell'interazione ai fini del popolamento di un particolare canale finale, questo deve, ovviamente, essere innanzitutto specificato ed identificato sperimentalmente.

Per fissare le idee si supponga di voler studiare il processo binario $A(a, b)B$, ove con la dicitura *binario* si sottolinea il fatto che due nuclei (a, A) evolvono in due soli altri nuclei (b, B) , che non escludiamo possano coincidere con i due nuclei presenti del canale iniziale. Trattandosi di un processo a due corpi i principi di conservazione dell'energia e

della quantità di moto pongono dei limiti estremamente stringenti sui valori delle quantità di moto \mathbf{p}_b e \mathbf{p}_B dei nuclei b e B prodotti dall'interazione; in particolare \mathbf{p}_B deve essere complanare a \mathbf{p}_b e a \mathbf{p}_A , e se si fissa la direzione di \mathbf{p}_b i principi di conservazione determinano i valori di tutte le altre variabili cinematiche coinvolte nel processo. In conseguenza di ciò se si osserva un nucleo b emesso in una direzione dello spazio definita dagli angoli θ_b e ϕ_b rispetto alla direzione, assunta come asse polare, del fascio incidente e con l'energia prevista dalle leggi di conservazione il nucleo stesso proviene proprio dal processo che vogliamo studiare.

Il numero dn_b di nuclei b emessi dalla regione del bersaglio nell'unità di tempo entro l'angolo solido $d\Omega_b = \sin \theta_b d\theta_b d\phi_b$ risulterà eguale, a meno di una costante di proporzionalità, avente ancora le dimensioni di un'area, al prodotto di J_a , N_A e $d\Omega_b$

$$dn_b = \sigma_{\alpha\beta}(\theta_b, \phi_b, E_a) J_a N_A d\Omega_b \quad (1.7)$$

ove la costante di proporzionalità, che è stata indicata con $\sigma_{\alpha\beta}(\theta_b, \phi_b, E_a)$, viene denominata *sezione d'urto differenziale*. Nella notazione funzionale utilizzata gli indici α e β sottolineano che la sezione d'urto differenziale è caratteristica della particolare coppia (a, A) di nuclei nel canale iniziale e della particolare coppia di nuclei (b, B) nel canale finale e le variabili che la stessa dipende dall'angolo al quale b viene emesso e dall'energia del canale iniziale.

Integrando la sezione d'urto differenziale su tutto l'angolo solido si ottiene la sezione d'urto integrale per il processo $a(A, b)B$:

$$\sigma_{\alpha\beta}(E_a) = \int_{\Omega} \sigma_{\alpha\beta}(\theta_b, \phi_b, E_a) d\Omega_b \quad (1.8)$$

Sommando le sezioni d'urto integrali su tutti i possibili canali β che possono essere popolati dall'interazione si riottiene, ovviamente, la sezione d'urto totale precedentemente definita.

$$\sigma_{\alpha t}(E_a) = \sum_{\beta} \sigma_{\alpha\beta}(E_a) \quad (1.9)$$

Si osservi che il rapporto fra la sezione d'urto integrale $\sigma_{\alpha\beta}(E_a)$ e la sezione S del fascio, esprime la probabilità che l'interazione di un singolo proiettile a con un singolo bersaglio A generi la coppia b e B .

2 Processi d'Urto in Meccanica Classica

2.1 Introduzione

Prima di affrontare lo studio dei processi d'urto secondo la Meccanica Quantistica è opportuno affrontare lo studio di questi processi secondo la Meccanica Classica. Ciò non già perchè si spera che il formalismo della Meccanica Classica possa essere utilizzato per descrivere quantitativamente i processi di diffusione in Fisica Nucleare e Sub-Nucleare, quanto perchè risulta conveniente acquisire, in un ambito ben conosciuto, una certa confidenza con un fenomeno che, tutto sommato, è poco familiare.

Si tenga inoltre presente che proprio utilizzando la Meccanica Classica, l'unica che aveva a disposizione, Rutherford ha ottenuto l'espressione, che tuttora è denotata con il suo nome, della sezione d'urto per la diffusione di due particelle cariche puntiformi. È a tutti nota l'importanza che ha avuto ai fini dello sviluppo della Meccanica Quantistica la constatazione che le particelle α diffuse da atomi di sostanze diverse si distribuivano nello spazio secondo le previsioni della sezione d'urto di Rutherford! Ciò solo basterebbe a giustificare il nostro interesse per la descrizione classica dei processi di diffusione.

In aggiunta a ciò lo studio dei processi d'urto secondo la Meccanica Classica permetterà di apprezzare similitudini e differenze con la descrizione quantistica, consentendo una più approfondita conoscenza del carattere di quest'ultima.

Una buona familiarità con la descrizione classica risulta inoltre opportuna perchè un riferimento alle situazioni classiche corrispondenti viene spesso utilizzato in ambito quantistico per tenere sotto controllo le situazioni che si vogliono descrivere.

Considerato il significato statistico che abbiamo riconosciuto nella definizione delle sezioni d'urto può, a prima vista, apparire sorprendente che una trattazione classica del problema possa salvaguardare la sua natura statistica. Nella descrizione classica la natura statistica dei processi d'urto, così come in Meccanica Statistica, discende da una definizione statistica dello stato iniziale del sistema. Il fatto è che quando un proiettile a viene lanciato contro un bersaglio A , considerate le dimensioni microscopiche di entrambi, lo si lancia praticamente senza prendere la mira. Supposte le particelle a e A puntiformi e considerato un sistema di riferimento con l'origine in A , inizialmente a riposo, e con l'asse delle z diretto secondo la direzione di \mathbf{p}_a , poichè le dimensioni trasversali del fascio entro il quale è contenuto a sono macroscopiche, rispetto alle ipotizzate dimensioni puntiformi di A , non si conosce esattamente lo stato iniziale classico del sistema. Nel sistema di riferimento considerato si conoscono all'istante iniziale, $t_0 = -\infty$, le quantità di moto di a e di A , si conosce la posizione iniziale di A ma si conosce solo la coordinata $z_a = -\infty$ della posizione iniziale di a . Per quanto riguarda le coordinate x_a e y_a esse devono essere considerate delle variabili casuali uniformemente distribuite entro le dimensioni macroscopiche del fascio. Poichè due delle condizioni iniziali risultano essere delle variabili casuali risulterà essere casuale anche la traiettoria descritta dalle particelle in collisione, e casuale la direzione lungo la quale le particelle emergeranno dopo la collisione. Se a o A o entrambi avessero una struttura interna la casualità del processo di diffusione classico verrebbe ulteriormente aumentata dalla casualità della distribuzione di tutte le variabili dinamiche che descrivono lo stato interno di a e/o A che non vengono determinate nel corso della preparazione sperimentale del fascio incidente e del bersaglio.

Continuando a supporre, per semplicità, che le particelle a e A siano puntiformi gli unici processi possibili risulteranno essere i processi elastici ed, eventualmente, i processi anelastici se le forze di interazione fra a e A sono dissipative. Se si suppongono note le forze di interazione, in corrispondenza ad ogni fissato valore di x_a e y_a può essere determinata, integrando le equazioni del moto, la traiettoria descritta dalla particella a e la direzione finale alla quale emerge dopo l'interazione.

Essendo nota la densità di probabilità che la particella abbia coordinate iniziali x_a e y_a è di conseguenza calcolabile la densità di probabilità che la particella a emerga in ogni direzione prefissata ed è quindi determinabile la sezione d'urto differenziale.

La determinazione dell'equazione della traiettoria di una particella soggetta alla più generale interazione immaginabile non è purtroppo esprimibile in formule chiuse, e di conseguenza, se non si impone qualche vincolo all'interazione, risulta impossibile procedere all'analisi dei processi di diffusione senza ricorrere a tecniche di calcolo numerico.

Nelle sezioni seguenti discuteremo i processi di diffusione in Meccanica Classica limitandoci a supporre che l'interazione fra le particelle in collisione sia di tipo centrale. Si ricordi che una forza centrale è una forza conservativa e di conseguenza, limitando la nostra discussione alle forze centrali, potremo prendere in considerazione solo processi d'urto di tipo elastico.

Considerando note le tecniche della Meccanica Classica che consentono di ridurre il problema del moto di un sistema isolato composto da due corpi al problema del moto del centro di massa e del moto relativo, ci limiteremo a prendere in considerazione il problema della diffusione di una particella da un centro di forze.

2.2 Potenziali Centrali: Leggi Orarie ed Equazione della Traiettoria

Secondo la Meccanica Classica, nel moto di una particella di massa m soggetta ad una forza centrale

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = -\nabla V(r), \quad (2.1)$$

si conserva il momento della quantità di moto rispetto al centro della forza

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = \mathbf{r} \times m\mathbf{v}. \quad (2.2)$$

In conseguenza di ciò, la traiettoria descritta dalla particella risulterà contenuta nel piano individuato dai vettori \mathbf{r}_0 e \mathbf{p}_0 che definiscono, rispettivamente, la posizione e la quantità di moto iniziale.

Utilizzando coordinate polari nel piano del moto la Lagrangiana è data da

$$\mathcal{L}(r, \dot{r}, \phi, \dot{\phi}) = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) - V(r). \quad (2.3)$$

La dipendenza di r e ϕ dal tempo può essere facilmente ricavata riconoscendo che le quantità:

$$p_\phi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = mr^2\dot{\phi} = -L \quad (2.4)$$

ed

$$\mathcal{H} = \mathcal{L} + 2V(r) = \frac{m}{2}(\dot{r}^2 + r^2\dot{\phi}^2) + V(r) = E \quad (2.5)$$

sono delle costanti del moto, l'una perchè \mathcal{L} non dipende esplicitamente da ϕ , l'altra perchè \mathcal{L} non dipende esplicitamente dal tempo.

Indicato con $\hat{\mathbf{u}}$ il versore, opportunamente orientato, normale al piano del moto, è immediato riconoscere che $\mathbf{L} = p_\phi \hat{\mathbf{u}}$; la (2.4) esprime pertanto la conservazione del momento della quantità di moto, mentre la (2.5) esprime la conservazione dell'energia.

Ricavando $\dot{\phi}$ dalla (2.4) e sostituendola nella (2.5) si ottiene

$$\frac{dr}{dt} = \pm \sqrt{\frac{2}{m}[E - V(r)] - \frac{L^2}{m^2 r^2}}. \quad (2.6)$$

L'equazione (2.6) pone dei limiti alla regione del moto, infatti, per ogni coppia di valori di E e L , univocamente definiti dalle condizioni iniziali ($t_0, r_0, \dot{r}_0, \phi_0, \dot{\phi}_0$), risulta essere accessibile al moto solo la regione, comprendente r_0 in cui:

$$\frac{2}{m}[E - V(r)] - \frac{L^2}{m^2 r^2} \geq 0, \quad (2.7)$$

ovvero in cui

$$E \geq V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}. \quad (2.8)$$

L'ultimo termine del membro di destra della (2.8) viene usualmente chiamato potenziale *centrifugo*¹.

Si osservi che la soluzione del problema del moto radiale risulta equivalente alla soluzione del problema del moto unidimensionale di una particella sotto l'azione di un potenziale *efficace* pari alla somma del potenziale *vero* e del potenziale centrifugo. La condizione (2.8) impone all'energia totale di non essere inferiore al potenziale efficace per far sì che non sia negativa l'energia cinetica associata al moto radiale.

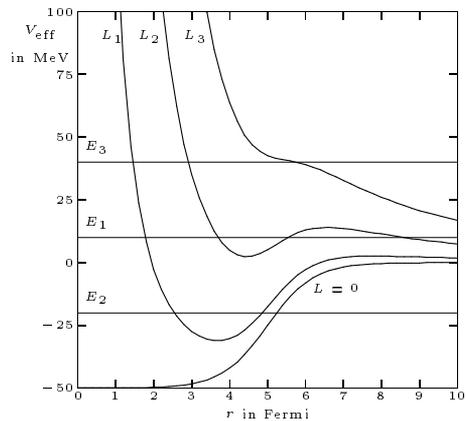
Esercizi

- Nella figura a fianco è illustrata, per tre diversi valori di L , la dipendenza da r del potenziale efficace del potenziale

$$V(r) = -V_0 \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{d}}},$$

con $V_0 = 50$ MeV ed R e d uguali, rispettivamente, a 5 e .5 Fermi rappresentato dalla curva contrassegnata con $L = 0$.

Discutere qualitativamente, per ognuna delle energie rappresentate dalle linee orizzontali, le caratteristiche del moto di particelle aventi i momenti angolari considerati.



In Fisica Nucleare questo potenziale viene denominato *Potenziale di Saxon-Woods* ed è comunemente utilizzato per descrivere l'interazione fra un nucleone ed un nucleo. La dipendenza da r del potenziale è suggerita dal fatto che l'interazione fra i nucleoni è a corto raggio e che la densità dei nucleoni risulta approssimativamente costante, nella regione interna del nucleo, e rapidamente decrescente in prossimità della superficie.

- Si studino al variare di E e di L le regioni accessibili al moto per una particella di massa m soggetta al potenziale:

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{per } r \leq R \\ 0 & \text{per } r > R \end{cases}$$

con $V_0 > 0$.

Separando le variabili nella (2.6) ed integrando si ottiene, in forma implicita, la legge oraria del moto radiale. Prima di far ciò è però necessario fissare il segno che compare davanti alla radice e che è determinato dalle condizioni iniziali. Se si suppone che all'istante iniziale t_0 risulti $\dot{r}_0 < 0$ (la particella inizialmente si avvicina al centro diffusore) va scelto il segno $-$ ed il segno $+$ se viceversa si suppone che all'istante iniziale risulti $\dot{r}_0 > 0$.

Esercizio

Che segno va scelto se all'istante iniziale risulta $\dot{r}_0 = 0$?

¹La denominazione trae origine dal fatto che la forza centrifuga $mr\dot{\phi}^2 = \frac{L^2}{mr^3}$ è giusto l'opposto della derivata rispetto ad r del potenziale centrifugo. La comparsa del potenziale centrifugo, a fianco del potenziale $V(r)$ nella trattazione del moto radiale discende dal fatto che la retta lungo la quale avviene il moto è in rotazione rispetto ad un sistema di riferimento inerziale.

Supposto che inizialmente risulti $\dot{r}_0 < 0$ dalla (2.6) si ottiene:

$$-\int_{r_0}^r \frac{dr}{\sqrt{\frac{2}{m}[E - V(r)] - \frac{L^2}{m^2 r^2}}} = \int_{t_0}^t dt. \quad (2.9)$$

La scelta del segno $-$ effettuata per la radice risulta appropriata fintantocchè la particella, continuando il suo moto di avvicinamento al centro del potenziale, non raggiunge un estremo della regione accessibile al moto che contiene r_0 . Siano, rispettivamente, r_i questo punto, che sarà una delle soluzioni dell'equazione:

$$E = V(r) + \frac{L^2}{2mr^2}, \quad (2.10)$$

e t_i l'istante di tempo in cui lo stesso viene raggiunto. Per $t = t_i$ si annulla la componente radiale della velocità e negli istanti successivi il moto radiale riprende seguendo la legge (2.9) con $r_0 \rightarrow r_i$, $t_0 \rightarrow t_i$, e con il segno della radice cambiato; così via, indefinitamente. In r_i cambia segno la componente radiale della velocità e, per questo, è chiamato *punto di inversione*.

Poichè fra r_0 ed r_i , o più in generale fra due punti di inversione successivi, r non cambia di segno la funzione $t = t(r)$ ottenuta dalla (2.9) risulterà invertibile fornendo la legge oraria $r = r(t)$; quest'ultima potrà essere utilizzata nell'ultima eguaglianza della (2.4) che nella sua forma integrale:

$$\int_{\phi_0}^{\phi} d\phi = - \int_{t_0}^t \frac{L}{mr^2} dt, \quad (2.11)$$

fornisce direttamente la legge oraria $\phi = \phi(t)$.

Usando la (2.9) e la (2.11) è immediato dimostrare che vale la proprietà:

$$\begin{aligned} r(t_i - t) &= r(t_i + t) \\ \phi(t_i) - \phi(t_i - t) &= \phi(t_i + t) - \phi(t_i), \end{aligned} \quad (2.12)$$

e di conseguenza la traiettoria risulta simmetrica rispetto a tutti gli assi passanti per i punti di inversione del moto. Per costruire la traiettoria sarà pertanto sufficiente costruire la stessa fra due punti di inversione consecutivi e costruire la parte restante per simmetria. L'equazione della traiettoria può essere ottenuta direttamente ricordando che $\frac{d\phi}{dr} = \dot{\phi}\dot{r}^{-1}$; separando, in questa relazione, le variabili ed integrando si ottiene:

$$\int_{\phi_0}^{\phi} d\phi = \pm \int_{r_0}^r \frac{L}{mr^2 \sqrt{\frac{2}{m}[E - V(r)] - \frac{L^2}{m^2 r^2}}} dr, \quad (2.13)$$

ove la gestione del segno della radice va fatta conformemente alle considerazioni precedenti.

Indicato con $p_r(r, E, L)$ il modulo della componente radiale della quantità di moto

$$p_r(r, E, L) \equiv m|\dot{r}| = \sqrt{2m[E - V(r) - \frac{L^2}{2mr^2}]} \quad (2.14)$$

la (2.13) può essere riscritta nella forma

$$\int_{\phi_0}^{\phi} d\phi = \pm \int_{r_0}^r \frac{L}{r^2 p_r(r, E, L)} dr. \quad (2.15)$$

2.3 Diffusione da un Potenziale Centrale

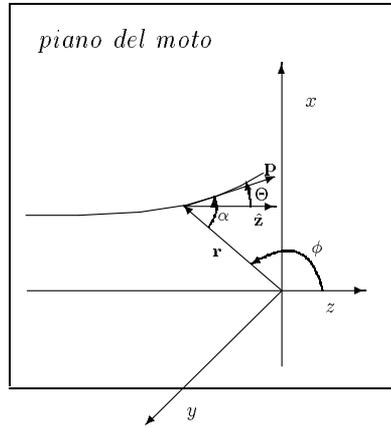
La diffusione di una particella da un potenziale centrale è un processo in cui inizialmente, a $t_0 = -\infty$, la particella si trova a una distanza infinita dal centro del potenziale con una componente radiale della sua velocità negativa. La particella, di energia e momento angolare determinati dalle condizioni iniziali, si muove verso la regione di interazione lungo la traiettoria determinata dalla (2.15), presa con il segno $-$ e con $r_0 = \infty$ e $t_0 = -\infty$, sino a raggiungere il punto di inversione del moto, corrispondente ai valori di E e L prefissati, più lontano dal centro del potenziale. Raggiunto questo punto la particella inizia ad allontanarsi dalla regione di interazione lungo una traiettoria simmetrica rispetto al ramo di traiettoria precedentemente descritto, sino a raggiungere nuovamente una distanza infinita dal centro dell'interazione.

La conservazione dell'energia implica che $p(t = -\infty) = p(t = +\infty)$; di conseguenza gli effetti dell'interazione si limitano al cambiamento della direzione che la quantità di moto dopo l'urto rispetto alla direzione della quantità di moto prima dell'urto. Risulta pertanto opportuno definire una grandezza idonea ad esprimere la variazione della direzione della quantità di moto.

Indicati con \mathbf{r} un generico punto della traiettoria, con $\hat{\mathbf{z}}$ il versore dell'asse polare, con \mathbf{p} la quantità di moto in \mathbf{r} , con α l'angolo individuato da $-\mathbf{r}$ e \mathbf{p} , e con Θ l'angolo individuato da $\hat{\mathbf{z}}$ e \mathbf{p} , risulta:

$$-d\phi = d\alpha - d\Theta, \quad (2.16)$$

che, integrata fra la situazione iniziale, in cui la particella si trova a distanza infinita dal centro diffusore e diretta verso lo stesso, e la situazione in cui la particella ha raggiunto il punto di inversione del moto r_1 più lontano dall'origine, porge:



$$[\Theta(r_1) - \Theta(\infty)] = [\alpha(r_1) - \alpha(\infty)] + [\phi(r_1) - \phi(\infty)] \quad (2.17)$$

che, ricordando la (2.15) e che $\Theta(\infty) = \alpha(\infty) = 0$, $\alpha(r_1) = \frac{\pi}{2}$, diviene

$$\Theta(r_1) = \frac{\pi}{2} - \int_{r_1}^{\infty} \frac{L}{r^2 p_r(r, E, L)} dr. \quad (2.18)$$

Per come è stato definito, l'angolo $\Theta(r_1)$ esprime l'angolo spazzato dalla quantità di moto fra l'istante iniziale e l'istante in cui la particella raggiunge la distanza di massimo avvicinamento r_1 lungo la traiettoria del moto. Per la simmetria della traiettoria l'angolo globalmente spazzato dalla quantità di moto fra l'istante di tempo $t = -\infty$ e l'istante di tempo $t = +\infty$ sarà:

$$\Theta(L) = \pi - 2 \int_{r_1}^{\infty} \frac{L}{r^2 p_r(r, E, L)} dr, \quad (2.19)$$

ove si è ommesso di indicare la dipendenza da E . La funzione $\Theta(L)$ viene denominata *funzione di deflessione* e gioca un ruolo fondamentale nella descrizione Classica dei processi di diffusione da un potenziale centrale.

Si dimostri che la funzione di deflessione è negativa se il potenziale è una funzione monotona negativa (potenziale completamente attrattivo) ed è positiva se il potenziale è una funzione monotona decrescente (potenziale completamente repulsivo).

2.4 Proprietà della Funzione di Deflessione

Per la sua stessa definizione la funzione di deflessione è superiormente limitata da π , e risulta inferiormente illimitata se risulta divergente l'integrale che compare nella sua definizione.

Il fattore $\frac{1}{r^2}$, unito al fatto che i potenziali che ha senso considerare nella descrizione di processi d'urto devono tendere ad un valore costante (che possiamo supporre nullo) per $r \rightarrow \infty$, assicura la convergenza dell'integrale all'infinito. Di conseguenza eventuali divergenze dell'integrale possono solamente essere causate dal comportamento della funzione integranda all'estremo inferiore, che, ricordiamo, è uno zero di $f(r) = p_r^2(r, E, L)$.

Sviluppando $f(r)$ in serie nell'intorno di r_1 , e troncando lo sviluppo al termine del second'ordine, si ottiene:

$$f(r) \simeq f'(r_1)(r - r_1) + \frac{f''(r_1)}{2!}(r - r_1)^2, \quad (2.20)$$

con $f'(r_1) \geq 0$.

Normalmente $f'(r_1) > 0$ e la funzione integranda si comporta in un intorno destro r_1 come $\frac{1}{\sqrt{r-r_1}}$, che in quell'intorno è integrabile, e l'integrale che definisce la funzione di deflessione esiste ed è finito.

Se, per ventura, $f'(r_1) = 0$, allora la funzione integranda si comporta in un intorno r_1 come $\frac{1}{r-r_1}$, che non è integrabile in un intorno di r_1 e di conseguenza non esiste, finito, l'integrale che definisce la funzione di deflessione.

Si osservi che $f'(r) \propto V'_{eff}(r)$ e quindi $f'(r) = 0$ in tutti i punti di equilibrio per il problema unidimensionale equivalente al problema del moto radiale. Ora, i punti r_i sono i punti in cui l'energia è eguale al potenziale efficace e pertanto in r_i è nulla la componente radiale della velocità. Se uno di questi punti coincide con uno dei punti di equilibrio la particella, posta inizialmente in quel punto, da quel punto non si allontana.

Nel nostro caso la particella, che si trova inizialmente in una posizione r' a destra di r_1 con una energia giusto eguale al valore del potenziale efficace in r_1 , raggiunge r_1 in un tempo pari al tempo che impiega la stessa particella, posta in r_1 per raggiungere r' (si ricordi che le equazioni del moto della Meccanica Classica sono invarianti per l'inversione del tempo), ovvero mai: la particella nel problema unidimensionale equivalente continua indefinitamente il suo avvicinamento a r_1 essendo impossibilitata a raggiungerlo in un tempo finito.

Poichè il moto delle nostre particelle avviene nel piano, l'annullarsi della componente radiale della velocità non implica l'arresto della particella che deve continuare a mantenere il suo moto radiale, in ossequio alla conservazione del momento angolare. In forza di ciò la particella nello spazio si muove lungo una traiettoria che tende ad avvolgersi asintoticamente attorno ad una circonferenza di raggio r_1 e l'angolo spazzato dalla quantità di moto (l'angolo di deflessione) tende a $-\infty$. A questo fenomeno si dà il nome di *spiralizzazione* e corrisponde alla cattura operata dall'interazione di una particella che inizialmente si trovava a distanza infinita dal suo centro. Il moto della particella risulta comunque instabile ed una sua lieve perturbazione determina il definitivo allontanamento dalla traiettoria imperturbata.

Per potenziali attrattivi caratterizzati da un forte gradiente in certe regioni dello spazio, come ci si aspetta lo siano i potenziali idonei a descrivere le interazioni in fisica nucleare, il fenomeno della spiralizzazione è tutt'altro che raro e al di sotto di una certa energia critica E_s esiste sempre un valore di L in corrispondenza al quale si manifesta.

Esercizi

- Nel problema della diffusione di una particella di massa m dal potenziale di Saxon-Woods:

$$V(r) = -V_0 \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{a}}}, \quad (2.21)$$

supposto $\frac{R}{a} \gg 1$, si dia una stima del valore E_s dell'energia al quale scompare il fenomeno della spiralizzazione.

- Come si comporta la funzione di deflessione in un intorno del valore del momento angolare corrispondente alla spiralizzazione?
-

2.5 Sezione d'Urto Classica

Per una particella classica diffusa da un potenziale centrale $V(r)$ si è visto come, fissata l'energia ed il momento angolare della particella, sia possibile determinare l'angolo di deflessione. Se l'angolo di deflessione risulta compreso fra 0 e π , come si verifica per potenziali completamente repulsivi, esso coincide con l'angolo di diffusione al quale viene osservata la particella, ma nel caso generale esso può essere negativo e risultare inferiormente illimitato.

Le particelle che sono state deflesse di un angolo Θ compreso fra $-\pi$ e π saranno osservate diffuse ad un angolo $\theta = |\Theta|$, e quelle che sono state deflesse di un angolo compreso fra $-(2k-1)\pi$ e $-(2k+1)\pi$, con k intero, si comportano ai fini dell'osservazione come quelle che sono state deflesse di un angolo compreso fra $-\pi$ e π (hanno solo fatto k giri, in senso orario attorno al centro diffusore). Ne segue che la relazione che lega l'angolo di diffusione all'angolo di deflessione è in tutta generalità data da

$$\theta(L) = \arccos[\cos \Theta(L)]. \quad (2.22)$$

In un processo di diffusione di un fascio di flusso J da un potenziale centrale si conosce solo l'energia iniziale delle particelle incidenti ma non si conosce, se non in senso statistico, il momento angolare delle singole particelle del fascio. Se il fascio è omogeneo ed illimitato il numero $dn(L)$ di particelle che per unità di tempo vengono lanciate contro il bersaglio con modulo del momento angolare compreso fra L e $L + dL$ sarà pari al numero di particelle che per unità di tempo attraversano, a distanza infinita dal bersaglio, una superficie disposta perpendicolarmente alla direzione del fascio ad una distanza dall'asse di simmetria del problema compresa fra b e $b + db$ con

$$b = \frac{L}{p}, \quad (2.23)$$

e risulterà dato da

$$dn(L) = J2\pi b db = J2\pi \frac{L dL}{p^2} \quad (2.24)$$

Per la simmetria del problema, tutte queste particelle saranno diffuse entro l'angolo solido definito dalle due superfici coniche, con asse lungo l'asse di simmetria, di apertura $\theta(L)$ e $\theta(L) + d\theta(L)$ con

$$d\theta(L) = \frac{d\theta(L)}{dL} dL \quad (2.25)$$

di ampiezza

$$d\Omega = 2\pi \sin \theta(L) |d\theta(L)|. \quad (2.26)$$

Ricordando la definizione di sezione d'urto differenziale, utilizzando la (2.24) e la (2.25), e supponendo che esista la funzione inversa $L(\theta)$ di $\theta(L)$, si ottiene:

$$\sigma(\theta) = \frac{L(\theta)}{p^2 \sin \theta} \left| \frac{dL(\theta)}{d\theta} \right|. \quad (2.27)$$

L'operazione di riduzione dell'angolo di deflessione all'angolo di diffusione è comunque tale da far sì che, tranne casi particolarmente fortunati, la funzione $\theta(L)$ non risulti invertibile nell'intero intervallo dei valori reali e positivi di L . La (2.27) è pertanto applicabile solo in questi, pochi, casi fortunati. La definizione nel caso generale è più complicata e nel seguito ci si limiterà a darla nel caso in cui la funzione di deflessione risulti inferiormente limitata.

In questo caso la funzione $\theta(L)$ è monodroma, e pertanto invertibile all'interno di un insieme finito di n intervalli $L_{i-1} \leq L < L_i$, con $i = 1, \dots, n$, ove si sono indicati con L_1, \dots, L_{n-1} i valori di $L > 0$, ordinati in ordine crescente e tali che $\theta(L_i) = 0$, o $\theta(L_i) = \pi$ o $\left(\frac{d\theta(L)}{dL}\right)_{L_i} = 0$, e si è posto $L_0 = 0$ e $L_n = \infty$.

Indicata con $L_i(\theta)$ la funzione inversa di $\theta(L)$ entro l' i -esimo intervallo, i valori di L appartenenti all' i -esimo intervallo contribuiranno al valore della sezione d'urto classica con un contributo del tipo (2.27) a tutti gli angoli che soddisfano alla condizione $\theta_{im} \leq \theta \leq \theta_{iM}$, ove con θ_{im} e θ_{iM} si sono indicati, rispettivamente, gli estremi inferiori e superiori di $\theta(l)$ nell' i -esimo intervallo. In formule, posto:

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 \\ 1 & \text{per } x \geq 0 \end{cases}$$

risulta:

$$\sigma(\theta) = \sum_{i=1}^n \frac{L_i(\theta)}{p^2 \sin \theta} \left| \frac{dL_i(\theta)}{d\theta} \right| H(\theta - \theta_{im}) H(\theta_{iM} - \theta). \quad (2.28)$$

Nel caso in cui la funzione di deflessione non sia inferiormente limitata, caso tutt'altro che poco frequente, il numero degli intervalli di momento angolare che devono essere presi in considerazione diventa infinito e la cosa si complica ulteriormente da un punto di vista pratico.

È interessante notare come, per la diffusione da un potenziale centrale, sia stato possibile ottenere un'espressione formale della sezione d'urto differenziale dipendente esclusivamente dalla funzione di deflessione, che, pertanto, in Meccanica Classica, risulta essere la grandezza che governa il processo di diffusione. Il potenziale determina le proprietà della funzione di deflessione ma non compare esplicitamente nell'espressione della sezione d'urto.

Già così come ci si è limitati a presentarla, la sezione d'urto classica appare come un oggetto non trivialmente calcolabile se non nei pochi casi in cui possiamo sperare di condurre a termine tutti i passaggi necessari con tecniche puramente analitiche.

Il calcolo numerico della sezione d'urto classica secondo lo schema che è stato delineato presuppone:

- per ogni fissato valore di L il calcolo del punto di inversione del moto più lontano dall'origine (*ovvero la soluzione di un'equazione trascendente*);
- l'integrazione numerica dell'integrale che definisce la funzione di deflessione che risulta illimitato e con una singolarità, sia pur integrabile, all'estremo inferiore (*non tutte le tecniche di integrazione numerica apprezzano le singolarità, ancorchè integrabili*);
- la ripetizione dei calcoli precedenti per un insieme di valori di L sufficientemente ampio da consentire l'individuazione degli estremi degli intervalli in cui $\theta(L)$ è invertibile;
- l'individuazione, per ogni fissato angolo, degli intervalli che contribuiscono alla sezione d'urto e del corrispondente valore di L in cui deve essere calcolate la derivata $\frac{d\theta(L)}{dL}$;
- la somma su tutti i contributi;

- la ripetizione gli ultimi due punti per un numero di angoli sufficiente per apprezzare l'andamento della sezione d'urto.

Come vedremo in seguito, calcolare la sezione d'urto per la diffusione da un potenziale centrale in Meccanica Quantistica è enormemente più facile.

Per un certo numero di casi, interessanti per il loro contenuto fisico, è possibile completare tutto lo schema di calcolo della sezione d'urto classica senza far ricorso a tecniche numeriche. L'analisi di alcuni di questi casi ci permetterà di approfondire il significato di un calcolo di sezione d'urto classica.

Prima di procedere ci riserviamo di effettuare, per futura comodità, una trasformazione di scala sulle grandezze che compaiono nella definizione della funzione di deflessione e conseguentemente nella definizione di sezione d'urto: porremo $L = \lambda \hbar$ e $p = k \hbar$, ovvero misureremo sia L che p in unità di \hbar . Per consistenza dimensionale λ risulterà un numero puro mentre k avrà le dimensioni dell'inverso di una lunghezza. Nonostante la comparsa di \hbar le relazioni che continuiamo a scrivere sono genuinamente classiche e ribadiamo che la trasformazione effettuata implica solamente una trasformazione di scala.

È immediato verificare che nelle nuove unità la (2.19) diviene:

$$\begin{aligned}\Theta(\lambda) &= \pi - 2 \int_{r_1}^{\infty} \frac{\lambda}{kr^2 \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{\lambda^2}{k^2 r^2}}} dr \\ &= \pi - 2 \int_{\rho_1}^{\infty} \frac{\lambda}{\rho^2 \sqrt{1 - \frac{V}{E} - \frac{\lambda^2}{\rho^2}}} d\rho,\end{aligned}\quad (2.29)$$

ove nell'ultima equazione si è posto $\rho = kr$, mentre la (2.27) diviene

$$\sigma(\theta) = \frac{\lambda(\theta)}{k^2 \sin \theta} \left| \frac{d\lambda(\theta)}{d\theta} \right|. \quad (2.30)$$

2.5.1 Diffusione da una Sfera Impenetrabile

Consideriamo il potenziale:

$$\frac{V(r)}{E} = \begin{cases} \infty & \text{per } r < R \\ 0 & \text{per } r \geq R \end{cases}$$

Il punto di inversione del moto risulta tale che:

$$\rho_1 = kr_1 = \begin{cases} kR & \text{per } \lambda < kR \\ \lambda & \text{per } \lambda \geq kR \end{cases}$$

Ricordando che

$$\int \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} dx = \arctan \sqrt{x^2-1} = \arccos\left(\frac{1}{x}\right),$$

è immediato verificare che risulta:

$$\Theta(\lambda) = \begin{cases} 2 \arccos \frac{\lambda}{kR} & \text{per } \lambda < kR \\ 0 & \text{per } \lambda \geq kR \end{cases}$$

Poichè $\Theta(\lambda)$ è una funzione monotona decrescente non negativa, l'angolo di deflessione coincide con l'angolo di diffusione e $\theta(\lambda)$ è invertibile per $\lambda \leq kR$ (le particelle con $\lambda > kR$ non contribuiscono alla diffusione non essendo deflesse) risultando:

$$\lambda(\theta) = kR \cos \frac{\theta}{2}.$$

La sezione d'urto differenziale è data da:

$$\sigma(\theta) = \frac{R^2}{4}.$$

La sezione d'urto differenziale risulta isotropa, e non dipendente dall'energia, e la corrispondente sezione d'urto integrale, come ci si poteva attendere, risulta eguale a πR^2 .

Esercizio

Riottenere il risultato precedente utilizzando tecniche geometriche (si dimostri preliminarmente che la particella incidente rimbalza sulla superficie della sfera impenetrabile con un angolo di riflessione uguale all'angolo di incidenza).

2.5.2 Diffusione da una Sfera Omogenea Attrattiva

Consideriamo il potenziale:

$$\frac{V(r)}{E} = \begin{cases} -\frac{V_0}{E} & \text{per } r < R \\ 0 & \text{per } r \geq R \end{cases}$$

Il punto di inversione del moto risulta tale che:

$$\rho_1 = kr_1 = \begin{cases} \frac{\lambda}{N} & \text{per } \lambda < kR \\ \lambda & \text{per } \lambda \geq kR \end{cases}$$

ove si è posto $N = \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}$.

Per $\lambda \geq kR$, come nel caso precedente la funzione di deflessione risulta nulla, e con semplici passaggi, per $\lambda < kR$ si ottiene:

$$\Theta(\lambda) = \pi - 2 \left[\int_1^{\frac{kR}{\lambda}} f(x) dx + \int_{\frac{kR}{\lambda}}^{\infty} f(x) dx \right],$$

ove si è posto $K = Nk$ e $f(x) = [x\sqrt{x^2 - 1}]^{-1}$. Integrando si ottiene:

$$\Theta(\lambda) = -2 \left[\arccos \frac{\lambda}{KR} - \arccos \frac{\lambda}{kR} \right].$$

È immediato verificare che la funzione di deflessione risulta essere una funzione monotona decrescente di λ nell'intervallo che ci interessa e che il suo valore minimo, a $\lambda = kR$, è $-2 \arccos \frac{1}{N}$. In considerazione di ciò risulta $\theta(\lambda) = -\Theta(\lambda)$ e $\theta(\lambda)$ è invertibile per $0 \leq \lambda \leq kR$. Con algebra triviale si ottiene:

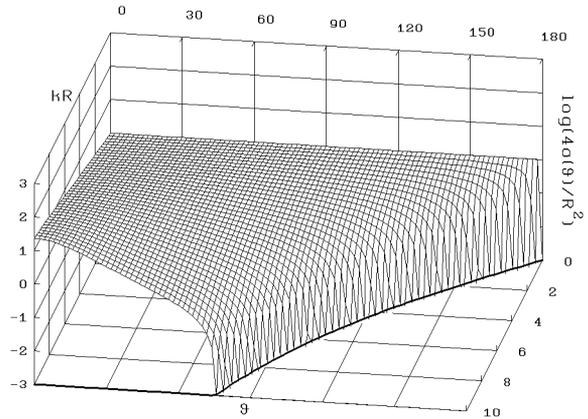
$$\lambda^2(\theta) = \frac{K^2 R^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}}{1 - 2N \cos \frac{\theta}{2} + N^2},$$

e la sezione d'urto differenziale è data da:

$$\sigma(\theta) = \frac{N^2 R^2 (N \cos \frac{\theta}{2} - 1)(N - \cos \frac{\theta}{2})}{4 \cos \frac{\theta}{2} (1 - 2N \cos \frac{\theta}{2} + N^2)^2}.$$

Diversamente dal caso precedente la sezione d'urto differenziale risulta dipendente dall'angolo di diffusione e dipendente dall'energia tramite il termine N . Anche in questo caso la sezione d'urto integrale è eguale a πR^2 .

Il comportamento della sezione d'urto differenziale per la diffusione da una sfera omogenea attrattiva al variare dell'energia è illustrato nella figura a fianco, dove si è considerata la diffusione di una particella di massa pari all'unità di massa atomica da un potenziale di raggio $R = 5$ Fermi e di profondità $V_0 = 50$ MeV. Per facilitare il confronto del risultato classico con il corrispondente risultato quantistico, che sarà discusso nel seguito, si è preferito rappresentare la dipendenza della distribuzione angolare da kR piuttosto che dall'energia.



È interessante osservare che la sezione d'urto differenziale, come si può facilmente dimostrare a partire dalla sua espressione analitica, per piccoli valori di kR si comporta esattamente come la sezione d'urto differenziale per la diffusione da una sfera impenetrabile.

Esercizi

- Riottenere il risultato precedente utilizzando tecniche geometriche (si dimostri preliminarmente che la particella penetrando entro la sfera rispetta una legge del tipo $\frac{\sin i}{\sin r} = N$, ove si sono indicati con i e r , rispettivamente, l'angolo di incidenza e l'angolo di *rifrazione*).
 - Ripetere il calcolo precedente per la diffusione da una sfera omogenea repulsiva.
-

2.5.3 Diffusione da un Potenziale Coulombiano

Si consideri il potenziale $V(r) = \frac{Z_a Z_A e^2}{r}$ e si ponga $\frac{V(r)}{E} = \frac{2\eta}{\rho}$ (il parametro η è denominato *parametro di Sommerfeld* e risulta dato da $\eta = \frac{m Z_a Z_A e^2}{\hbar^2 k}$). Il punto di inversione del moto risulta tale che:

$$\rho_1 = \eta + \sqrt{\eta^2 + \lambda^2}.$$

Ricordando che

$$\int \frac{1}{x\sqrt{x^2 - 2ax - 1}} dx = -\arctan \frac{ax + 1}{\sqrt{x^2 - 2ax - 1}},$$

è immediato verificare che risulta:

$$\Theta(\lambda) = 2 \arctan \frac{\eta}{\lambda}.$$

L'angolo di diffusione coincide con l'angolo di deflessione o con il suo opposto a seconda che l'interazione Coulombiana sia repulsiva o attrattiva. In entrambi i casi $\theta(\lambda)$ è invertibile e si ottiene

$$\lambda(\theta) = |\eta| \cot \frac{\theta}{2},$$

e alla fine

$$\sigma(\theta) = \left[\frac{\eta^2}{4k^2 \sin^2 \frac{\theta}{2}} \right]^2,$$

o ripristinando le notazioni più convenzionali

$$\sigma(\theta) = \left[\frac{Z_a Z_A e^2}{4E} \right]^2 \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}},$$

che coincide con la nota espressione della sezione d'urto di Rutherford. La sezione d'urto di Rutherford presenta una singolarità nell'origine tale da rendere divergente l'integrale della stessa su tutto l'angolo solido e, di conseguenza, la sezione d'urto integrale è infinita. La divergenza della sezione d'urto integrale è connessa alla natura a lungo raggio dell'interazione Coulombiana che fa sì che l'angolo di deflessione tenda a zero solo come $\frac{1}{\lambda}$ per λ tendente all'infinito e la decrescita risulta troppo lenta per assicurare la convergenza della sezione d'urto integrale.

2.6 Singolarità della Sezione d'Urto Classica

La sezione d'urto per la diffusione da un potenziale Coulombiano presenta una singolarità per $\theta = 0$ e tale singolarità è stata attribuita al comportamento del potenziale a grandi distanze. È lecito domandarsi se esistano altre situazioni che determinano la comparsa di singolarità nella sezione d'urto classica. Osservando la forma della sezione d'urto è immediato convincersi che possono causare la comparsa di singolarità o l'annullarsi, non compensato dall'annullarsi degli altri termini, del termine $\sin \theta$ che compare al denominatore, o la singolarità del termine $d\lambda/d\theta$.

Nel primo caso la singolarità comparirà a $\theta = 0$ o a $\theta = \pi$ e nel secondo caso all'angolo in cui $d\lambda/d\theta = 0$; i fenomeni associati a tali singolarità sono, rispettivamente, denominati *gloria* e *arcobaleno*.

2.6.1 Gloria

La prima registrazione dell'osservazione del fenomeno della diffusione gloria sembra sia attribuibile al capitano spagnolo Antonio de Ulloa, che, raggiunta intorno al 1735 la vetta di una montagna sulle Ande, ebbe la ventura di osservare la sua ombra, assieme a quella di suoi compagni, proiettata su delle nuvole. Antonio de Ulloa constatò che l'ombra della sua testa era circondata da una regione fortemente illuminata mentre la testa dei compagni ne era priva. La sensazione di beata glorificazione provata dall'Ulloa fu immediatamente vanificata dal fatto che tutti i compagni dichiaravano di vedere anche loro l'aureola, ma solo attorno alla loro testa. Il fenomeno osservato dall'Ulloa, e denominato per le sue caratteristiche diffusione gloria, è attribuibile ad una anomala crescita all'indietro, caratteristica delle situazioni in cui il fenomeno si manifesta, della sezione d'urto per la diffusione della luce da parte delle goccioline d'acqua che compongono le nuvole. Diversamente da come in un primo tempo si era pensato, questo fenomeno non è riconducibile all'annullarsi del termine $\sin \theta$ in una descrizione classica, o meglio geometrica, del processo, ma è correttamente descritto solo nell'ambito di una trattazione ondulatoria.

Senza dover salire su montagne e dover aspettare che si verifichino le condizioni che permettono alla nostra testa di proiettare la sua ombra su delle nuvole, per osservare una falsa diffusione gloria, la vera diffusione gloria può essere più semplicemente osservata di notte nei catarifrangenti di cui sono dotati i veicoli e i paracarri. La luce diffusa da questi sistemi risulta infatti fortemente concentrata all'indietro, in corrispondenza ad un angolo di diffusione di π .

Si osservi che la presenza del fattore $\sin \theta$ nell'elemento d'angolo solido fa sì che la singolarità della sezione d'urto corrispondente alla diffusione gloria sia normalmente integrabile e non causi divergenze della sezione d'urto integrale. La situazione che si presenta nella diffusione Coulombiana è resa patologica dal fatto che alla singolarità tipica della diffusione gloria si aggiungono le singolarità per $\theta \rightarrow 0$ degli altri fattori.

2.6.2 Arcobaleno

Diversamente da quanto si verifica per la diffusione gloria la singolarità che compare nella sezione d'urto classica in corrispondenza ad un massimo, o minimo, relativo della

funzione di deflessione è proprio responsabile delle principali caratteristiche del fenomeno dell'arcobaleno.

Indicando con λ_A il valore del momento angolare in corrispondenza al quale $\frac{d\theta}{d\lambda} = 0$ e con θ_A l'angolo di diffusione corrispondente, in un intorno di λ_A risulta

$$\theta(\lambda) \simeq \theta_A + \theta_A'' \frac{(\lambda - \lambda_A)^2}{2!}. \quad (2.31)$$

Supposto $\theta_A'' > 0$, l'intorno di λ_A considerato contribuisce alla diffusione ad angoli maggiori di θ_A con i momenti angolari

$$\lambda_{1,2} \simeq \lambda_A \pm \sqrt{\frac{2(\theta - \theta_A)}{\theta_A''}}. \quad (2.32)$$

e non contribuisce alla diffusione ad angoli minori di θ_A .

I singoli contributi alla sezione d'urto risultano essere:

$$\sigma_{1,2}(\theta) \simeq \frac{1}{k^2 \sin \theta} \left[\frac{\lambda_A}{\sqrt{2\theta_A''(\theta - \theta_A)}} \pm \frac{1}{\theta_A''} \right] \quad (2.33)$$

per un contributo totale alla sezione d'urto pari al doppio del primo termine nel membro di destra.

Esercizio

Si studino le caratteristiche della funzione di deflessione per la diffusione da una sfera omogenea attrattiva la cui superficie non investita direttamente dal fascio è stata resa perfettamente riflettente. Indicate con V_0 e con E , rispettivamente, la profondità del potenziale e l'energia delle particelle incidenti, e posto $N = \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}$ si dimostri che:

- per $N < 2$ si manifesta il fenomeno dell'arcobaleno;
- per $\sqrt{2} < N < 2$ si manifesta il fenomeno della diffusione gloria all'indietro.

Per $N = 1.342$ (pari all'indice di rifrazione dell'acqua) si calcoli l'angolo di diffusione al quale si manifesta l'arcobaleno.

3 Processi d'Urto in Meccanica Quantistica

3.1 Introduzione

Un processo d'urto coinvolge un certo numero di particelle inizialmente ripartite fra un proiettile ed un bersaglio in modo tale da formare i sistemi legati a e A . I sistemi a e A , non interagenti, sono descritti, rispettivamente, dagli stati $|\Phi_a\rangle$ e $|\Phi_A\rangle$, autostati degli Hamiltoniani interni H_a e H_A corrispondenti agli autovalori ϵ_a e ϵ_A :

$$H_a |\Phi_a\rangle = \epsilon_a |\Phi_a\rangle \quad (3.2)$$

e

$$H_A |\Phi_A\rangle = \epsilon_A |\Phi_A\rangle. \quad (3.3)$$

Indicata con E_a l'energia con cui a viene lanciato dall'acceleratore contro A , che supponiamo inizialmente fermo nel sistema di riferimento del laboratorio, l'energia totale E_T a disposizione del sistema risulta:

$$E_T = E_a + \epsilon_a + \epsilon_A. \quad (3.4)$$

Indicato con H l'Hamiltoniano totale, il sistema è globalmente descritto da uno stato $|\Psi\rangle$ autostato di H corrispondente all'autovalore E_T

$$H |\Psi\rangle = E_T |\Psi\rangle \quad (3.5)$$

e di conseguenza la trattazione di un problema di collisione implica l'analisi delle soluzioni di quest'ultima equazione.

Si osservi che la (3.2) e la (3.3) non definiscono necessariamente in modo univoco gli stati $|\Phi_a\rangle$ e $|\Phi_A\rangle$, basti ricordare che il momento angolare totale di ogni sistema isolato si conserva e di conseguenza, se il momento angolare totale non è nullo, esistono autostati corrispondenti al medesimo valore dell'energia ma a diversi valori della proiezione del momento angolare totale lungo un asse prefissato. Analogamente la (3.5) non definisce in modo univoco uno stato $|\Psi\rangle$, basti ricordare che all'energia totale E_T prefissata le N_a particelle che compongono a e le N_A particelle che compongono A potrebbero essere state inizialmente ripartite fra due, o più, nuclei diversi da a e A , o essere in stati corrispondenti a autostati di H_a e/o H_A diversi da $|\Phi_a\rangle$ e/o $|\Phi_A\rangle$, o essere comunque state lanciate le une verso le altre da diverse direzioni dello spazio.

Risulta evidente che la soluzione della (3.5) idonea a descrivere un processo di collisione dovrà essere determinata imponendo alla stessa di soddisfare alle condizioni fisiche con cui viene realizzato il processo che si vuole studiare.

3.2 Diffusione di due Particelle Puntiformi

Poichè le complicazioni connesse alla struttura interna di a e A sono indipendenti dalle complicazioni legate alla definizione delle condizioni che permettono di determinare la soluzione dell'equazione di Schrödinger idonea a descrivere un processo di diffusione, risulta conveniente, in un primo momento, supporre le particelle a e A puntiformi e prive di momento angolare intrinseco. Il sistema in questo caso sarà semplicemente descritto da un Hamiltoniano dato dalla somma delle energie cinetiche delle due particelle e della loro energia potenziale:

$$H = \frac{p_a^2}{2m_a} + \frac{p_A^2}{2m_A} + V. \quad (3.6)$$

Posto:

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_a - \mathbf{p}_A \quad (3.7)$$

e

$$\mathbf{P} = \frac{m_a \mathbf{p}_a + m_A \mathbf{p}_A}{m_a + m_A}, \quad (3.8)$$

l'equazione di Schrödinger in rappresentazione coordinata può essere scritta nella forma:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_a\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (3.9)$$

ove si è posto

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}_a - \mathbf{r}_A, \quad (3.10)$$

$$\mathbf{R} = \frac{m_a\mathbf{r}_a + m_A\mathbf{r}_A}{m_a + m_A}, \quad (3.11)$$

$$M = m_a + m_A, \quad m = \frac{m_a m_A}{m_a + m_A}, \quad (3.12)$$

si è supposto che l'interazione dipenda solo dalla distanza relativa delle due particelle e si è utilizzata l'eguaglianza di E_T a E_a . La soluzione $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ può essere scritta nella forma

$$\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \phi(\mathbf{R})\psi(\mathbf{r}) \quad (3.13)$$

con

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_{\mathbf{R}}^2\phi(\mathbf{R}) = E_{cm}\phi(\mathbf{R}), \quad (3.14)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_{\mathbf{r}}^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (3.15)$$

e

$$E_a = E_{cm} + E. \quad (3.16)$$

La (3.14) coincide con l'equazione di Schrödinger di una particella libera di massa pari alla massa totale del sistema e ponendo $E_{cm} = \frac{M_A}{M_A + M_a}E_a$ descrive il moto del centro di massa del sistema, mentre la (3.15) risulta essere l'equazione di Schrödinger di una particella di massa eguale alla massa ridotta del sistema e di energia pari all'energia nel sistema di riferimento del centro di massa.

La soluzione della (3.14) idonea a descrivere il processo di diffusione sarà, a meno di una inessenziale costante di normalizzazione:

$$\phi(\mathbf{R}) \propto e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} \quad (3.17)$$

con $\mathbf{K} = \mathbf{P}/\hbar$, ove \mathbf{P} indica la quantità di moto, costante, del centro di massa del sistema. Il contributo di $\phi(\mathbf{R})$ alla funzione d'onda totale è ovviamente irrilevante, trattandosi di un puro fattore di fase, e può essere ignorato.

L'unica equazione che contiene informazioni sulla dinamica del processo risulta pertanto essere la (3.15) e alle soluzioni di questa equazione andranno imposte le condizioni al contorno appropriate.

In un processo d'urto, a grandi distanze dalla regione di interazione, ci aspettiamo che la funzione d'onda descriva le particelle incidenti, che non hanno ancora interagito, e le particelle che, diffuse dall'interazione, emergono radialmente dalla regione dell'interazione. Un comportamento asintotico appropriato a descrivere il processo di diffusione risulta pertanto essere:

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')\frac{e^{ikr}}{r}, \quad (3.18)$$

ove \mathbf{k} ha modulo $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e direzione $\hat{\mathbf{k}}$ eguale alla direzione delle particelle incidenti, e $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$.

Ricordando che la densità della corrente di probabilità associata ad una funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ è data da:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) = \text{Re}\left[\psi^* \frac{-i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}}{m}\psi\right] \quad (3.19)$$

è immediato riconoscere che al primo termine del membro di destra della (3.18) corrisponde un flusso, incidente, dato da:

$$\mathbf{J}_{\text{inc}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m}, \quad (3.20)$$

mentre al secondo termine, a meno di termini d'ordine superiore, corrisponde un flusso, diffuso, dato da:

$$\mathbf{J}_{\text{dif}}(\mathbf{r}) = \frac{|f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')|^2 \hbar \mathbf{k}'}{r^2 m}. \quad (3.21)$$

Indicati con (θ, ϕ) gli angoli di \mathbf{k}' in un riferimento avente come asse polare \mathbf{k} risulterà, dalla definizione della sezione d'urto differenziale:

$$\sigma(\theta, \phi) = \frac{J_{\text{dif}}(\hat{\mathbf{k}}'r)r^2}{J_{\text{inc}}} = |f(\theta, \phi)|^2. \quad (3.22)$$

Il problema della diffusione di due particelle puntiformi, interagenti tramite un potenziale, è così ricondotto al problema della diffusione di una particella di massa pari alla massa ridotta delle due particelle da parte di un centro di forza. La soluzione dell'equazione di Schrödinger appropriata a descrivere il processo di diffusione è definita dalla condizione al contorno (3.18) e la funzione che compare davanti al termine descrivente un'onda sferica uscente, denominata *ampiezza di diffusione*, è legata dalla relazione (3.22) alla sezione d'urto differenziale.

Al lettore più attento non sarà sfuggita la debolezza dei passaggi effettuati per ricavare il legame fra ampiezza di diffusione e sezione d'urto differenziale: si è arbitrariamente separato il calcolo del flusso incidente da quello del flusso diffuso. Il fatto è che, a rigore, la condizione al contorno che si è utilizzata non è idonea a descrivere correttamente le condizioni fisiche con le quali viene realizzato un processo di diffusione. Il fascio incidente, prodotto dall'acceleratore, e collimato dai sistemi che controllano la geometria del fascio, ha normalmente dimensioni macroscopiche rispetto alle dimensioni tipiche delle interazioni atomiche, nucleari o subnucleari, ma ha comunque un'estensione finita e non illimitata come il termine di onda piana che compare nella (3.18). Inoltre l'energia della particella incidente, per quanto ci si sforzi di far sì che sia ben determinata, non potrà mai essere *esattamente* misurata e di conseguenza la funzione d'onda che descrive il sistema non potrà essere una autofunzione dell'Hamiltoniano corrispondente ad un ben preciso valore dell'energia. La soluzione di questi problemi passa attraverso la costruzione di un pacchetto d'onda e lo studio della sua evoluzione temporale. La corretta trattazione del problema risulta non viziata da alcuna inconsistenza e, soprattutto, fornisce un legame fra sezione d'urto differenziale e ampiezza di diffusione in perfetto accordo con il risultato ottenuto con una trattazione viziata da gravi difetti formali, se si escludono i casi in cui le variazioni dell'ampiezza di diffusione al variare dell'energia sono significative entro l'intervallo dell'energia utilizzato per la costruzione del pacchetto d'onda.

3.3 Equazione Integrale per la Diffusione

Indicando con H_0 e con V , rispettivamente, gli operatori associati all'energia cinetica e all'energia potenziale e usando la notazione di Dirac, l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo può essere scritta nella forma:

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle, \quad (3.23)$$

o equivalentemente:

$$(H_0 - E) |\psi\rangle = V |\psi\rangle. \quad (3.24)$$

Indicata con $|\psi_{\text{inc}}\rangle$ una soluzione dell'equazione

$$(H_0 - E) |\psi_{\text{inc}}\rangle = 0, \quad (3.25)$$

cerchiamo una soluzione della (3.24) della forma:

$$|\psi\rangle = |\psi_{\text{inc}}\rangle + |\psi_{\text{dif}}\rangle. \quad (3.26)$$

Affinchè $|\psi\rangle$ sia soluzione della (3.24) dovrà risultare:

$$(H_0 - E) |\psi_{\text{dif}}\rangle = -V |\psi\rangle, \quad (3.27)$$

o, formalmente:

$$|\psi_{\text{dif}}\rangle = -(H_0 - E)^{-1} V |\psi\rangle. \quad (3.28)$$

Si osservi che la scrittura (3.28) è puramente formale, in quanto, esistendo soluzioni della (3.25), non esiste in realtà l'inverso di $(H_0 - E)$. La procedura che stiamo seguendo ci costringerà necessariamente ad affrontare un problema di divergenze quando tenteremo di maneggiare la (3.28).

Se supponiamo che la (3.23) sia l'equazione di Schrödinger per una particella di massa m che interagisce con un potenziale locale, ovvero tale che:

$$\langle \mathbf{r} | V | \mathbf{r}' \rangle = V(\mathbf{r}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'),$$

risulta semplice ricavare dalla (3.28) la rappresentazione coordinata della $|\psi_{\text{dif}}\rangle$. Moltiplicando la (3.28) per $\langle \mathbf{r} |$ si ottiene infatti:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{r} | \psi_{\text{dif}} \rangle &\equiv \psi_{\text{dif}}(\mathbf{r}) = - \langle \mathbf{r} | (H_0 - E)^{-1} V | \psi \rangle \\ &= - \int \langle \mathbf{r} | (H_0 - E)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle V(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (3.29)$$

e il problema viene ricondotto al calcolo dell'elemento di matrice in rappresentazione coordinata dell'operatore $(H_0 - E)^{-1}$. Poichè l'operatore $(H_0 - E)^{-1}$ è stato malamente definito non ci si può attendere che sia univocamente definita la sua rappresentazione coordinata; si può comunque dimostrare che, posto $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, due possibili definizioni conducono alle espressioni:

$$\begin{aligned} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \langle \mathbf{r} | (H_0 - E \mp i\epsilon)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle &= \frac{2m}{\hbar^2} G(\pm)(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \\ &= \frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (3.30)$$

Nota

Per dimostrare la (3.30) poniamo $\hat{\mathbf{p}} = \hbar \hat{\mathbf{k}}$, e quindi $H_0 = \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{k}}^2}{2m}$, $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, e definiamo

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | (\hat{\mathbf{k}}^2 - k^2)^{-1} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (3.31)$$

Ricordando che: indicato con \hat{A} un operatore, con $|a\rangle$ un suo autostato corrispondente all'autovalore a , e con $F(\hat{A})$ una generica funzione di \hat{A} , risulta

$$F(\hat{A}) |a\rangle = F(a) |a\rangle,$$

analogamente se indichiamo $|\mathbf{k}'\rangle$ un autostato di $\hat{\mathbf{k}}$ corrispondente all'autovalore \mathbf{k}' , risulterà

$$(\hat{\mathbf{k}}^2 - k^2)^{-1} |\mathbf{k}'\rangle = (k'^2 - k^2)^{-1} |\mathbf{k}'\rangle.$$

Inserendo pertanto nella (3.31) due completezze sugli autostati di $\hat{\mathbf{k}}$ si ottiene:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int \int \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}'' \rangle \langle \mathbf{k}'' | (k'^2 - k^2)^{-1} | \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}' | \mathbf{r}' \rangle d\mathbf{k}' d\mathbf{k}'' \quad (3.32)$$

Poichè $\langle \mathbf{k}'' | \mathbf{k}' \rangle = \delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}')$, e $\langle \mathbf{r} | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, la (3.31) si riduce immediatamente a:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{(k'^2 - k^2)} d\mathbf{k}'. \quad (3.33)$$

Utilizzando coordinate sferiche polari con asse polare avente la direzione di $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$, la (3.33) si può scrivere come:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = G(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|\cos\theta}}{(k'^2 - k^2)} k'^2 \sin\theta dk' d\theta d\phi \quad (3.34)$$

che, integrando sulle variabili angolari e riconoscendo che la funzione integranda residua è una funzione pari di k' , si riduce a:

$$\begin{aligned} G(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) &= -\frac{i}{(2\pi)^2 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{i \sin[k'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|]}{(k'^2 - k^2)} k' dk' \\ &= -\frac{i}{(2\pi)^2 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{(k'^2 - k^2)} k' dk', \end{aligned} \quad (3.35)$$

ove nell'ultima espressione la funzione integranda differisce dalla funzione integranda dell'espressione precedente solo per una funzione che, essendo dispari nella variabile di integrazione, dà un contributo nullo all'integrale.

Osservando la (3.35) si può apprezzare come sia stato ottenuto il risultato meritato: si cerca la rappresentazione coordinata di un operatore che non c'è e si ottiene un integrale che non c'è. La funzione integranda che compare nella (3.35) è infatti caratterizzata dalla presenza di due singolarità non integrabili lungo il cammino di integrazione. Una possibile cura per l'inconveniente consiste nel sostituire k con $k \pm i\epsilon$ e nel definire scambiando, abusivamente, il limite con l'integrazione

$$G^{(\pm)}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} -\frac{i}{(2\pi)^2 |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{[k' + (k \pm i\epsilon)][k' - (k \pm i\epsilon)]} k' dk'. \quad (3.36)$$

L'integrale che compare in (3.36) può essere facilmente calcolato completando il cammino di integrazione con una semicirconferenza di raggio infinito nel semipiano superiore della variabile complessa k' e, poichè la funzione integranda soddisfa alle condizioni del Lemma di Jordan, applicando il teorema dei residui. In questo modo risulta immediato ottenere la (3.30).

Sostituendo la (3.30) nella (3.29) e ricordando la (3.26) si ottiene:

$$\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} - \frac{2m}{4\pi\hbar^2} \int \frac{e^{\pm ik'|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (3.37)$$

La (3.37) fornisce due soluzioni formali dell'equazione originaria. Si osservi che se si fossero usate diverse tecniche di regolarizzazione dell'integrale che compare nella (3.35) si sarebbero ottenute diverse soluzioni. Delle due soluzioni ottenute è immediato convincersi che solamente la $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ è idonea, avendo il corretto comportamento asintotico, a descrivere il processo di diffusione di una particella dal potenziale considerato.

Per ottenere il comportamento asintotico della (3.37) è sufficiente ricordare che per $r \gg r'$ vale:

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}-\mathbf{r}'| &= \sqrt{r^2 - 2\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}' + r'^2} \simeq r \sqrt{1 - 2\frac{\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'}{r}} \\ &\simeq r \left(1 - \frac{\hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}'}{r}\right) = r - \hat{\mathbf{r}}\cdot\mathbf{r}', \end{aligned} \quad (3.38)$$

che sostituita nella (3.37) porge

$$\psi^{(\pm)}(\mathbf{r}) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{e^{\pm ikr}}{r} \right], \quad (3.39)$$

ove si è posto:

$$f^{(\pm)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') \psi^{(\pm)}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.40)$$

con $\mathbf{k}' = k\hat{\mathbf{r}}$.

Se ne deduce che $\psi^{(+)}(\mathbf{r})$ ha il comportamento asintotico appropriato alla descrizione di un processo d'urto e $f^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ esprime la corrispondente ampiezza di diffusione.

Esercizi

- Dopo aver dimostrato che vale la proprietà

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(+)}(\mathbf{r}) = \psi_{-\mathbf{k}}^{(-)*}(\mathbf{r})$$

si discuta il significato fisico di $\psi_{\mathbf{k}}^{(-)}(\mathbf{r})$.

- Di quale equazione differenziale risulta essere soluzione la funzione $G^{(\pm)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$?

Per concludere, si osservi che l'equazione integrale ottenuta è equivalente all'equazione di Schrödinger da cui si è partiti con in più la specificazione di opportune condizioni al contorno. È noto che la soluzione del problema agli autovalori per l'equazione di Schrödinger in corrispondenza alla parte continua dello spettro ci conduce, di solito, alla constatazione che gli autovalori sono degeneri. Di conseguenza la specificazione dell'autovalore non è sufficiente alla determinazione di una corrispondente autofunzione. L'autofunzione che ci interessa viene determinata specificando le caratteristiche del problema fisico che si vuole descrivere. L'ambiguità nella definizione della funzione $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ è proprio connessa alla degenerazione del problema agli autovalori nei problemi d'urto; che questa degenerazione esista è reso evidente dal fatto che, specificata l'energia, possiamo ancora lanciare da una infinità di direzioni il nostro proiettile verso la regione dell'interazione e pertanto la degenerazione deve essere almeno pari al *numero* delle direzioni nello spazio.

3.4 Approssimazione di Born per l'Ampiezza di Diffusione

Sia l'equazione (3.37) che definisce la funzione d'onda che la (3.40) che definisce l'ampiezza di diffusione non rappresentano una scorciatoia, rispetto all'equazione di Schrödinger originaria, per risolvere esattamente un problema d'urto, ma possono essere utilizzate per ottenere delle espressioni approssimate per le grandezze che ci interessano.

Se, in particolare, si suppone che il processo di diffusione interessi solo una piccola frazione delle particelle incidenti (ovvero se, su una scala opportuna, si può ritenere l'interazione *piccola*) si può, in prima approssimazione porre:

$$\psi^{(+)}(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \quad (3.41)$$

che inserita nella (3.40) fornisce per l'ampiezza di diffusione la stima:

$$f_B^{(+)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = -\frac{1}{4\pi} \frac{2m}{\hbar^2} \int e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}'} V(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (3.42)$$

che viene solitamente chiamata: *approssimazione di Born per le onde piane* (approssimazione di Born perchè è un'approssimazione del primo ordine nell'interazione, delle onde piane perchè basata sull'approssimazione della funzione d'onda con un'onda piana) o più brevemente: *approssimazione di Born*

Si rimanda ai trattati specialistici la discussione dei limiti di validità dell'approssimazione di Born, ricordiamo solo che il risultato che si ottiene è quello che, intuitivamente ci si

aspetta: la (3.42) fornisce una ragionevole approssimazione o per potenziali deboli o per alte energie. Descrivendo la funzione d'onda con un'onda piana stiamo supponendo che si conservi la quantità di moto della particella. Ragionando classicamente la variazione della quantità di moto è data da

$$\Delta \mathbf{p} = \int \mathbf{F} dt,$$

e di conseguenza $\Delta \mathbf{p}$ risulterà piccola o quando \mathbf{F} è piccola o quando la particella è tanto veloce da attraversare la regione dell'interazione in un tempo piccolo. In Meccanica Quantistica succede lo stesso.

Si osservi che in approssimazione di Born l'ampiezza di diffusione dipende solo dalla quantità $\mathbf{k} - \mathbf{k}' = \frac{\Delta \mathbf{p}}{\hbar} = \mathbf{q}$, che viene chiamato *momento trasferito*.

Esercizi

- Si dimostri che per potenziali centrali l'approssimazione di Born per l'ampiezza di diffusione può essere scritta nella forma

$$f_B(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = f_B(\theta) = -\frac{2m}{\hbar^2} \frac{1}{q} \int_0^\infty \sin(qr') V(r') r' dr', \quad (3.43)$$

con $q = 2k \sin \frac{\theta}{2}$.

- Si ricavi l'ampiezza di diffusione in approssimazione di Born per i seguenti potenziali centrali:

- a) $V(r) = \begin{cases} -V_0 & \text{per } r \leq R \\ 0 & \text{per } r > R \end{cases}$

- b) $V(r) = -V_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}$

- c) $V(r) = -V_0 e^{-\frac{r^2}{R^2}}$

- d) $V(r) = -V_0 \frac{\cosh \frac{R}{d} + 1}{\cosh \frac{R}{d} + \cosh \frac{r}{d}}$

- Discutere l'andamento delle sezioni d'urto differenziali ottenute utilizzando l'approssimazione di Born per i potenziali precedenti.
- Discutere il comportamento della sezione d'urto del potenziale b) per $\mu \rightarrow 0$.
- Discutere il comportamento della sezione d'urto del potenziale d) per $d \rightarrow 0$.

3.5 Sviluppo in Onde Parziali dell'Ampiezza di Diffusione

Se ci si limita a considerare un processo di diffusione da un potenziale centrale, anche in Meccanica Quantistica, così come in Meccanica Classica, il problema risulta notevolmente semplificato e la simmetria del problema consente di ridurlo essenzialmente ad un problema unidimensionale.

Il problema della diffusione di un fascio illimitato di particelle da un potenziale centrale ha infatti simmetria di rotazione rispetto ad un asse avente la direzione del fascio incidente e passante per il centro del potenziale, e di conseguenza la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ e l'ampiezza di diffusione $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, se scegliamo come asse polare l'asse di simmetria, sono indipendenti da ϕ .

Sviluppando ψ e f in serie di polinomi di Legendre, che ricordiamo costituiscono un insieme completo di funzioni ortogonali (ma non ortonormali²) per le funzioni di $x = \cos \theta$ a modulo quadro sommabile fra -1 e 1, si ottiene:

$$\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(r, \theta) = \sum_l \frac{y_l(r)}{r} P_l(\cos \theta) \quad (3.44)$$

²Ricordiamo che vale la proprietà: $\int_{-1}^{+1} P_l(x) P_{l'}(x) dx = \frac{2}{2l+1} \delta_{ll'}$.

e

$$f(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \equiv f(\theta) = \sum_l f_l P_l(\cos \theta). \quad (3.45)$$

I coefficienti $y_l(r)/r$ che compaiono nella (3.44) sono determinati dalla condizione che $\psi(\mathbf{r})$ sia soluzione dell'equazione di Schrödinger:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}). \quad (3.46)$$

La (3.44), separando nell'operatore $\hat{\mathbf{p}}^2/(2m)$ le variabili angolari dalla variabile radiale, può essere riscritta nella forma:

$$\left[\frac{\hat{p}_r^2}{2m} + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r) \right] \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r}), \quad (3.47)$$

con:

$$\hat{p}_r^2 = -i\hbar \left[\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r} \right] \quad (3.48)$$

e

$$\hat{l}^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]. \quad (3.49)$$

Sostituendo lo sviluppo (3.44) nella (3.47) e tenendo conto che:

$$\hat{l}^2 P_l(\cos \theta) = l(l+1)\hbar^2 P_l(\cos \theta), \quad (3.50)$$

si ottiene:

$$\left[\frac{d^2}{dr^2} + k_l^2(r) \right] y_l(r) = 0, \quad (3.51)$$

ove

$$k_l^2(r) = k^2 \left(1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{l(l+1)}{k^2 r^2} \right). \quad (3.52)$$

In completa analogia con la Meccanica Classica la soluzione dell'equazione di Schrödinger del problema tridimensionale è così ricondotta alla soluzione di un'equazione unidimensionale che coincide con l'equazione di Schrödinger di una particella sulla quale agisce un potenziale efficace dato dalla somma del potenziale originario e del potenziale centrifugo. Considerata la singolarità del potenziale centrifugo nell'origine, affinché la funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ sia normalizzabile, almeno in senso generalizzato, i coefficienti $y_l(r)$ dello sviluppo (3.44) devono essere soluzioni dell'equazione (3.51) tali che:

$$y_l(r) \xrightarrow[r \rightarrow 0]{} \alpha_l r^{l+1}, \quad (3.53)$$

ove il valore della costante moltiplicativa, per un problema di diffusione, è determinato dalla condizione:

$$\psi(\mathbf{r}) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} + f(\theta) \frac{e^{ikr}}{r}. \quad (3.54)$$

Per potenziali che tendono a 0 per r tendente all'infinito più rapidamente di $1/r$, si può dimostrare che esistono due soluzioni della (3.51), che indicheremo con $f_l^{(\pm)}(r)$, univocamente definite dalla condizione:

$$f_l^{(\pm)}(r) \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} e^{\pm ikr}. \quad (3.55)$$

Poichè le funzioni $f_l^{(\pm)}(r)$ sono linearmente indipendenti, esisteranno due coefficienti a_l e S_l tali che:

$$y_l(r) = a_l [f_l^{(-)}(r) e^{+i(l-1)\frac{\pi}{2}} + S_l f_l^{(+)}(r) e^{-i(l-1)\frac{\pi}{2}}]. \quad (3.56)$$

Ricordando che

$$\begin{aligned} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} &= e^{ikr \cos \theta} \\ &= \sum_l (2l+1) i^l j_l(kr) P_l(\cos \theta), \end{aligned} \quad (3.57)$$

ove con $j_l(kr)$ si è indicata la funzione Sferica di Bessel di prima specie e d'ordine l , e che

$$\begin{aligned} j_l(kr) &\xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\sin(kr - l\frac{\pi}{2})}{kr} \\ &= e^{-i\frac{\pi}{2}} \frac{e^{-ikr+i(l-1)\frac{\pi}{2}} + e^{ikr-i(l-1)\frac{\pi}{2}}}{2ikr}, \end{aligned} \quad (3.58)$$

identificando il comportamento asintotico della (3.44), con $y_l(r)$ espresso tramite la (3.56) con il comportamento asintotico della (3.54), con $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ sviluppato secondo la (3.57), poichè le funzioni $e^{\pm ikr}/r$ sono fra di loro linearmente indipendenti dovrà separatamente risultare:

$$\begin{aligned} \sum_l [a_l - (2l+1) \frac{e^{i(l-1)\frac{\pi}{2}}}{2ik}] P_l(\cos \theta) &= 0 \\ \sum_l [a_l S_l - (2l+1) \frac{e^{i(l-1)\frac{\pi}{2}}}{2ik}] P_l(\cos \theta) e^{-i(l-1)\frac{\pi}{2}} &= f(\theta). \end{aligned} \quad (3.59)$$

Funzioni Sferiche di Bessel

Le soluzioni dell'equazione differenziale:

$$z^2 w'' + 2z w' + [z^2 - n(n+1)] w = 0, \quad (3.60)$$

con $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, sono denominate funzioni Sferiche di Bessel.

Particolari soluzioni della (3.60) sono le funzioni Sferiche di Bessel di prima specie $j_n(z)$, di seconda specie $y_n(z)$ e di terza specie, rispettivamente di primo e di secondo tipo, $h_n^{(1,2)} = j_n(z) \pm i y_n(z)$.

Le funzioni Sferiche di Bessel di prima e di seconda specie sono definite rispettivamente dal loro comportamento nell'origine:

$$j_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} \frac{1}{1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n+1)} z^n \quad y_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow 0} -1 \cdot 3 \cdot 5 \dots (2n-1) z^{-n-1}, \quad (3.61)$$

e sono ottenibili utilizzando le formule di Rayleigh:

$$j_n(z) = z^n \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^n \frac{\sin z}{z} \quad y_n(z) = -z^n \left(-\frac{1}{z} \frac{d}{dz}\right)^n \frac{\cos z}{z}. \quad (3.62)$$

In particolare risulta

n	$j_n(z)$	$y_n(z)$
0	$\frac{\sin z}{z}$	$-\frac{\cos z}{z}$
1	$\frac{\sin z}{z^2} - \frac{\cos z}{z}$	$-\frac{\cos z}{z^2} - \frac{\sin z}{z}$

Indicata con $f_n(z)$ una generica combinazione lineare, con coefficienti non dipendenti da n , di funzioni Sferiche di Bessel di prima, seconda o terza specie, vale la relazioni di ricorrenza:

$$f_{n-1}(z) + f_{n+1}(z) = \frac{2n+1}{z} f_n(z) \quad (3.63)$$

e risulta inoltre:

$$\frac{n+1}{z} f_n(z) + \frac{d}{dz} f_n(z) = f_{n-1}(z), \quad (3.64)$$

e

$$\frac{n}{z}f_n(z) - \frac{d}{dz}f_n(z) = f_{n+1}(z). \quad (3.65)$$

Queste formule consentono di calcolare funzioni Sferiche di Bessel di ordine qualsiasi e le loro derivate a partire dalla conoscenza delle stesse funzioni per due ordini successivi. Si tenga comunque presente che, per problemi di stabilità numerica, le formule di ricorrenza non possono essere utilizzate in avanti, ovvero per n crescenti, per il calcolo della $j_n(z)$, e all'indietro, per n decrescenti, per le altre funzioni Sferiche di Bessel.

Il comportamento asintotico di $j_n(z)$, di $y_n(z)$ e di $h_n^{(1,2)}(z)$ è dato rispettivamente da:

$$j_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} \sin(z - n\frac{\pi}{2})/z, \quad (3.66)$$

$$y_n(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} (-1)^{n+1} \cos(z + n\frac{\pi}{2})/z \quad (3.67)$$

e

$$h_n^{(1,2)}(z) \xrightarrow{z \rightarrow \infty} e^{\pm i[z - (n+1)\frac{\pi}{2}]} / z. \quad (3.68)$$

Effettuando la trasformazione $W(z) = zw(z)$ la (3.60) si trasforma nella cosiddetta equazione di Riccati-Bessel

$$z^2 W'' + [z^2 - n(n+1)]W = 0, \quad (3.69)$$

le cui soluzioni sono immediatamente riconducibili alle funzioni Sferiche di Bessel.

È immediato riconoscere che l'equazione di Schrödinger radiale (3.51) per una particella libera, che si ottiene ponendo nella (3.52) $V(r) = 0$, operando la trasformazione $z = kr$ risulta identica all'equazione di Riccati-Bessel di ordine l . Di conseguenza la funzione d'onda radiale per una particella libera risulta, a meno di una costante di proporzionalità, data da

$$y_l(r) \propto kr j_l(kr). \quad (3.70)$$

Poichè i polinomi di Legendre sono fra di loro linearmente indipendenti devono essere identicamente nulli i coefficienti di $P_l(\cos \theta)$ della prima delle (3.59) e deve pertanto risultare:

$$a_l = (2l+1) \frac{e^{i(l-1)\frac{\pi}{2}}}{2ik}, \quad (3.71)$$

e

$$f(\theta) = \frac{i}{2k} \sum_l (2l+1)(1-S_l) P_l(\cos \theta). \quad (3.72)$$

Ne segue che, secondo la Meccanica Quantistica, l'ampiezza di diffusione da un potenziale centrale è esprimibile in una forma che dipende dalle peculiarità del potenziale solo tramite la quantità S_l , che chiameremo *funzione di diffusione*, che pertanto, in Meccanica Quantistica, ha il ruolo di condensare tutte le informazioni che si possono ottenere su un potenziale tramite esperienze di collisione. Ruolo equivalente a quello svolto, in Meccanica Classica, dalla funzione di deflessione.

Risulta immediato esprimere la S_l tramite le funzioni $f_l^{(\pm)}(r)$ e la soluzione $\phi_l(r)$ dell'equazione (3.51) definita dalla condizione:

$$\phi_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^{l+1}. \quad (3.73)$$

Poichè $\phi_l(r)$ e $y_l(r)$ sono soluzioni della medesima equazione differenziale che differiscono, al più per una costante moltiplicativa, risulta $W[\phi_l(r), y_l(r)] = 0$; esprimendo $y_l(r)$ tramite la (3.56), e ricordando che il Wronskiano è lineare in entrambe le funzioni, si ottiene:

$$e^{i(l-1)\frac{\pi}{2}} W[\phi_l(r), f_l^{(-)}(r)] + S_l W[\phi_l(r), f_l^{(+)}(r)] = 0, \quad (3.74)$$

da cui

$$S_l = e^{it\pi} \frac{W[\phi_l(r), f_l^{(-)}(r)]}{W[\phi_l(r), f_l^{(+)}(r)]}. \quad (3.75)$$

Questa relazione che lega S_l a tre particolari soluzioni dell'equazione (3.51) risulta particolarmente adatta al calcolo numerico della funzione di diffusione.

3.6 Proprietà della Funzione di Diffusione

Se il potenziale $V(r)$ è reale, $\phi_l(r)$ è reale ed inoltre $f_l^{(-)}(r) = f_l^{(+)*}(r)$; di conseguenza, considerata l'espressione (3.75) di S_l , risulta:

$$|S_l| = 1, \quad (3.76)$$

e pertanto S_l può essere scritta nella forma:

$$S_l = e^{2i\delta_l}, \quad (3.77)$$

con δ_l reale.

La quantità δ_l viene chiamata *sfasamento asintotico*. Il nome trae origine dal fatto che, utilizzando la (3.56) e la (3.71) risulta:

$$y_l(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{(2l+1)i^l e^{i\delta_l}}{k} \sin(kr - l\frac{\pi}{2} + \delta_l), \quad (3.78)$$

che evidenzia come la dipendenza da r della soluzione dell'equazione di Schrödinger radiale di una particella in presenza di un potenziale differisca dal comportamento asintotico della soluzione della stessa equazione in assenza del potenziale solo per la comparsa della fase δ_l .

Esercizio

Si dimostri che se k_l^2 è complesso non risulta più, in generale, vero che $|S_l| = 1$.

(suggerimento: si applichi il teorema del Wronskiano alle funzioni ϕ_l e ϕ_l^* , e si utilizzi la conoscenza del comportamento di ϕ_l nell'origine e all'infinito.)

Il fatto che $|S_l| = 1$ per potenziali reali, impedisce ovviamente a S_l di presentare zeri o poli per valori fisici di l , ovvero per i valori di l interi e non negativi. Ciò non è più vero se rimuoviamo le ipotesi di realtà di k_l^2 , ad esempio, prendendo in considerazione un potenziale, o un valore di l , o un valore di k complessi e continuiamo a definire S_l tramite la (3.75).

Questa estensione della definizione di S_l può sembrare stravagante, perchè ben sappiamo che in Meccanica Quantistica, così come in Meccanica Classica, le variabili dinamiche di un sistema, come il potenziale, l'energia ed il suo momento angolare devono essere quantità reali. La Meccanica Quantistica può imporre inoltre degli ulteriori limiti ai valori che queste variabili dinamiche possono assumere; sappiamo infatti che il quadrato del momento angolare può assumere solo i valori $l(l+1)\hbar^2$, con l intero e non negativo, e che sono possibili solo, al più, valori discreti per le energie negative. Ciò nonostante risulta a volte utile, perchè consente di ottenere una miglior comprensione dei fenomeni che vogliamo studiare, rimuovere queste limitazioni e domandarci cosa succede per valori *non-fisici* delle variabili dinamiche.

La funzione di diffusione S_l rappresenta un tipico esempio dell'interesse di operare un'estensione di questo tipo. Considerata la sua definizione, nulla ci impedisce da un punto di vista matematico, di considerare valori di E e di l non solo continui ma anche complessi.

Così facendo S_l diviene una funzione delle variabili complesse E e l di cui è possibile studiare le proprietà nel piano complesso.

La prima osservazione che è immediato fare è che ai valori di E negativi corrispondono valori di k complessi, e se poniamo

$$k = i\chi = i\sqrt{\frac{2m|E|}{\hbar^2}}, \quad (3.79)$$

la (3.55) diviene:

$$f_l^{(\pm)}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{\mp\chi r}. \quad (3.80)$$

Le $f_l^{(\pm)}(r)$ divengono pertanto, rispettivamente, la soluzione dell'equazione radiale di Schrödinger che tende a zero per r tendente all'infinito e una soluzione della stessa equazione che, nello stesso limite, diverge. Sappiamo che l'energia considerata è una delle energie possibili per il sistema solo se la corrispondente soluzione dell'equazione di Schrödinger risulta normalizzabile, il che, nel nostro caso, equivale a richiedere che la funzione d'onda si comporti nell'origine come r^{l+1} , ovvero come la ϕ_l definita dalla (3.73) e all'infinito come $e^{-\chi r}$, ma ciò è possibile solo se ϕ_l ed $f_l^{(+)}$ risultano proporzionali, ovvero se il loro Wronskiano è nullo. Va da sé che se ϕ_l è proporzionale a $f_l^{(+)}$ non può essere proporzionale a $f_l^{(-)}$ e si conseguenza S_l deve risultare singolare. Per una vasta classe di potenziali si può dimostrare che le singolarità di S_l , sia in funzione di l che in funzione di E , sono singolarità polari e se queste singolarità si manifestano in corrispondenza a valori fisici di l e di E rappresentano gli stati legati del sistema. Di conseguenza la quantità S_l , opportunamente generalizzata, contiene sia informazioni sulla parte continua dello spettro degli autovalori dell'energia, che consentono di trattare i processi di diffusione, che sulla parte discreta dello spettro, che si riferiscono a proprietà degli stati legati.

3.7 Sezioni d'Urto Parziali e Integrale

Dalla (3.72) è immediato ottenere per la sezione d'urto l'espressione:

$$\sigma(\theta) = |f(\theta)|^2 = \frac{1}{4k^2} \sum_{l, l'} (2l+1)(2l'+1)(1-S_l)(1-S_{l'}^*) P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta), \quad (3.81)$$

che integrata sull'angolo solido, ricordando la proprietà di ortogonalità dei polinomi di Legendre, porge:

$$\sigma = \sum_l \sigma_l = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) |1-S_l|^2, \quad (3.82)$$

ove con σ si è indicata la sezione d'urto integrale e con σ_l le sezioni d'urto integrali parziali.

Può essere interessante osservare che mentre i contributi delle diverse onde parziali interferiscono tra di loro per determinare il comportamento della sezione d'urto differenziale, la sezione d'urto integrale risulta essere la somma delle singole sezioni d'urto integrali parziali.

Riscrivendo la sezione d'urto integrale nella forma:

$$\sigma = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1)(1 - \text{Re}[S_l]), \quad (3.83)$$

e ricordando che risulta $P_l(1) = 1$, è immediato dimostrare che vale la relazione:

$$\sigma = \frac{8\pi^2}{k} \text{Im}[f(0)]. \quad (3.84)$$

che lega la sezione d'urto integrale alla parte immaginaria dell'ampiezza di diffusione all'angolo $\theta = 0$. Questa proprietà viene denominata *Teorema Ottico* e la sua validità si estende a processi di diffusione qualsiasi, anche in presenza di canali non elastici, a condizione che σ indichi la sezione d'urto totale, che nel nostro caso coincide con la sezione d'urto integrale, e con $f(0)$ si continui a indicare l'ampiezza di diffusione elastica.

3.8 Calcolo della Sezione d'Urto per la Diffusione da un Potenziale Centrale

Il calcolo di una sezione d'urto per la diffusione da un potenziale centrale, secondo la Meccanica Quantistica, richiede il calcolo di S_l definito dalla (3.72) ed il calcolo della somma sulle onde parziali (3.75).

3.8.1 Ampiezza dell'Intervallo di Integrazione Numerica

Poichè il Wronskiano di due qualsiasi soluzioni della medesima equazione differenziale del second'ordine è costante, per calcolare S_l è sufficiente conoscere il valore delle funzioni $\phi_l(r)$ e $f_l^{(\pm)}(r)$, e delle loro derivate prime, per un qualsiasi valore di r e la scelta di un particolare valore di r , che chiameremo R_T , in cui effettuare il calcolo del Wronkiano è pertanto dettata solo da ragioni di convenienza. La determinazione di $\phi_l(r)$ passa attraverso la soluzione numerica di un'equazione differenziale a partire dal punto $r = 0$, in cui la condizione (3.73) definisce la funzione stessa, sino a R_T , e di conseguenza, la più conveniente scelta di R_T risulta essere il più piccolo valore di r oltre il quale l'equazione differenziale si riduce ad un'equazione numericamente indistinguibile da un'equazione non dipendente dalle caratteristiche del particolare potenziale considerato. Per potenziali che tendono a zero per r tendente all'infinito più rapidamente di $1/r$, indicato con ϵ l'errore relativo con cui il calcolo viene effettuato³, risulta conveniente assumere come R_T l'estremo inferiore della regione, illimitata a destra, in cui risulta $V(r)/E < \epsilon$. Operando in questo modo il calcolo delle funzioni $f_l^{(\pm)}(r)$ è riconducibile al calcolo di soluzioni di un'equazione standard: l'equazione di Riccati-Bessel, che non richiede alcuna integrazione numerica. Utilizzando la (3.68), è infatti immediato riconoscere che, per $r > R_T$, risulta:

$$f_l^{(\pm)}(r) = kre^{\pm i(l+1)\frac{\pi}{2}} h_l^{(1,2)}(kr). \quad (3.85)$$

Questa relazione consente di calcolare facilmente in R_T il valore di $f_l^{(+)}(r)$ e della sua derivata prima utilizzando le formule di ricorrenza (3.63) e (3.64) e le relazioni:

$$h_0^{(1)}(z) = -i \frac{e^{iz}}{z} \quad (3.86)$$

e

$$h_1^{(1)}(z) = -i \frac{e^{iz}}{z} \left(\frac{1}{z} - i \right), \quad (3.87)$$

che esprimono le funzioni Sferiche di Bessel, di terza specie e di primo tipo, di ordine 0 e 1 tramite funzioni trascendenti elementari. Non risulta ovviamente necessario utilizzare lo stesso schema per il calcolo di $f_l^{(-)}(r)$ risultando semplicemente $f_l^{(-)}(r) = f_l^{(+)*}(r)$.

3.8.2 Integrazione Numerica dell'Equazione Radiale

L'equazione radiale di Schrödinger (3.51) è un'equazione omogenea del tipo:

$$y''(x) = -f(x)y(x) \quad (3.88)$$

che va integrata da 0 sino ad un certo valore X . Suddiviso l'intervallo di integrazione in N intervalli, di eguale ampiezza h , mediante $N + 1$ punti x_n , con $n = 0, 1, \dots, N$, tali che $x_0 = 0$ e $x_N = X$ e indicato con y_n il valore di $y(x_n)$ risulta:

$$y_{n+1} = y_n + y_n' h + \frac{1}{2} y_n'' h^2 + \frac{1}{6} y_n''' h^3 + O(h^4) \quad (3.89)$$

³L'errore relativo dei calcoli dipende dall'ambiente in cui il calcolo viene effettuato. Utilizzando, ad esempio, come linguaggio di programmazione il FORTRAN, per la maggior parte dei compilatori ϵ risulta essere di circa 10^{-7} , se il calcolo viene effettuato in precisione semplice, e di circa 10^{-15} , se il calcolo viene effettuato in precisione doppia.

e

$$y_{n-1} = y_n - y'_n h + \frac{1}{2} y''_n h^2 - \frac{1}{6} y'''_n h^3 + O(h^4). \quad (3.90)$$

Sommando membro a membro queste due relazioni si ottiene:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= 2y_n - y_{n-1} + y''_n h^2 + O(h^4) \\ &= 2y_n - y_{n-1} - f_n y_n h^2 + O(h^4), \end{aligned} \quad (3.91)$$

ove si è posto $f_n = f(x_n)$. Ignorando nella (3.91) il termine $O(h^4)$ si ottiene il cosiddetto metodo di Eulero per la soluzione dell'equazione differenziale (3.88) che ha il pregio di non richiedere il calcolo della derivata prima e di necessitare, nel nostro caso, solo di una condizione di innesco banale. Poichè la (3.88) è omogenea e siamo interessati alla soluzione che vale 0 per $x = 0$, è sufficiente scegliere come condizioni di innesco, rispettivamente, i valori 0 e 1 per y_0 e y_1 ed utilizzare la relazione di ricorrenza (3.91) per generare i valori di y_n in tutti i punti del reticolo utilizzato. Per il calcolo di $y'(x_N)$ è sufficiente continuare l'integrazione per due punti successivi a x_N e utilizzare la formula:

$$y'_N = \frac{1}{h} \left(\frac{1}{12} y_{N-2} - \frac{2}{3} y_{N-1} + \frac{2}{3} y_{N+1} - \frac{1}{12} y_{N+2} \right) \quad (3.92)$$

che si ottiene approssimando $y(x)$ con un polinomio di quinto grado interpolante la funzione nei punti del reticolo utilizzati.

Esercizi:

- Poichè in realtà per integrare l'equazione radiale di Schrödinger si usano solitamente metodi di ordine superiore al terzo, utilizzando lo stesso schema usato per ottenere il metodo di Eulero, si ottenga una formula di ricorrenza fra i valori di y_n valida a meno di termini di ordine superiore al quinto.
 - Ricavare la formula utilizzata per il calcolo della derivata.
-

Ci si può domandare quale possa essere una ragionevole scelta per il numero N dei punti del reticolo o equivalentemente del passo h di integrazione. È difficile dare alla domanda una risposta indipendentemente dal comportamento della funzione $f(x)$ che dipende dalle caratteristiche di $V(r)$. Risulta di solito ragionevole la scelta di un passo di integrazione tale che cadano almeno una ventina di punti entro un intervallo di ampiezza pari alla massima lunghezza d'onda locale $\lambda_l(r) = \frac{2\pi}{k_l(r)}$. Effettuato il calcolo con un numero di punti fissato secondo questo criterio, è comunque opportuno ripeterlo, variando il numero dei punti utilizzati, per verificare la stabilità dei risultati ottenuti.

3.8.3 Calcolo dell'Ampiezza di Diffusione e della Sezione d'Urto

Effettuato il calcolo di S_l per un numero ritenuto sufficiente di onde parziale, ad esempio fino ad un valore l_{\max} tale che $|S_l - 1| < \epsilon$ per almeno un paio di valori successivi di $l > l_{\max}$, si può ottenere l'ampiezza di diffusione $f(\theta)$ troncando a l_{\max} la somma che compare nella (3.72). Il calcolo dei Polinomi di Legendre è facilmente effettuato utilizzando la relazioni di ricorrenza:

$$(l+1)P_{l+1}(z) = (2l+1)zP_l(z) - lP_{l-1}(z). \quad (3.93)$$

e ricordando che $P_0(z) = 1$ e $P_1(z) = z$.

La sezione d'urto si ottiene semplicemente dal modulo quadro dell'ampiezza di diffusione.

3.9 Calcolo di Sezioni d'Urto per Semplici Potenziali

Come si è osservato precedentemente il calcolo della sezione d'urto, per la diffusione da un generico potenziale centrale, risulta più semplice in Meccanica Quantistica che in Meccanica Classica, nel senso che risulta più facile definire gli algoritmi necessari per effettuare il calcolo. Purtroppo, in Meccanica Quantistica, non è quasi mai possibile evitare il calcolo numerico, e a questa regola non fanno eccezione nemmeno i semplici problemi della diffusione da una sfera impenetrabile e da una sfera omogenea attrattiva per i quali la Meccanica Classica consente di ottenere la sezione d'urto usando semplici tecniche analitiche. Il fatto che in entrambi questi problemi la particella si muova sempre in regioni dello spazio nelle quali il potenziale è costante permette solo di ottenere delle espressioni analitiche per la funzione di diffusione S_l , continuando a lasciare al calcolo numerico il problema di calcolare la somma sulle onde parziali che definisce l'ampiezza di diffusione $f(\theta)$.

Questi due problemi risultano comunque interessanti perchè, limitando il calcolo numerico, consentono una graduale e semplice messa a punto di tutti gli ingredienti necessari per condurre a termine il calcolo completo nel caso della diffusione da un potenziale centrale qualsiasi.

3.9.1 Diffusione da una Sfera Impenetrabile

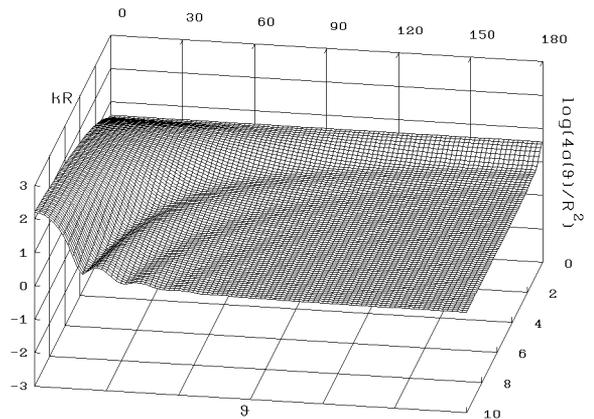
Indicato con R il raggio della sfera impenetrabile, la funzione d'onda soluzione dell'equazione radiale di Schrödinger (3.51), che compare nella definizione della funzione di diffusione (3.75), è definita dalla condizione al contorno $\phi_l(R) = 0$.

Poichè i Wronskiani che compaiono nella (3.75) non dipendono dal punto in cui sono calcolati, calcolando gli stessi in R è immediato trarre profitto dalla precedente condizione al contorno ottenendo:

$$S_l = e^{i\pi l} \frac{f_l^{(-)}(R)}{f_l^{(+)}(R)} = -\frac{h_l^{(2)}(kR)}{h_l^{(1)}(kR)}, \quad (3.94)$$

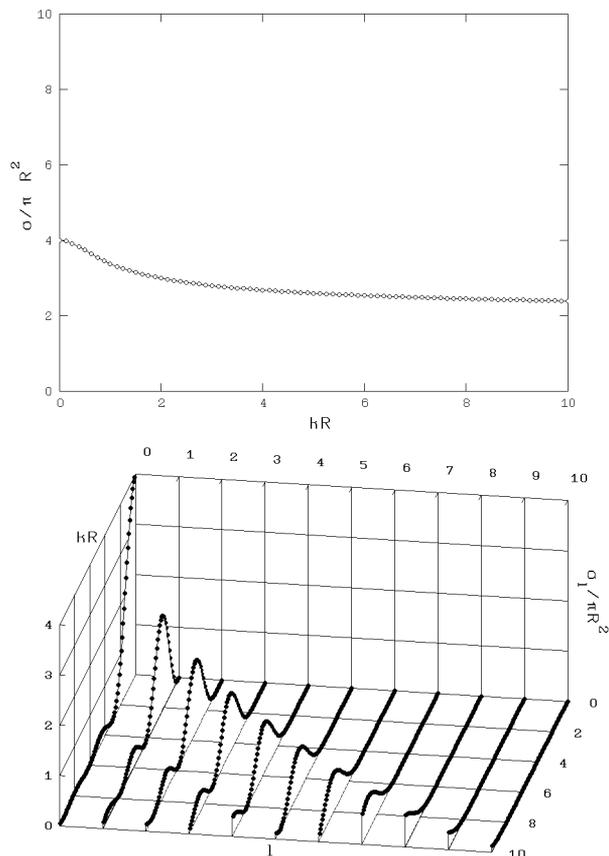
ove, per ottenere l'ultimo termine, si è usata la (3.85), dato che per $r > R$ il potenziale risulta nullo. Il problema del calcolo di S_l è così ricondotto al semplice problema del calcolo delle funzioni Sferiche di Bessel di terzo tipo, denominate anche funzioni di Hankel.

Il comportamento della sezione d'urto per la diffusione da una sfera impenetrabile è illustrato nella figura a fianco ove è rappresentato l'andamento del logaritmo decimale del rapporto fra $\sigma(\theta)$ e $\frac{R^2}{4}$, per valori di kR compresi fra 0 e 10. Ricordiamo, che $\frac{R^2}{4}$ è il valore costante della sezione d'urto differenziale per la diffusione da una sfera impenetrabile previsto dalla Meccanica Classica. La sezione d'urto differenziale risulta isotropa per piccoli valori di kR , con un valore pari a quattro volte il valore classico. All'aumentare di kR la sezione d'urto differenziale tende rapidamente al valore classico su tutto l'intervallo angolare, ad



esclusione degli angoli in avanti ove si manifesta un sempre più marcato picco diffrattivo, la cui ampiezza diminuisce all'aumentare di kR . Il picco è seguito da una regione angolare in cui il contributo diffrattivo interferendo con il contributo classico dà origine ad oscillazioni di ampiezza rapidamente decrescente all'aumentare dell'angolo di diffusione.

Nelle figure a fianco è rappresentato l'andamento, al variare di kR , del rapporto fra la sezione d'urto integrale σ e le sezioni d'urto parziali σ_l e πR^2 che, ricordiamo, rappresenta il valore della sezione d'urto integrale per la diffusione da una sfera impenetrabile secondo la Meccanica Classica. In entrambe le figure le linee congiungono i punti, rappresentati nella prima figura da cerchi vuoti e nella seconda da cerchi pieni, nei quali le sezioni d'urto sono state calcolate. La sezione d'urto integrale per kR tendente a zero risulta quattro volte maggiore della corrispondente sezione d'urto classica ed è caratterizzata da un comportamento monotono decrescente al crescere di kR . Si può dimostrare che il limite a cui tende σ per kR tendente all'infinito risulta essere il doppio della sezione d'urto classica. Osservando la seconda figura si può apprezzare il fatto che ogni onda parziale contribuisca alla sezione d'urto solo per valori di kR maggiori di circa l . Per valori di kR minori di l la presenza dell'interazione nell'equazione di Schrödinger radiale è mascherata dal potenziale centrifugo e può essere rivelata solo utilizzando il meccanismo di penetrazione sotto la corrispondente barriera, ed è noto che l'efficacia di questo meccanismo diminuisce all'aumentare dell'altezza e dell'ampiezza della barriera.



A causa di ciò solo l'onda parziale $l = 0$ contribuisce alla sezione d'urto per kR tendente a zero e poichè risulta $P_0(\cos \theta) = 1$, in questo limite, la sezione d'urto differenziale risulta isotropa.

Il programma, scritto in FORTRAN, utilizzato per effettuare il calcolo è riportato in appendice.

Esercizi:

- Dimostrare che, nel limite $kR \rightarrow 0$, solo l'onda parziale $l = 0$ contribuisce alla somma sulle onde parziali e calcolare, in questo limite, il valore della sezione d'urto.
- Posto $\mathcal{S}(\lambda, z) = \int_{\lambda}^z \sqrt{1 - \lambda^2/x^2} dx$, con $\lambda = l + \frac{1}{2}$, si può dimostrare che per $|\mathcal{S}(\lambda, z)| \gg 1$, e per valori reali positivi di z , risulta:

$$h_l^{(1)}(z) \simeq \frac{e^{-i\frac{\pi}{4}}}{(1 - \frac{\lambda^2}{z^2})^{\frac{1}{4}}} e^{i\mathcal{S}(\lambda, z)}. \quad (3.95)$$

Utilizzando questa relazione si ricavi una espressione approssimata per S_l valida per $l \ll kR$ e $kR \gg 1$. Si calcoli inoltre la derivata rispetto a λ dell'argomento di S_l e si confronti l'espressione ottenuta con il valore della funzione di deflessione classica per la diffusione da una sfera impenetrabile.

- Qual'è il significato fisico, secondo la Meccanica Classica, della grandezza $\mathcal{S}(\lambda, z)$ precedentemente definita.

3.9.2 Diffusione da una Sfera Omogenea Attrattiva

Indicato con R il raggio della sfera, con $-V_0$ la sua profondità e posto $K = Nk$, con $N = \sqrt{1 + \frac{V_0}{E}}$, la funzione d'onda $\phi_l(r)$ per $r < R$ risulta:

$$\phi_l(r) \propto Kr j_l(Kr). \quad (3.96)$$

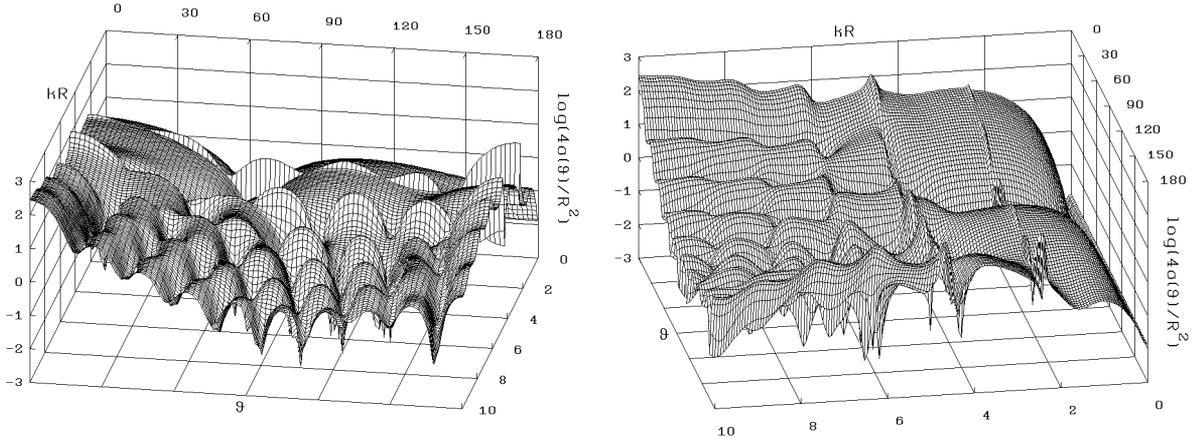
Nella regione $r > R$ le funzioni $f_l^{(\pm)}(r)$ sono legate alle funzioni $h_l^{(1,2)}(kr)$ dalla stessa relazione valida nel caso precedente.

Calcolando i Wronskiani che compaiono nella (3.75) è immediato esprimere la S_l tramite funzioni Sferiche di Bessel e loro derivate. Per semplificare il calcolo numerico, risulta conveniente utilizzare la relazione (3.65) per eliminare la dipendenza esplicita di S_l dalle derivate delle funzioni di Bessel. In questo modo si ottiene:

$$S_l = -\frac{N j_{l+1}(KR) h_l^{(2)}(kR) - j_l(KR) h_{l+1}^{(2)}(kR)}{N j_{l+1}(KR) h_l^{(1)}(kR) - j_l(KR) h_{l+1}^{(1)}(kR)}. \quad (3.97)$$

Il problema del calcolo di S_l è così ricondotto al semplice problema del calcolo delle funzioni Sferiche di Bessel di primo tipo e di terzo tipo.

Il comportamento della sezione d'urto per la diffusione da una sfera omogenea attrattiva è illustrato nelle figure seguenti ove è rappresentato, da due diversi angoli di vista, l'andamento del logaritmo decimale del rapporto fra $\sigma(\theta)$ e $\frac{R^2}{4}$, al variare di θ e per valori di kR compresi fra 0 e 10. Il calcolo è stato effettuato attribuendo a V_0 il valore di 50 MeV, e scegliendo la massa eguale ad una unità atomica ($1 u = 931.5 \text{ Mev}/c^2$), ovvero circa eguale alla massa di un neutrone. Si tenga presente che, per un valore di R eguale a 5 Fermi, l'intervallo di valori di kR considerato corrisponde ad energie comprese fra 0 e circa 80 MeV.



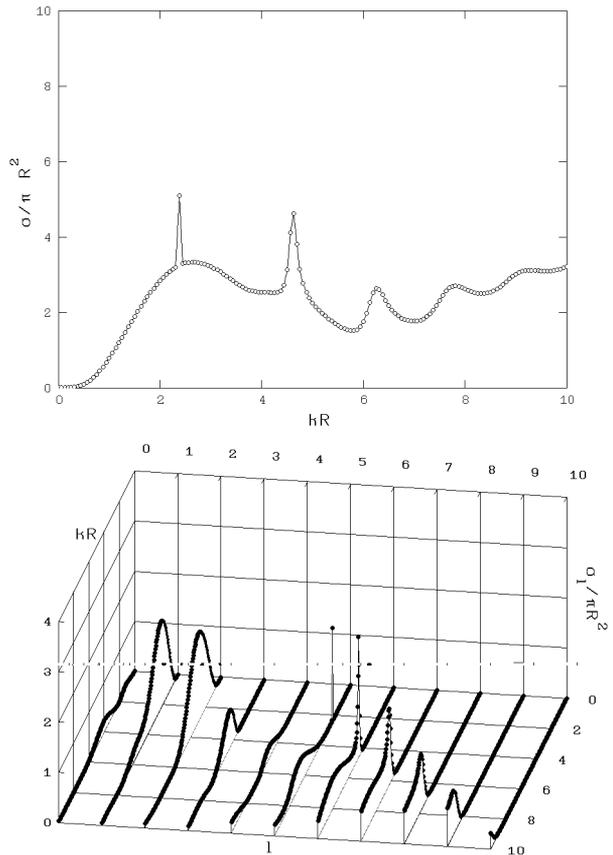
La sezione d'urto differenziale presenta un complicato comportamento sia al variare dell'angolo a kR fissato, evidenziato nella prima figura, che al variare di kR ad angolo fissato, evidenziato nella seconda figura. Diversamente dal caso della diffusione da una sfera impenetrabile, risulta difficile riconoscere nel comportamento della sezione d'urto differenziale una memoria del comportamento della stessa grandezza calcolata precedentemente, per il medesimo potenziale, utilizzando la Meccanica Classica.

Nel limite $kR \rightarrow 0$ la sezione d'urto differenziale risulta isotropa e manifesta, quasi a tutti gli angoli, una rapida crescita all'aumentare di kR sino a valori dell'ordine dell'unità. Al crescere di kR compaiono oscillazioni nella distribuzione angolare in numero regolarmente crescente, così come nel caso della diffusione da una sfera impenetrabile, se si escludono certi valori di kR in corrispondenza ai quali la dolcezza del panorama è bruscamente interrotta dalla comparsa di strutture con un numero di oscillazioni ben diverso da quello delle regioni circostanti. Queste complicate strutture rappresentano il ricordo, nella parte

continua dello spettro dell'energia, della natura discreta dello spettro per valori negativi dell'energia e sono da attribuirsi alla presenza delle singolarità di S_l nel piano dell'energia complessa⁴.

Nelle figure a fianco, come nel caso della sfera impenetrabile, è rappresentato l'andamento, al variare di kR , del rapporto fra la sezione d'urto integrale σ , e le sezioni d'urto parziali σ_l , e πR^2 . Come nel caso precedente le linee congiungono i punti, rappresentati nella prima figura da cerchi vuoti e nella seconda da cerchi pieni, nei quali le sezioni d'urto sono state calcolate. La sezione d'urto integrale risulta molto piccola per piccoli valori di kR ed è caratterizzata da un andamento oscillante, ed in media crescente, al crescere di kR . A questo andamento oscillante si sovrappongono due marcati picchi per valori di $kR \simeq 2.4$ e $kR \simeq 4.6$ corrispondenti ai valori di kR ai quali si manifesta il comportamento anomalo della sezione d'urto differenziale.

Osservando la seconda figura è immediato riconoscere che questi picchi nella sezione d'urto integrale sono causati dai contributi delle onde parziali con $l = 5$ e $l = 6$, mentre i due picchi, meno marcati, che appaiono a $kR = 6.3$ e $kR = 7.8$ sono da attribuirsi al comportamento delle onde parziali con $l = 7$ e $l = 8$. È inoltre da sottolineare il fatto che, in questo caso, il contributo dell'onda parziale con $l = 0$ risulta molto piccolo. A causa di ciò la distribuzione angolare risulta isotropa solo



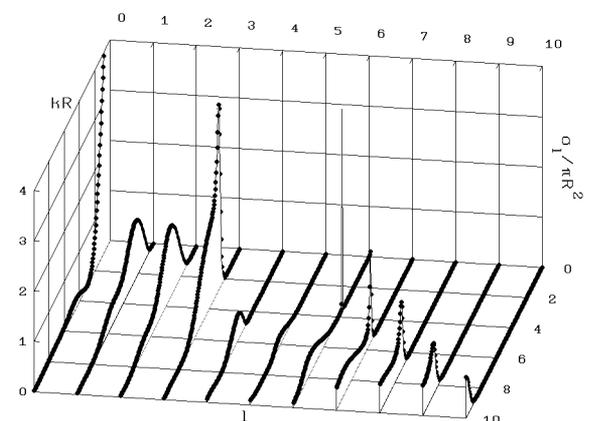
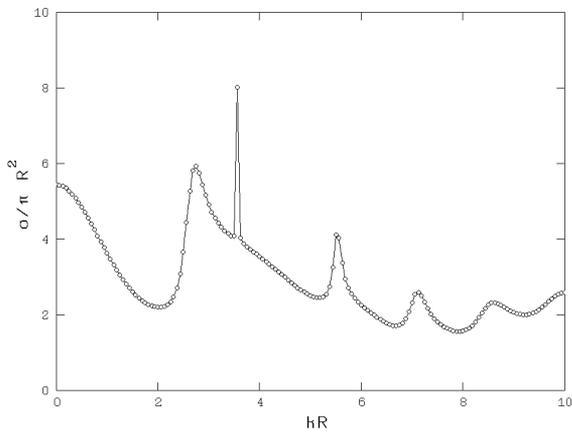
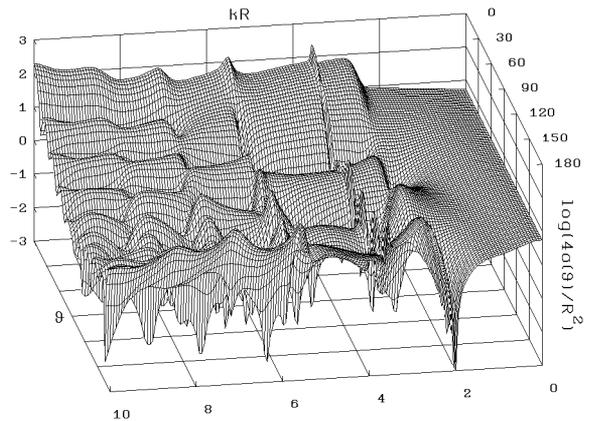
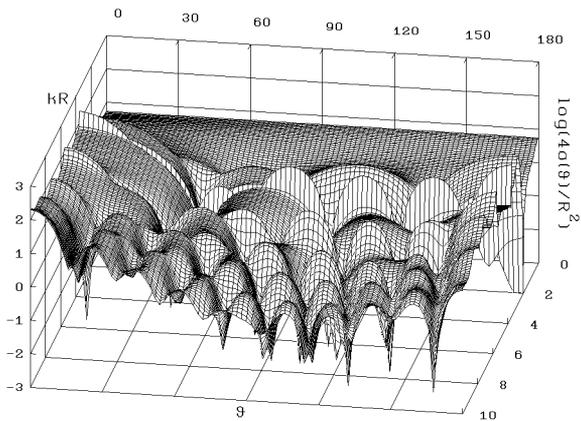
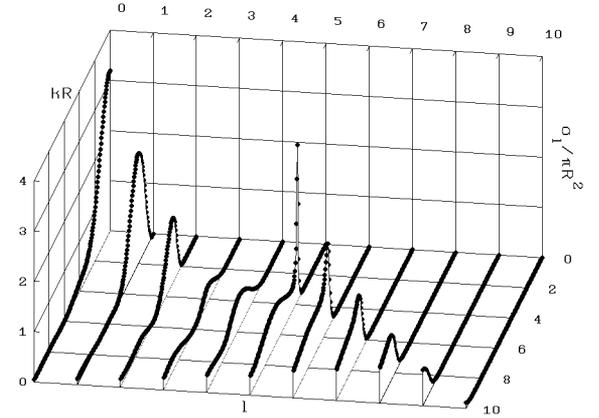
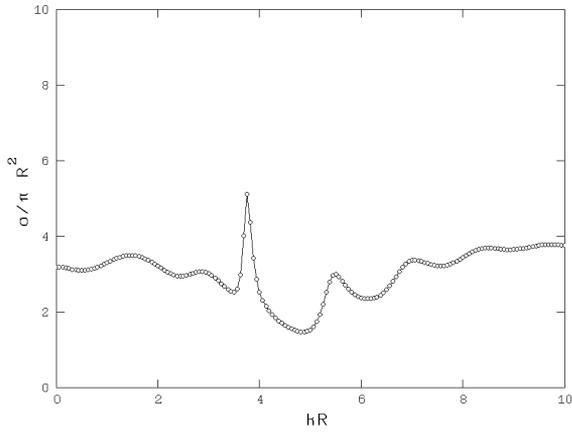
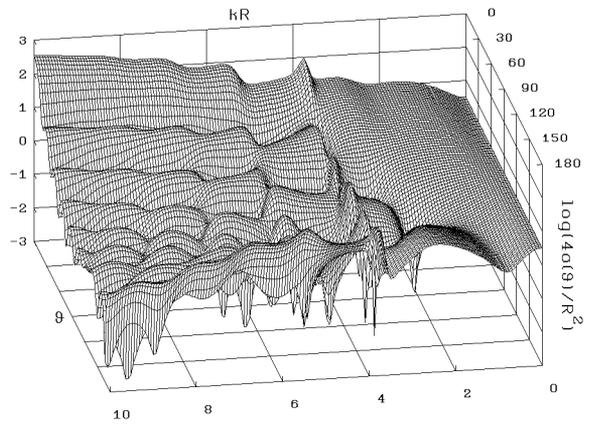
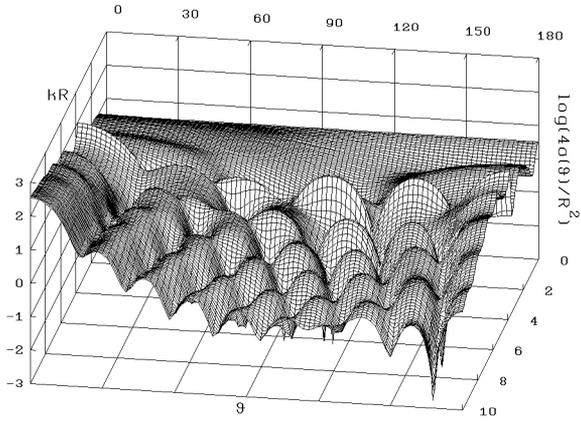
per valori di kR estremamente piccoli ed il suo comportamento è dominato sino ad un valore di kR circa eguale a 2.5 dal contributo dell'onda parziale con $l = 1$.

Il programma, scritto in FORTRAN, utilizzato per effettuare il calcolo è riportato in appendice.

Esercizi:

- Calcolare il valore della sezione d'urto differenziale nel limite $kR \rightarrow 0$ mantenendo il valore di N costante.
- Se le strutture che appaiono nelle sezioni d'urto sono in qualche modo collegate agli stati legati deve risultare possibile attribuire ad ognuna di esse numeri quantici. Risultato banale l'attribuzione di un numero quantico azimutale, come si può attribuire alle diverse risonanze un numero quantico principale?
- Discutere il comportamento delle sezioni d'urto differenziale, totale e parziale, rappresentato nelle figure seguenti, ottenute utilizzando per V_0 un valore di 40 MeV per le prime quattro ed un valore di 60 MeV per le seconde quattro.

⁴Osservando le due figure è difficile non apprezzare la capacità della Meccanica Quantistica di fare in modo che l'interazione di un fascio di particelle con un potenziale, così semplice come una buca sferica di potenziale, le diffonda in modo così fantasmagorico al variare della loro lunghezza d'onda. Alla nostra fantasia è lasciato il piacere di immaginare quali sarebbero i colori del cielo se la diffusione della luce dall'atmosfera avesse un simile comportamento.

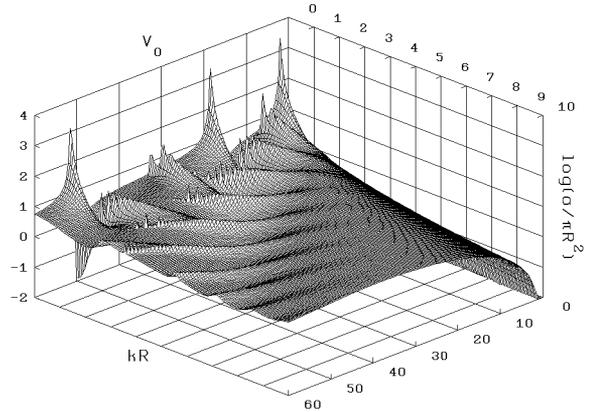


3.9.3 Dipendenza della Sezione d'Urto Totale dalla Profondità del Potenziale

L'origine delle risonanze, che appaiono a più o meno ben definite energie nella distribuzione angolare e nella sezione d'urto totale, può essere chiarita analizzando il comportamento della sezione d'urto totale in funzione della profondità del potenziale. Per semplicità ci limiteremo a considerare la diffusione da una sfera omogenea attrattiva, le cui sezioni d'urto sono state precedentemente analizzate per tre valori della profondità del potenziale.

Nella figura a fianco è riportato l'andamento del logaritmo decimale del rapporto fra la sezione d'urto totale e πR^2 in funzione della profondità V_0 del potenziale e di kR . Come al solito si è utilizzato per R il valore di 5 Fermi e si è attribuito alla massa il valore di 1 u .

La figura consente di evidenziare, al variare di V_0 , la sistematicità dei valori di kR corrispondenti alle strutture della sezione d'urto totale. All'aumentare di V_0 le ondulazioni si muovono verso i piccoli valori di kR aumentando la loro altezza e diminuendo la larghezza tanto da scomparire, talvolta, per effetto delle dimensioni, piccole ma pur sempre finite, del reticolo utilizzato per costruire la superficie.



Per il loro comportamento qualitativo le ondulazioni appaiono ben classificabili in due famiglie diverse, ciascuna associata ai vistosi massimi che compaiono per due diversi valori di V_0 in prossimità di $kR = 0$. Appare ragionevole attribuire la mancanza di una terza famiglia, associata al terzo vistoso massimo, solo al troncamento della figura.

Analizzando il comportamento della sezione d'urto totale e delle sezioni d'urto parziali si è precedentemente visto come sia possibile associare ad ogni risonanza un numero quantico azimutale, pari al valore l del momento angolare la cui sezione d'urto parziale risulta responsabile della comparsa della risonanza nella sezione d'urto totale.

Risulta naturale caratterizzare ogni risonanza con un ulteriore numero quantico che specifica a quale delle famiglie precedenti appartiene la struttura osservata. L'analisi delle figure consente di individuare facilmente la famiglia cui appartengono le ondulazioni solo nelle regioni prossime ai vistosi massimi poichè man mano che ci si allontana da essi le onde di famiglie diverse si mescolano fra di loro.

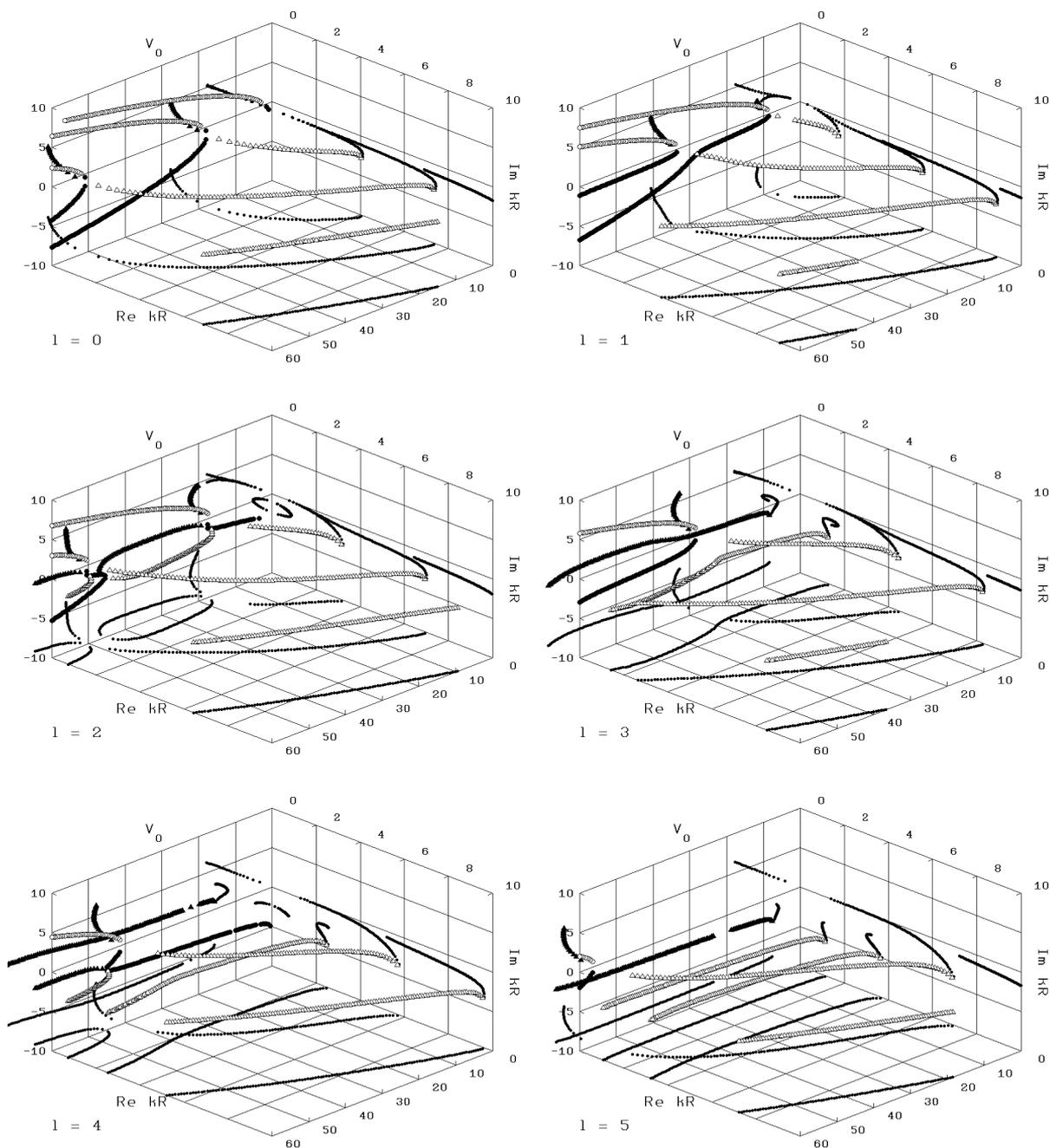
L'individuazione della famiglia di appartenenza di ogni ondulazione e la comprensione della natura di questo nuovo numero quantico risulta facilitata dall'analisi del legame esistente fra le risonanze e le singolarità di S_l associate agli zeri del Wronskiano che compare a denominatore nella definizione di S_l . Nel seguito, per semplicità, queste singolarità saranno indicate con la dicitura *poli*.

La posizione nel piano della variabile complessa kR dei poli dipende da V_0 e da l , e di conseguenza, per ogni valore di l , i valori complessi di kR dei poli variano al variare di V_0 e, considerando la terna $(V_0, \text{Re}[kR], \text{Im}[kR])$ come insieme di coordinate cartesiane ortogonali, i poli sono rappresentabili con dei punti in uno spazio tridimensionale.

Le figure seguenti illustrano, per le prime sei onde parziali, le traiettorie descritte in questo spazio dai poli, i punti marcati con un simbolo rappresentano nello spazio $(V_0, \text{Re}[kR], \text{Im}[kR])$ la posizione dei poli in corrispondenza ai valori discreti di V_0 del reticolo utilizzato per il calcolo, e le loro proiezioni nei piani $(\text{Re}[kR], \text{Im}[kR])$ e $(V_0, \text{Re}[kR])$, limitatamente ai poli con $\text{Re}[kR] \neq 0$ sono indicate con il corrispondente simbolo rimpicciolito. I cerchi vuoti e pieni indicano le posizioni dei poli con $\text{Re}[kR] = 0$ e, rispettivamente, con $\text{Im}[kR] > 0$ e $\text{Im}[kR] < 0$. I rombi vuoti e pieni indicano, invece, i poli con $\text{Re}[kR] \neq 0$ e, rispettivamente, con $\text{Re}[kR] > 0$ e $\text{Re}[kR] < 0$. Nelle figure sono

rappresentati solo i poli con $\text{Re}[kR] > -3$ poichè le traiettorie che gli stessi descrivono per $\text{Re}[kR] < 0$ sono grossolanamente simmetriche, rispetto al piano $(V_0, \text{Im}[kR])$, alle traiettorie con $\text{Re}[kR] > 0$.

Le figure evidenziano che per piccoli valori di V_0 tutti i poli hanno $\text{Im}[kR] < 0$; all'aumentare di V_0 , i poli si avvicinano all'origine del piano della variabile complessa kR ed alcuni di loro, nell'intervallo di valori di V_0 considerato, la raggiungono, ognuno in corrispondenza ad un ben preciso valore di V_0 . Quando un polo con $\text{Re}[kR]$ raggiunge l'origine si scontra con un suo omologo proveniente dalla regione $\text{Re}[kR] < 0$ e, per valori di V_0 maggiori del questo valore, i due poli si allontanano l'uno dall'altro da parti opposte dell'asse immaginario.



Si osservi che il comportamento dei poli dell'onda parziale con $l = 0$ è in qualche modo

anomalo: il polo corrispondente allo stato fondamentale descrive una traiettoria contenuta nel piano $(V_0, \text{Im}[kR])$ e non intersecante altre traiettorie corrispondenti a valori complessi di kR , e i poli associati agli altri stati legati sono originati da una collisione di poli che non si verifica nell'origine del piano della variabile complessa kR .

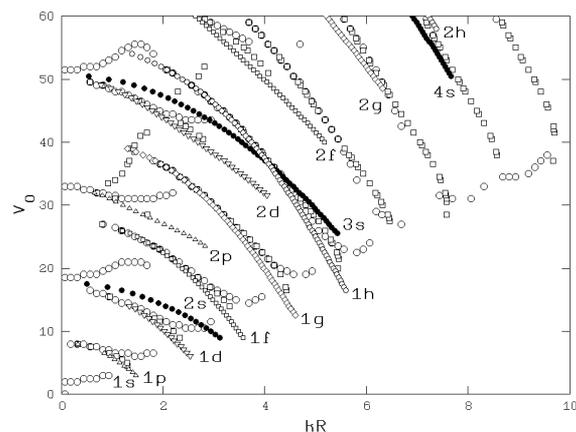
Per le onde parziali con $l > 1$, in aggiunta alle traiettorie precedentemente descritte, esistono anche traiettorie, aventi $\text{Im}[kR] < 0$, che non si avvicinano mai all'asse reale. Di queste alcune si incrociano fra di loro, altre no.

Ricordando che un polo di S_l con parte reale nulla e parte immaginaria maggiore di zero corrisponde ad uno stato legato, i valori di V_0 ai quali due poli collidono nell'origine del piano complesso kR rappresentano i valori critici della profondità del potenziale che consente al potenziale, per profondità appena maggiori, di sopportare uno stato legato nell'onda parziale considerata e le traiettorie descritte dai poli possono essere caratterizzate con i numeri quantici di questi stati legati.

Il confronto fra le figure rappresentanti le sezioni d'urto totali con quelle rappresentanti i poli consente di chiarire l'origine dei massimi nelle sezione d'urto totali. I massimi nelle sezioni d'urto si manifestano per ogni valore di V_0 ai valori di kR prossimi alle parti reali delle posizioni dei poli di S_l che, scontrandosi con i loro omologhi, danno origine agli stati legati. I massimi risultano inoltre tanto più marcati quanto più piccola è la parte immaginaria del polo corrispondente.

Appare pertanto naturale considerare i massimi che compaiono nella sezione d'urto totale come il ricordo, a energie positive, di quelli che sarebbero risultati essere stati legati se il potenziale fosse stato più profondo, e le diverse famiglie di massimi precedentemente osservate corrispondono semplicemente a stati caratterizzati da un diverso numero quantico principale.

Per evidenziare l'associazione fra le linee dei crinali nella figura della sezione d'urto totale e le proiezioni dei poli nel piano $(V_0, \text{Re}[kR])$, nella figura a fianco i simboli quadrati e rotondi grandi rappresentano, rispettivamente, le posizioni dei massimi delle intersezioni della superficie della sezione d'urto totale con dei piani paralleli al piano $(kR, \frac{\sigma}{4\pi})$ e al piano $(V_0, \frac{\sigma}{4\pi})$, mentre i simboli piccoli rappresentano le proiezioni nel piano $(V_0, \text{Re}[kR])$ dei poli delle diverse onde parziali precedentemente considerate e indicate nella figura con l'usuale notazione spettroscopica.



Per semplicità sono state indicate solo le posizioni dei poli con $\text{Im}[kR] > -1.25$ per l'onda s e $\text{Im}[kR] > -1$ per le altre onde parziali. Nella regione con $kR < 4$ la presenza dei crinali nella superficie della sezione d'urto totale è completamente giustificata dalle traiettorie dei poli. Nella regione con $kR > 4$ compaiono quattro crinali cui non corrisponde alcuna delle traiettorie calcolate. Il loro andamento permette comunque di ipotizzare che la responsabilità della loro comparsa sia da attribuire ai poli $1i$, $1j$, $1k$ e $1l$, che non sono stati calcolati.

Esercizio:

- Il fatto che per certi valori di V_0 si annulli, per $kR = 0$, il Wronskiano che compare a denominatore nella definizione di S_l significa forse che S_l è singolare per $kR = 0$?
-

3.9.4 Diffusione Gloria e Arcobaleno

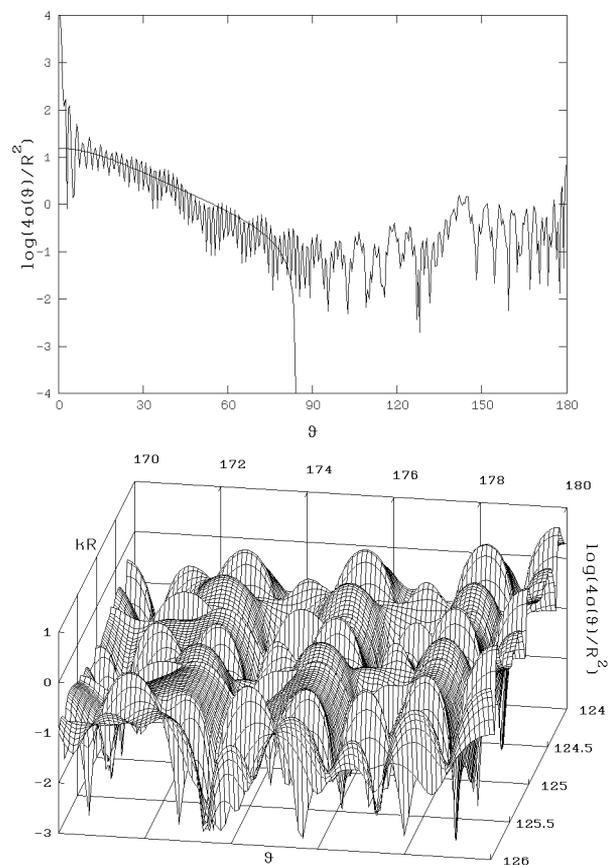
Nelle analisi precedenti ci si è limitati a prendere in considerazione il problema della diffusione da una sfera omogenea attrattiva con un valore di V_0 tipico della profondità dei potenziali usati in fisica nucleare (50 MeV) e per valori di kR appartenenti ad un intervallo di valori ragionevoli per problemi di diffusione in fisica nucleare.

Poichè il problema della diffusione di un'onda elettromagnetica da una sfera di raggio R , di un materiale omogeneo di indice di rifrazione N , è trattabile nell'ambito di un formalismo simile a quello utilizzato per trattare problemi di diffusione in Meccanica Quantistica, può essere interessante analizzare il comportamento della sezione d'urto per valori di N e di kR simili a quelli che ci si aspetta intervengano nella diffusione di un'onda elettromagnetica, appartenente alla parte visibile dello spettro, da goccioline d'acqua. In questo caso considerando una lunghezza d'onda $\lambda \simeq .5 \cdot 10^{-6} m$ e un raggio della goccia $R \simeq 10^{-5} m$, tipico delle goccioline d'acqua che compongono le nuvole, si ottiene un valore di $kR \simeq 125$, ovvero un ordine di grandezza maggiore del massimo valore di kR precedentemente considerato.

La sezione d'urto ottenuta, utilizzando per N il valore di 1.342 e per kR il valore di 125, è riportata nella figura a fianco che evidenzia come la sua dipendenza dall'angolo sia ben più complessa di quelle precedentemente ottenute. La distribuzione angolare è caratterizzata da un vistoso picco in avanti, di piccola ampiezza, seguito da una regione in cui oscillazioni di piccolo periodo si manifestano in prossimità della linea, priva di oscillazioni, che rappresenta il risultato previsto dalla meccanica classica per la diffusione dallo stesso potenziale. Nella regione angolare in cui l'andamento medio del risultato quantistico si discosta significativamente dal risultato classico compaiono oscillazioni di maggior ampiezza e periodo con sovrapposte altre oscillazioni di periodo e ampiezza più piccoli. I dettagli del comportamento della distribuzione angolare agli estremi angoli all'indietro, al variare di kR , sono illustrati nella seconda figura nella quale è riportato l'andamento della distribuzione angolare fra 170 e 180 gradi con kR variabile fra 124 e 126. In questa figura è evidente come la sezione d'urto manifesti un comportamento risonante per certi valori di kR con valori della sezione d'urto all'indietro che, in un ristretto intervallo angolare, risultano fino a due ordini di grandezza maggiori dei valori della sezione d'urto differenziale ad angoli più piccoli.

La presenza di questo comportamento risonante, proprio di una teoria ondulatoria, è responsabile del fenomeno osservato dall'Ulloa e denominato gloria.

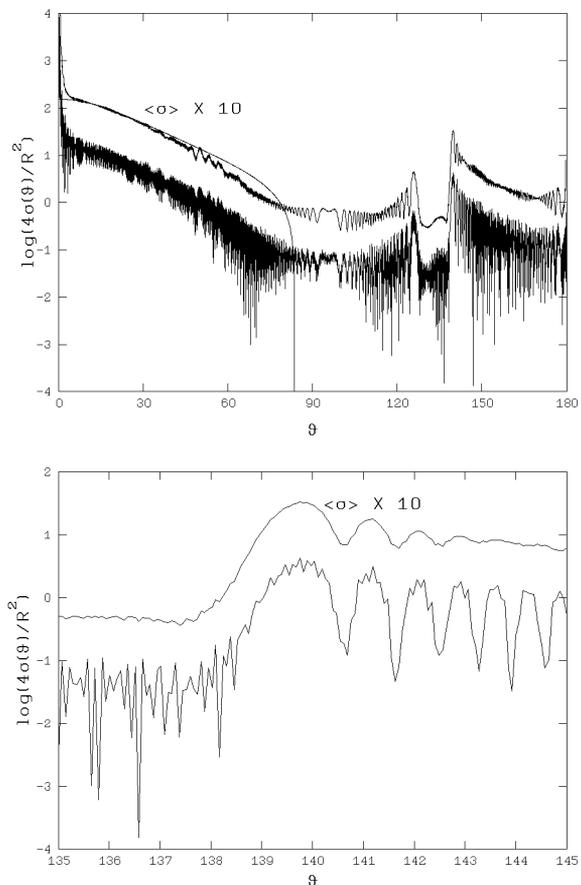
L'esistenza di risonanze a valori di kR così elevati è sorprendente se si ha come riferimento l'esperienza della fisica nucleare che ci insegna che, in generale, non si osservano risonanze ad energie maggiori di qualche MeV. Il fatto è che per avere i valori che sono stati utilizzati per kR e per N un neutrone dovrebbe essere lanciato con un'energia di circa 13 GeV contro una buca di potenziale di raggio di 5 Fermi e di profondità di circa 10 GeV.



Osservando l'andamento della distribuzione angolare per $kR = 125$ si è anche sorpresi dalla comparsa di un elevato numero di oscillazioni che sembrano sovrapporsi ad una struttura oscillante di più lungo periodo e più semplice della struttura complessiva. Il fenomeno appare curioso soprattutto se si tiene conto del fatto che per ottenere la distribuzione angolare è stato necessario sommare qualcosa come 200 onde parziali e si dovrebbe pertanto essere vicini ad un regime dinamico in cui il limite classico della Meccanica Quantistica dovrebbe iniziare a manifestare i suoi effetti.

Per comprendere, almeno qualitativamente, cosa stia succedendo risulta conveniente cercare di avvicinarsi ulteriormente al regime dinamico che dovrebbe essere dominato dalle leggi della Meccanica Classica e per far questo è sufficiente aumentare ulteriormente il valore di kR . Un valore di kR di circa 2000 corrisponde ad un raggio, dell'ipotetica gocciolina d'acqua investita da un'onda elettromagnetica di lunghezza d'onda $\lambda \simeq .5 \cdot 10^{-6} m$, di circa 20 volte superiore al raggio considerato precedentemente. Sappiamo tutti cosa succede quando le goccioline d'acqua delle nuvole raggiungono simili dimensioni: piove!

Nella figura a fianco è illustrato il comportamento della sezione d'urto differenziale calcolata a 2500 angoli, equispaziati fra 0 e 180 gradi, attribuendo a N il valore di 1.342 e a kR il valore di 2000. La distribuzione angolare è caratterizzata da oscillazioni di periodo tanto piccolo da non poter essere apprezzato con la risoluzione angolare consentita dall'ampiezza della scala orizzontale della figura, e tale da far apparire, in luogo di una curva, una banda la cui altezza fornisce una grossolana misura dell'ampiezza delle oscillazioni. L'altra curva che compare nella stessa figura rappresenta il valore ottenuto mediando la sezione d'urto differenziale, sui punti utilizzati per la sua tabulazione, in un intervallo angolare di ampiezza pari a mezzo grado. I valori medi così ottenuti sono stati traslati, verso l'alto, di una decade della scala logaritmica dell'asse verticale. L'andamento di questa curva consente di apprezzare come l'operazione di media abbia soppresso quasi completamente le oscillazioni di più piccolo periodo causando però la comparsa di oscillazioni di più lungo periodo. Come nel caso precedente la linea sottile rappresenta l'andamento della sezione d'urto classica che, nella regione in cui non è nulla o comunque trascurabile, risulta in ragionevole accordo con il risultato quantistico.



La regolarità delle oscillazioni di piccolo periodo presenti nella distribuzione angolare iniziale è evidenziata nella seconda figura, dove è presentato l'ingrandimento della regione angolare compresa fra 135 e 145 gradi.

L'andamento della distribuzione angolare risulta caratterizzato dall'esistenza di un vistoso picco in avanti cui segue una decrescita più lenta interrotta dalla presenza di due evidenti strutture, orientate da parti opposte e nettamente separate da una regione angolare di ampiezza di circa 15 gradi. Queste due strutture sono associate al fenomeno dell'arcobaleno: quella con il massimo a circa 140 gradi corrisponde all'arcobaleno primario, causato da traiettorie che hanno subito solo una riflessione sulla superficie interna della goccia, l'altra, con un massimo a circa 125 gradi, all'arcobaleno secondario causato

da traiettorie che hanno subito due riflessioni sulla superficie interna della goccia. La regione fra i due massimi corrisponde alla cosiddetta *banda oscura di Alessandro* che si può osservare quando le condizioni meteorologiche sono tali da consentire la visualizzazione di entrambi gli arcobaleni.

Nonostante si sia utilizzato un valore di kR estremamente elevato, tale da far sì concorrano alla determinazione della sezione d'urto grandi numeri quantici, la distribuzione angolare per la diffusione da una sfera attrattiva calcolata secondo la Meccanica Quantistica risulta ben diversa da quella calcolata secondo la Meccanica Classica. Il fatto è che il potenziale considerato presenta una discontinuità che, se si mantiene fisso il valore di N , produce riflessioni sulla superficie della sfera il cui contributo non si annulla per k tendente all'infinito e di conseguenza se nella descrizione classica non si tiene conto di questo contributo la distribuzione angolare quantistica non può tendere al limite classico.

3.9.5 Diffusione da un Potenziale di Saxon-Woods

Come si è anticipato, la parte centrale dell'interazione nucleare fra un nucleone ed un nucleo viene solitamente descritta tramite il cosiddetto potenziale di Saxon-Woods definito da:

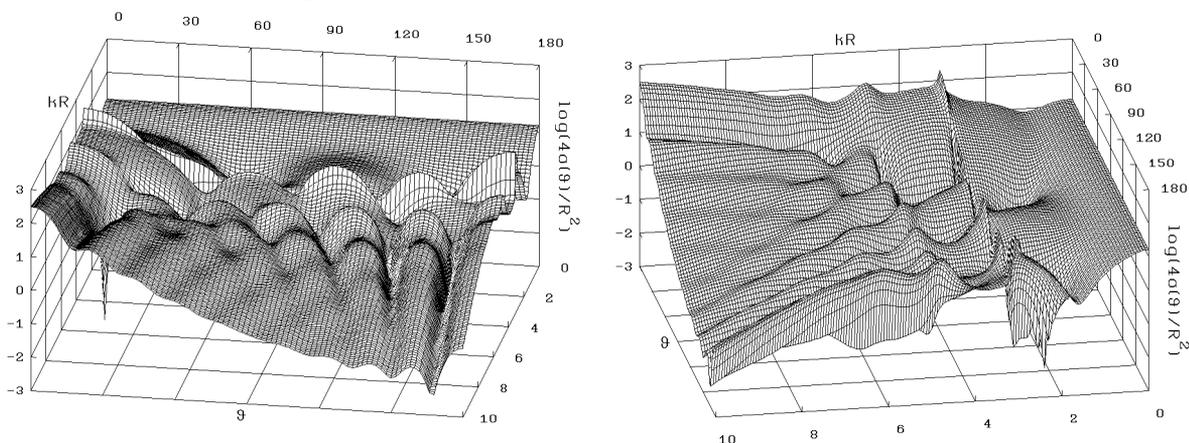
$$V(r) = -V_0 \frac{1}{1 + e^{\frac{r-R}{d}}}. \quad (3.98)$$

Se $\frac{R}{d} \ll 1$, $V(r)$ risulta circa eguale a $-V_0$ per $r < R$ e praticamente nullo per $r > R$. La transizione dal valore $-V_0$ al valore nullo avviene in un intervallo attorno a R la cui ampiezza dipende dal valore del parametro d , denominato diffusività.

In considerazione della sua popolarità è di un certo interesse analizzare il comportamento delle sezioni d'urto per la diffusione da questo potenziale.

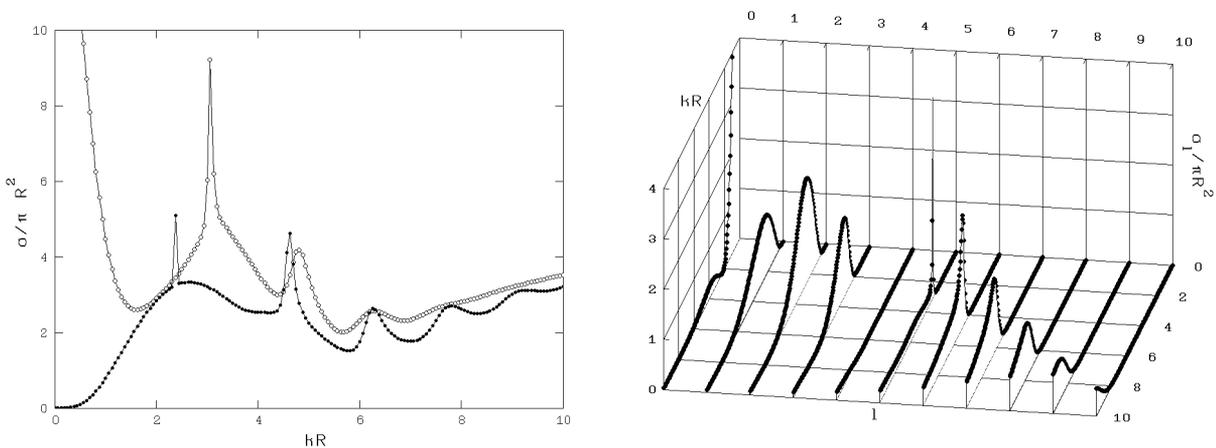
La soluzione dell'equazione di Schrödinger radiale per un potenziale di questo tipo, se si esclude il caso $l = 0$, non è esprimibile tramite funzioni trascendenti note ed il calcolo di S_l non può evitare l'integrazione numerica.

Il comportamento della sezione d'urto differenziale per la diffusione da un potenziale di Saxon-Woods è illustrato nelle figure seguenti ove è il calcolo è stato effettuato attribuendo a V_0 il valore di 50 MeV, a R e a d , rispettivamente, i valori di 5 e 0.5 Fermi, e scegliendo la massa eguale ad una unità atomica.



In tutto l'intervallo di valori di kR considerati la distribuzione angolare presenta caratteristiche simili a quelle della sfera omogenea, se si esclude il fatto che la distribuzione angolare si presenta isotropa in una regione più ampia di piccoli valori di kR e risulta più rapidamente decrescente con l'angolo, con un comportamento oscillante meno marcato, per grandi valori di kR . La prima differenza è da attribuirsi al fatto che il contributo dell'onda parziale $l = 0$ non risulta piccolo come, accidentalmente, si verificava per la diffusione dalla sfera omogenea, mentre la seconda differenza è un effetto della diffusività del potenziale di Saxon-Woods.

Anche l'andamento delle sezioni d'urto integrale e delle sezioni d'urto parziali illustrato nelle figure seguenti, è abbastanza simile per i due potenziali. I valori calcolati per la sezione d'urto integrale sono rappresentati da dei quadrati aperti nella figura corrispondente ove, per comodità di confronto, è rappresentato anche l'andamento della sezione d'urto integrale per la sfera omogenea. I contributi delle risonanze con $l = 5$ e $l = 6$ sono chiaramente riconoscibili e appaiono solo spostati a valori di kR più grandi rispetto alla sfera omogenea ed il picco corrispondente a $l = 6$ risulta meno marcato, così come risultano meno appariscenti le strutture successive.

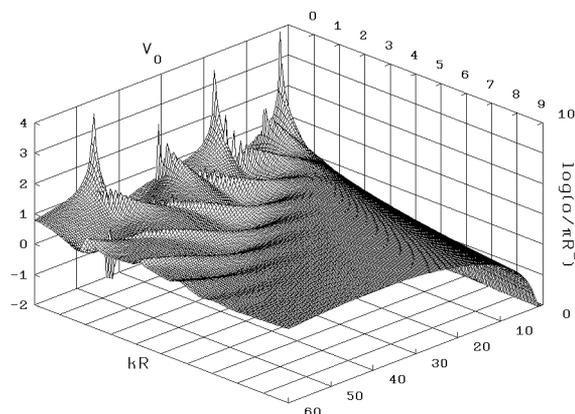


Nella figura rappresentante l'andamento delle sezioni d'urto parziali, per comodità di confronto, si è usata la stessa scala utilizzata nella figura corrispondente per la sfera omogenea. Anche in questo caso l'andamento delle curve corrispondenti è simile. Le uniche differenze degne di nota sono rappresentate dal comportamento delle sezioni d'urto parziali con $l = 0$ e $l = 4$. Il contributo dell'onda parziale con $l = 0$, come già precedentemente osservato, è rilevante per il potenziale di Saxon-Woods e trascurabile per la sfera omogenea, mentre si verifica il contrario per l'onda parziale con $l = 4$.

Come per i casi considerati precedentemente, il programma utilizzato per effettuare il calcolo è riportato in appendice.

Per completare il confronto qualitativo fra la diffusione da una sfera omogenea e da un potenziale di Saxon-Woods nella figura seguente è illustrata la dipendenza della sezione d'urto totale dalla profondità del potenziale e da kR .

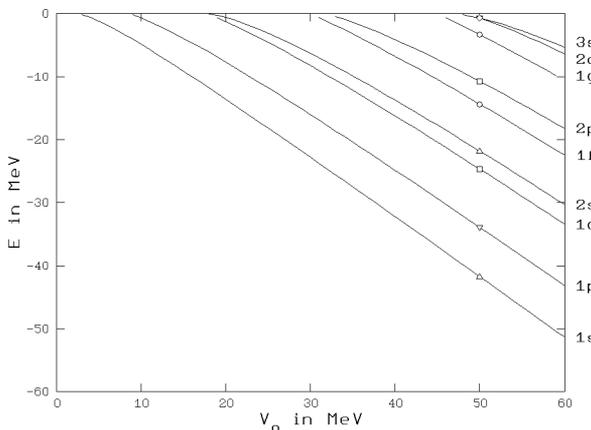
Il confronto fra questa figura e la corrispondente per la sfera omogenea è impressionante: le caratteristiche qualitative delle due figure sono praticamente le stesse. Se si tiene presente che le strutture che compaiono nella sezione d'urto totale sono legate alla capacità del potenziale di avere stati legati, la somiglianza non è poi tanto sorprendente: per ottenere un potenziale di Saxon-Woods a partire da una buca avente la stessa profondità, in fin dei conti, basta smussare un pó la discontinuità della buca, e questa è un'operazione che non ci aspettiamo modifichi drammaticamente le caratteristiche degli stati legati.



Esercizio:

Nella figura a fianco è illustrata la dipendenza dalla profondità del potenziale delle energie degli stati legati di un potenziale di Saxon-Woods. I simboli indicano la posizione degli stati legati per una profondità del potenziale di 50 MeV.

A fianco di ogni linea sono indicati, nell'usuale notazione spettroscopica, i numeri quantici caratterizzanti il corrispondente stato legato. Utilizzate questa figura per attribuire i numeri quantici principale ed azimutale ai crinali che compaiono nella figura precedente.



4 Appendice

4.1 Calcolo di Sezioni d'Urto Differenziali, Parziali e Totali

4.1.1 Diffusione da una Sfera Impenetrabile

• Programma Principale

Il programma principale, scritto in FORTRAN, utilizzato per il calcolo delle sezioni d'urto per diversi valori di kR è riportato nelle righe seguenti:

```
C----- SUBROUTINE Utilizzate
INCLUDE 'OPN_FIL.FOR'
INCLUDE 'WRI_INT.FOR'
INCLUDE 'FND_LMX.FOR'
INCLUDE 'BES_H1.FOR'
INCLUDE 'SUM_PAR.FOR'

C----- Programma Principale
PROGRAM Sfera_Impenetrabile
PARAMETER (lmax=1000,nAng=90)
IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
DIMENSION cH1(0:lmax),cS(0:lmax)
DIMENSION cF(0:nAng),rad(0:nAng),lUse(0:nAng)

C
C Raggio della sfera
R=5
C Unita' immaginaria
ci=(0.DO,1.DO)
C Angoli in rad. per la distr. angolare
pi=2*ASIN(1.DO)
drad=pi/nAng
DO iAng=0,nAng
rad(iAng)=iAng*drad
ENDDO
C Intervallo dei valori di kR
rhomin=0
rhomax=10
nrho=41
drho=(rhomax-rhomin)/(nrho-1)
C numero Max di onde parziali
CALL Find_lMax (rhomax, lsup, 1.D-13)
lsup=5*(INT(lsup/5.))+1
IF (lsup.GT.lmax) THEN
WRITE (*,*) 'Dimen. di lmax Insuff.'
STOP
ENDIF
CALL Open_File('SI41')
CALL Write_Int(rhomin,rhomax,nrho,nAng,lsup)

C Ciclo sui valori di rho programmati
DO irho=1,nrho
rho=(rhomin+(irho-1)*drho)
IF (rho.EQ.0) rho=1.E-4
rho2=rho*rho
lm=lmax
CALL Find_lMax (rho, lm, 1.D-13)
IF (lm.LT.5) lm=5
C Calcolo di h^(1)_l(kR)
CALL Bes_h1 (ch1, lm, rho)
DO il=0,lm
C Calcolo di S_l
cS(il)=-CONJG(cH1(il))/cH1(il)
ENDDO
C Calcolo di \sigma_l^{(N)Q}/(R^2/4)
DO l=0,lsup
sig_par=0
IF (1.LE.lm) THEN
sig_par=ABS(1.D0-cS(l))
sig_par=(1+l+1)*sig_par*sig_par/rho2
ENDIF
WRITE(12,'(E12.4)') sig_par
ENDDO
C Calcolo di \sum_l (2l+1)(1-S_l)P_l(\cos \theta)
CALL SumPar(cF,cS,rad,lUse,lm,nAng,kErr)
C Calcolo di \sigma_{\{N\}}/(\pi R^2)
DO iAng=0,nAng
sig_dif=ABS(cF(iAng))/rho
sig_dif=sig_dif*sig_dif
WRITE(10,'(E12.4)') sig_dif
ENDDO
C Calcolo della sez. d'urto totale (Teorema Ottico)
sig_tot=2*REAL(cF(0))/rho2
WRITE(11,'(F6.2,E12.4)') rho,sig_tot,.00001
ENDDO
CLOSE(10)
CLOSE(11)
CLOSE(12)
STOP
END
```

Il programma principale organizza il calcolo della sezione d'urto differenziale a $nAng+1$ angoli di diffusione equispaziati, compresi fra 0 e 180 gradi, prevedendo di utilizzare, al più, $lmax=1000$ onde parziali. Il programma, dopo aver memorizzato negli elementi del vettore rad i valori degli angoli, in radianti, ai quali effettuare il calcolo, fissa l'intervallo di variabilità di kR da $rhomin$ a $rhomax$ ed il numero $nrho$ dei valori di kR , equispaziati, da considerare. Successivamente il programma, utilizzando la SUBROUTINE `Find_lMax` contenuta nel File `FND_LMX.FOR` verifica se $lmax$ onde parziali sono sufficienti per effettuare il calcolo a $rhomax$. Se il numero massimo di onde parziali previsto non è sufficiente il calcolo viene interrotto, altrimenti, utilizzando le SUBROUTINE `Open_File` e `Write_Int`, contenute, rispettivamente, nei File `OPN_FIL.FOR` e `WRI_INT.FOR`, apre i File destinati a contenere i risultati del calcolo delle sezioni d'urto differenziali, totali e parziali e inizia il ciclo delle istruzioni che consentono il calcolo delle sezioni d'urto per i valori di kR , denominati rho , programmati.

Per ogni valore di rho viene determinato, utilizzando la SUBROUTINE `Find_lMax`, il numero lm di onde parziali da sommare e, se lm risulta minore di 5, lm viene posto eguale a 5.

La chiamata della SUBROUTINE `Bes_h1`, contenuta nel File `BES_H1.FOR`, restituisce, nel vettore complesso $ch1$, i valori di $h_l^{(1)}(kR)$, per $0 \leq l \leq lm$ e $kR = rho$, che consentono

l'immediato calcolo dei valori della funzione di diffusione S_l che vengono memorizzati nel vettore complesso cS .

Per ogni onda parziale vengono calcolati i valori del rapporto fra la sezione d'urto parziale e πR^2 e scritti nel File appropriato, aperto dalla SUBROUTINE `Open_File`, associato all'unità logica 12.

La somma sulle onde parziali viene effettuata utilizzando la SUBROUTINE `SumPar`, contenuta nel File `SUM_PAR.FOR`, ed i valori del rapporto fra $\sigma(\theta)$ e $\frac{R^2}{4}$ vengono scritti nel File associato all'unità logica 10. Alla fine, utilizzando il Teorema Ottico viene calcolato il rapporto fra la sezione d'urto integrale e πR^2 ed il valore ottenuto viene scritto nel File associato all'unità logica 11. Prima di arrestarsi, il programma chiude tutti i File utilizzati per la registrazione dei risultati.

• *Programmi Open_File e Write_Int*

```

SUBROUTINE Open_File(p)
CHARACTER*(*) p
CHARACTER*60 Fil_Dif,Fil_Tot,Fil_Par
C Sezione d'urto differenziale
Fil_Dif=p//'_DIF.DAT'
OPEN(UNIT=10,FILE=Fil_Dif,STATUS='OLD',ERR=10)
CLOSE(UNIT=10,STATUS='DELETE')
10 OPEN(UNIT=10,FILE=Fil_Dif,STATUS='NEW')
C Sezione d'urto totale
Fil_Tot=p//'_TOT.DAT'
OPEN(UNIT=11,FILE=Fil_Tot,STATUS='OLD',ERR=20)
CLOSE(UNIT=11,STATUS='DELETE')
20 OPEN(UNIT=11,FILE=Fil_Tot,STATUS='NEW')
C Sezione d'urto parziale
Fil_Par=p//'_PAR.DAT'
OPEN(UNIT=12,FILE=Fil_Par,STATUS='OLD',ERR=30)
CLOSE(UNIT=12,STATUS='DELETE')
30 OPEN(UNIT=12,FILE=Fil_Par,STATUS='NEW')
RETURN
END

SUBROUTINE Write_Int(rmin,rmax,nr,nAng,lup)
IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
C Sezione d'urto differenziale
WRITE(10,'(3I5)') 0, 180, nAng+1
WRITE(10,'(2E13.5,I5)') rmin, rmax, nr
C Sezione d'urto totale
WRITE(11,'(A)') ' kR'
WRITE(11,'(A)') ' \s/\p R^2'
WRITE(11,'(I5)') nr
C Sezione d'urto parziale
WRITE(12,'(3I5)') 0,lup,lup+1
WRITE(12,'(2E13.5,I5)') rmin, rmax, nr
RETURN
END

```

La SUBROUTINE `Open_File(p)` apre tre File per la registrazione dei risultati del calcolo delle sezioni d'urto differenziali, totali e parziali. La denominazione completa dei tre file è ottenuta aggiungendo ad un prefisso, rappresentato dalla variabile alfanumerica `p` e specificato dal programma chiamante, rispettivamente, `_DIF.DAT`, `_TOT.DAT` e `_PAR.DAT`. La SUBROUTINE cancella eventuali File pre-esistenti aventi la stessa denominazione.

La SUBROUTINE `Write_Int(rmin,rmax,nr,nAng,lup)` scrive nei tre File aperti dalla SUBROUTINE `Open_File` delle intestazioni contenenti informazioni, sull'intervallo di variabilità degli angoli, o di kR , o delle onde parziali, utili per una successiva lettura dei risultati contenuti nei File.

• *Programma Find_lMax*

Utilizzando una proprietà delle funzioni Sferiche di Bessel, riportata in una delle righe di commento, la SUBROUTINE trova, per un assegnato valore di $kR = z$, il valore di l , denominato `lMax`, oltre il quale, effettuando il calcolo con un errore relativo `ErrRel`, S_l è numericamente indistinguibile da 1.

La determinazione di `lMax` implica la soluzione di un'equazione trascendente del tipo $f(x) = 0$ che viene risolta con il metodo di Newton. Il metodo di Newton è basato sulla costruzione della successione $x_{n+1} = x_n - f(x_n)/f'(x_n)$ e sulla constatazione che, se la successione converge ad un valore X , X è uno zero di $f(x)$.

```

C-----Numero di Onde Parziali da Sommare
SUBROUTINE Find_lMax (z,lMax,ErrRel)
IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
C Trova il valore lMax di l per il quale:
C j_1(z)/y_1(z) < ErrRel
C Per grandi l risulta, approssimativamente,
C A(1)=j_1(z)/y_1(z)=-1/2 [ez/(2l+1)]^(2l+1)
C L'equazione |A(1)|=ErrRel
C e' risolta col Metodo di Newton
eps2=LOG(2*ErrRel)
e=EXP(1.D0)
a=e*z
xo=0
x=2*z
DO WHILE (ABS(x-xo).GT.01D0)
xo=x
y=LOG(a/x)
x=xo-(x*y-eps2)/(y-1)
ENDDO
lMax=x/2
RETURN
END

```

• *Programma Bes_h1*

La SUBROUTINE `Bes_h1(ch1, lmax, x)` calcola i valori delle funzioni Sferiche di Bessel, di terza specie, di primo tipo e di argomento `x` per valori di `l` compresi fra 0 e `lMax`. Il calcolo è effettuato utilizzando le relazioni di ricorrenza delle funzioni Sferiche di Bessel a partire dalle espressioni esplicite delle funzioni $h_0^{(1)}(x)$ e $h_1^{(1)}(x)$. I risultati sono restituiti al programma chiamante come elementi del vettore complesso `ch1`.

```
C-----Calcolo delle Funzioni di Bessel
C-----di Terza Specie e Primo Tipo
SUBROUTINE Bes_h1(ch1,lmax,x)
IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
DIMENSION ch1(0:lmax)
ci=(0.D0,1.D0)
ch1(0)=-ci*EXP(ci*x)/x
ch1(1)=ch1(0)*(1.D0/x-ci)
DO l=1, lmax-1
  ch1(l+1)=(2*l+1)/x*ch1(l)-ch1(l-1)
ENDDO
RETURN
END
```

• *Programma SumPar*

La SUBROUTINE `SumPar` riceve dal programma chiamante i valori della funzione di diffusione S_l , per valori di `l` compresi fra 0 e `lm`, come elementi del vettore complesso `cS` ed i valori di `nAng+1` angoli θ_i , ai quali effettuare il calcolo, come elementi del vettore `rad`. La SUBROUTINE per ogni valore di θ_i calcola la somma $\sum_l (2l+1)(1-S_l)P_l(\cos \theta_i)$ a partire da $l=0$ sino a $l=lm$. La somma viene interrotta prima del suo completamento se per 5 volte consecutive risulta soddisfatta una condizione di convergenza. I polinomi di Legendre sono calcolati, ad ogni angolo θ , utilizzando la relazione di ricorrenza:

$$(l+1)P_{l+1}(z) = (2l+1)zP_l(z) - lP_{l-1}(z),$$

con $z = \cos \theta$, a partire dalle espressioni analitiche $P_0(z) = 1$ e $P_1(z) = z$.

Il risultato delle somme ai diversi angoli viene restituito al programma chiamante sotto forma di elementi del vettore complesso `cF`. Negli elementi del vettore intero `lUse` vengono memorizzati i numeri delle onde parziali sommate ai diversi angoli e l'indice `kErr` viene posto eguale a -1 se per qualcuno degli angoli la SUBROUTINE è stata costretta ad utilizzare tutte le `lm` onde parziali.

```
C-----Somma sulle Onde Parziali
SUBROUTINE SumPar(cF,cS,rad,lUse,lm,nAng,kErr)
IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
DIMENSION cS(0:lm)
DIMENSION cF(0:nAng),rad(0:nAng),lUse(0:nAng)
kErr=0
C Errore relativo della somma
Err=1.D-7
C Ciclo sugli angoli
DO iAng=0,nAng
  x=COS(rad(iAng))
  Plm1=1.D0
  Pl=x
  C Contributo di l=0 e l=1
  cSum=(1-cS(0))+3*(1-cS(1))*Pl
  iGo=-1
  kCount=0
  l=1
  C Ciclo su l
  DO WHILE (iGo.EQ.-1 .AND. l.LT.lm)
    Plp1=((l+1+1)*x*Pl-1*Plm1)/(l+1)
    cAdd=(l+1+3)*(1-cS(l+1))*Plp1
    cSum=cSum+cAdd
    xx=ABS(cAdd)
    yy=ABS(cSum)
    C Condizione di convergenza
    IF (xx.LT.Err*yy) THEN
      kCount=kCount+1
      IF (kCount.EQ.5) iGo=0
    ELSE
      kCount=0
    ENDIF
    l=l+1
    Plm1=Pl
    Pl=Plp1
  ENDDO
  IF (l.EQ.lm) kErr=-1
  cF(iAng)=cSum
  lUse(iAng)=l
ENDDO
RETURN
END
```

4.1.2 Diffusione da una Sfera Omogenea Attrattiva

• Programma Principale

Il programma utilizzato per i calcoli per la diffusione da una sfera omogenea attrattiva è il seguente:

```

C-----SUBROUTINE Utilizzate
  INCLUDE 'OPH_FIL.FOR'
  INCLUDE 'WRI_INT.FOR'
  INCLUDE 'PHD_LMX.FOR'
  INCLUDE 'BES_H1.FOR'
  INCLUDE 'SUM_PAR.FOR'
C<<<<<
  INCLUDE 'BES_J.FOR'

PROGRAM Sfera_Trasparente
PARAMETER (lmax=1000,nAng=90)
C>>>>>
  IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
  IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
  DIMENSION cBh1(0:lmax),cS(0:lmax)
  DIMENSION cF(0:nAng),rad(0:nAng),lUse(0:nAng)
C<<<<<
  DIMENSION Bj(0:lmax)
C
C Profondita' del potenziale
  Vo=50
C>>>>>
C Raggio della sfera
  R=5
C Unita' immaginaria
  ci=(0.DO,1.DO)
C Angoli in rad. per la distr. angolare
  pi=2*ASIN(1.DO)
  drad=pi/nAng
  DO iAng=0,nAng
    rad(iAng)=iAng*drad
  ENDDO
C Intervallo dei valori di kR
  rhomin=0
  rhomax=10
C<<<<<
  nrho=161
C>>>>>
  drho=(rhomax-rhomin)/(nrho-1)
C numero Max di onde parziali
  CALL Find_lMax (rhomax, lsup, 1.D-13)
  lsup=5*(INT(lsup/5.))+1
  IF (lsup.GT.lmax) THEN
    WRITE (*,*) 'Dimen. di lmax Insuff.'
    STOP
  ENDIF
C<<<<<
  CALL Open_File('ST16')
C>>>>>
  CALL Write_Int (rhomin,rhomax,nrho,nAng,lsup)

C Ciclo sui valori di rho programmati
DO irho=1,nrho
  rho=(rhomin+(irho-1)*drho)
  IF (rho.EQ.0) rho=1.E-4
  rho2=rho*rho
  lm=lmax
  CALL Find_lMax (rho, lm, 1.D-13)
  IF (lm.LT.5) lm=5
C Calcolo di h'(1)_l(kR)
  CALL Bes_h1(cBh1, lm, rho)
C<<<<<
  fk=rho/R
  E=(fk/.2187)**2
  fH=SQRT(1+Vo/E)
  alpha=fH*rho
C Calcolo di j_l(H kR)
  CALL Bes_j(Bj, lm, alpha, 1.D-13)
  lm=lm-1
C Calcolo di S_l
  DO l=0,lm
    cDen=fH*Bj(l+1)*cBh1(l)-Bj(l)*cBh1(l+1)
    cS(l)=-CUHJG(cDen)/cDen
  ENDDO
C>>>>>
C Calcolo di \sigma_l^{HQ}/\pi R^2
  DO l=0,lsup
    sig_par=0
    IF (1.LE.lm) THEN
      sig_par=ABS(1.DO-cS(l))
      sig_par=(l+1)*sig_par*sig_par/rho2
    ENDIF
    WRITE(12,'(E12.4)') sig_par
  ENDDO
C Calcolo di \sum_l (2l+1)(1-S_l)P_l(\cos \theta)
  CALL SumPar(cF,cS,rad,lUse,lm,nAng,kErr)
C Calcolo di \sigma_{H^2}/(R^2/4)
  DO iAng=0,nAng
    sig_dif=ABS(cF(iAng))/rho
    sig_dif=sig_dif*sig_dif
    WRITE(10,'(E12.4)') sig_dif
  ENDDO
C Calcolo della sez. d'urto totale (Teorema Ottico)
  sig_tot=2*REAL(cF(0))/rho2
  WRITE(11,'(F6.2,2E12.4)') rho,sig_tot,.00001
  ENDDO
  CLOSE(10)
  CLOSE(11)
  CLOSE(12)
  STOP
END

```

La struttura del programma è identica a quella del programma precedente e le poche modifiche apportate sono contenute nelle righe delimitate superiormente dal commento C<<<<< e inferiormente dal commento C>>>>>. Il programma utilizza oltre alle SUBROUTINE utilizzate per il caso della diffusione da una sfera impenetrabile la nuova SUBROUTINE Bes_j, contenuta nel File BES_J.FOR, per il calcolo delle funzioni Sferiche di Bessel di prima specie che intervengono nella definizione di S_l .

• Programma Bes_j

La SUBROUTINE Bes_j (Bj, lMax, x, ErrRel) calcola i valori delle funzioni Sferiche di Bessel di prima specie $j_l(x)$, con $0 \leq l \leq lMax$ con un errore relativo non superiore a ErrRel. I valori calcolati sono forniti al programma chiamante negli elementi del vettore reale Bj.

Poichè le formule di ricorrenza delle funzioni Sferiche di Bessel non sono stabili per la $j_l(x)$, se applicate in avanti, la SUBROUTINE le utilizza all'indietro.

Per farlo `Bes_j` calcola preliminarmente il rapporto $j_l(x)/j_{l-1}(x)$, per $l = \text{lMax}$, utilizzando la frazione continua:

$$\frac{j_l(x)}{j_{l-1}(x)} = \frac{1}{\frac{2l}{x} - \frac{1}{\frac{2(l+1)}{x} - \dots}}$$

Indicato con `Bn` questo rapporto, i numeri `Bj(1-1)=1.DO` e `Bj(1)=Bn` sono proporzionali ai valori delle funzioni Sferiche di Bessel $j_{l-1}(x)$ e $j_l(x)$ e utilizzandoli come valori iniziali nelle formule di ricorrenza delle funzioni di Bessel, applicate all'indietro, si ottengono numeri proporzionali alle $j_l(x)$ sino a $l = 0$. Il valore della costante di proporzionalità è ottenuto dal confronto del numero corrispondente a $l = 0$ con il valore di $j_0(x)$ calcolato utilizzando la sua espressione analitica.

```

C_____Calcolo delle Funzioni di Bessel
C_____di Prima Specie
SUBROUTINE Bes_j (Bj, lMax, x, ErrRel)
  IMPLICIT REAL*8 (A-H, O-Z)
  DIMENSION Bj(0:lMax)
C Inizio calcolo j_1 / j_{l-1}
  n=0
  k=0
  l=lMax
  Bnp=0.DO
  iGo=-1
  DO WHILE (iGo .EQ. -1)
    An=(2*(l+n)+1)/x
    Bn=1.DO/An
    DO WHILE (n-1 .GE. 0)
      Anm1=An-2.DO/x
      Bnm1=1.DO/(Anm1-Bn)
      n=n-1
      An=Anm1
      Bn=Bnm1
    EHDDO
  EHDDO
  IF (ABS(Bnp-Bn) .LT. ErrRel*ABS(Bn)) iGo=0
  k=k+1
  n=k
  Bnp=Bn
  EHDDO
C Fine calcolo j_1 / j_{l-1}
C
C Calcolo di funzioni proporzionali a j_1
  Bj(1-1)=1.DO
  Bj(1)=Bn
C Relazioni di ricorrenza all'indietro
  DO l=lMax-1, 1, -1
    Bj(l-1)=(2*l+1)/x*Bj(l)-Bj(l+1)
  EHDDO
C Normalizza le j_l
  An=Bj(0)*x/SINH(x)
  DO l=0, lMax
    Bj(l)=Bj(l)/An
  EHDDO
  RETURN
  END

```

4.1.3 Diffusione da un Potenziale di Saxon-Woods

- *Programma Principale*

Il programma utilizzato per i calcoli per la diffusione da un potenziale di Saxon-Woods è il seguente:

```

C-----SUBROUTINE Utilizzate
  INCLUDE 'OPH_FIL.FOR'
  INCLUDE 'WRI_INT.FOR'
  INCLUDE 'FND_LMX.FOR'
  INCLUDE 'BES_H1.FOR'
  INCLUDE 'SUM_PAR.FOR'
C<<<<<
  INCLUDE 'POT_GEN.FOR'
  INCLUDE 'INT_RAD.FOR'

C-----Programma Principale
  PROGRAM Saxon_Woods
  PARAMETER (nMax=1000)
  PARAMETER (lmax=1000,nAng=90)
C>>>>
  IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
  IMPLICIT COMPLEX*16 (C)
  DIMENSION cBh1(0:lmax), cS(0:lmax)
  DIMENSION cF(0:nAng),rad(0:nAng),lUse(0:nAng)
C<<<<<
  COMMON /Pot_Com/Pot(0:nMax),h,nStep
C>>>>
C Unita' immaginaria
  ci=(0.D0,1.D0)
C Angoli in rad. per la distr. angolare
  pi=2*ASIN(1.D0)
  drad=pi/nAng
  DO iAng=0,nAng
    rad(iAng)=iAng*drad
  ENDDO
C Intervallo dei valori di kR
  rhomin=0
  rhomax=10
  nrho=161
  drho=(rhomax-rhomin)/(nrho-1)
C numero Max di onde parziali
C<<<<<
  CALL Pot_Gen(rhomax)
  rhocut=h*nstep
  CALL Find_lMax (rhocut, lsup, 1.D-13)
C>>>>
  lsup=5*(INT(lsup/5.))+1)
  IF (lsup.GT.lmax) THEN
    WRITE (*,*) 'Dimen. di lmax Insuff.'
    STOP
  ENDIF
C<<<<<
  CALL Open_File('W550')
C>>>>
  CALL Write_Int(rhomin,rhomax,nrho,nAng,lsup)

C Ciclo sui valori di rho programmati
  DO irho=1,nrho
    rho=(rhomin+(irho-1)*drho)
    IF (rho.EQ.0) rho=1.E-4
    rho2=rho*rho
  C<<<<<
  C Calcolo di V(r)/E
  CALL Pot_Gen(rho)
  rhocut=h*nstep
  lm=lmax
  CALL Find_lMax (rhocut, lm, 1.D-13)
  IF (lm.LT.10) lm=10
  C>>>>
  C Calcolo di h^(1)_l(kR)
  CALL Bes_h1(cBh1, lm, rhocut)
  lm=lm-1
  DO l=0,lm
  C<<<<<
  Calcolo di \phi e \phi'
  CALL Int_Rad(phi,phip,l)
  Calcolo di f_l^{(+)} e di f_l^{(-)}
  cFp=rhocut*cBh1(l)
  cFpp=(1+l)*cBh1(l)-rhocut*cBh1(l+1)
  Calcolo del Wronskiano a denom.
  cDen=phi*cFpp-phip*cFp
  Calcolo di S_l
  cS(l)=-CONJG(cDen)/cDen
  C>>>>
  ENDDO
  C Calcolo di \sigma_l^{NQ}/\pi R^2
  DO l=0,lsup
    sig_par=0
    IF (l.LE.lm) THEN
      sig_par=ABS(1.D0-cS(l))
      sig_par=(1+l)*sig_par*sig_par/rho2
    ENDIF
    WRITE(12,'(E12.4)') sig_par
  ENDDO
  C Calcolo di \sum_l (2l+1)(1-S_l)P_l(\cos \theta)
  CALL SumPar(cF,cS,rad,lUse,lm,nAng,kErr)
  C Calcolo di \sigma_{NQ}/R^2/4
  DO iAng=0,nAng
    sig_dif=ABS(cF(iAng))/rho
    sig_dif=sig_dif*sig_dif
    WRITE(10,'(E12.4)') sig_dif
  ENDDO
  C Calcolo della sez. d'urto totale (Teorema Ottico)
  sig_tot=2*REAL(cF(0))/rho2
  WRITE(11,'(F6.2,2E12.4)') rho,sig_tot,.00001
  ENDDO
  CLOSE(10)
  CLOSE(11)
  CLOSE(12)
  STOP
  END

```

La struttura del programma è ancora identica a quella del programma utilizzato per la sfera impenetrabile e le modifiche apportate compaiono nelle righe delimitate superiormente dal commento C<<<<< e inferiormente dal commento C>>>>. Il programma utilizza oltre alle SUBROUTINE utilizzate per il caso della diffusione da una sfera impenetrabile le nuove SUBROUTINE Pot_Gen, contenuta nel File POT_GEN.FOR, e Int_Rad, contenuta nel File INT_RAD.FOR.

Int_Rad integra numericamente l'equazione radiale di Schrödinger scritta nella forma:

$$\phi''(\rho) = -\left[1 - \frac{V(r)}{E} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right]\phi(\rho),$$

con $\rho = kr$, sino ad un valore rhocut, calcolato da Pot_Gen, in cui il potenziale è considerato trascurabile. Int_Rad restituisce al programma principale i valori di $\phi(\text{rhocut})$ e

$\phi'(\text{rhocut})$ che vengono utilizzati per il calcolo del Wronskiano che compare a denominatore nella definizione di S_i .

• *Programma Pot_Gen*

La SUBROUTINE Pot_Gen(rho) definisce i parametri del potenziale di Saxon-Woods, determina, in corrispondenza al valore di $kR = \text{rho}$ passatogli dal programma chiamante, il valore di rhocut, il passo h ed il numero dei passi nStep di integrazione. L'estremo superiore dell'intervallo di integrazione è fissato nel punto in cui $V(r)/E \simeq 10^{-7}$ ed il passo di integrazione è fissato richiedendo che cadano almeno quaranta punti nell'intervallo corrispondente alla minima lunghezza d'onda. La SUBROUTINE calcola i valori di $V(r)/E$ nei punti del reticolo utilizzato per l'integrazione numerica e li memorizza negli elementi del vettore Pot. I valori del vettore Pot, di h e di nStep sono resi disponibili alla SUBROUTINE Int_Rad e al programma principale tramite l'area comune (COMMON) denominata Pot_Com.

```

SUBROUTINE Pot_Gen(rho)
IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
PARAMETER (nMax=1000)
COMMON /Pot_Com/Pot(0:nMax),h,nStep
Vo=50.DO
R=5.DO
d=.5DO
fk=rho/R
E=(fk/.2187)**2
rhocut=rho*(1-d/R*LOG(1.D-7*E/ABS(Vo)))
h=6.28/40/SQRT(1+ABS(Vo)/E)
nStep=rhocut/h
h=rhocut/nStep
IF (nStep+2.GT.nMax) THEN
WRITE (*,*) 'nMax insufficiente'
STOP
ENDIF
C
DO i=0, nStep+2
rr=i*h/fk
xx=(rr-R)/d
IF (xx.LT.-20) THEN
Pot(i)=-Vo/E
ELSEIF (xx.gt.20) THEN
Pot(i)=0.DO
ELSE
Pot(i)=-Vo/E/(1+EXP(xx))
ENDIF
ENDDO
RETURN
END

```

• *Programma Int_Rad*

La SUBROUTINE Int_Rad(phi,phip,l) utilizza il cosiddetto metodo di Numerov, del quinto ordine nel passo di integrazione, per integrare l'equazione di Schrödinger radiale per l'onda parziale l sino a rhocut e restituisce al programma chiamante il valore della funzione d'onda phi e della sua derivata prima phip in rhocut.

Int_Rad riceve da Pot_Gen, tramite l'area comune Pot_Com, il passo h del reticolo, il numero nStep di passi ed i valori di $V(r)/E$ nei punti del reticolo.

La formula di ricorrenza del metodo di Numerov viene innescata attribuendo a phi il valore 0 nell'origine ed il valore 1.D-30 in h.

L'integrazione numerica si estende di due passi oltre rhocut per poter utilizzare la formula a cinque punti per il calcolo della derivata prima.

```

SUBROUTINE Int_Rad(phi,phip,l)
IMPLICIT REAL*8 (A-B,D-H,O-Z)
PARAMETER (nMax=1000)
COMMON /Pot_Com/Pot(0:nMax),h,nStep
h12=h*h/12
h56=10*h12
llp1=l*(l+1)
Fn=0.DO
Fnp1=(1-Pot(1)-llp1/h/h)
Ynm1=0.DO
Yn=0.DO
Ynp1=0.DO
Ynp2=1.D-30
DO n=2,nStep+2
Ynm2=Ynm1
Ynm1=Yn
Yn=Ynp1
Ynp1=Ynp2
xx=n*h
Fnp2=1.d0-Pot(n)-llp1/(xx*xx)
Ynp2=(2.D0-h56*Fnp1)*Ynp1-(1.D0+h12*Fn)*Yn
Ynp2=Ynp2/(1.D0+h12*Fnp2)
Fn=Fnp1
Fnp1=Fnp2
ENDDO
phi=Yn
phip=(Ynm2-8*Ynm1+8*Ynp1-Ynp2)/(12*h)
RETURN
END

```