

Appunti di Meccanica Quantistica

Anni accademici 2004-10

Camillo Imbimbo

*Dipartimento di Fisica dell'Università di Genova
Via Dodecaneso, I-16136, Genova, Italia*

Riferimenti bibliografici

- Meccanica Quantistica: Teoria non-relativistica: L. D. Landau, E. Lifšits, Corso di Fisica Teorica, Vol. 3 (Editori Riuniti-Edizioni Mir, 1976).
- Quantum Mechanics, Vol 1 e 2: IC. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, (John Wiley & Sons., 1977).

Avvertenza

Queste note sono indirizzate agli studenti del corso di “Meccanica Quantistica 2” del terzo anno della Laurea in Fisica dell’Università di Genova. Questi appunti *non* costituiscono delle dispense e *non intendono sostituire in alcun modo* i testi di riferimento indicati o qualunque altro dei numerosi, e talvolta eccellenti, libri esistenti che coprono il materiale discusso nel corso (e molto altro). Questi appunti sono sostanzialmente una raccolta di problemi le cui soluzioni illustrano e, quando ho ritenuto opportuno, richiamano gli aspetti della teoria generale che sono stati esaminati durante il corso. Alcune di queste applicazioni sono tratte dalle prove di esame del corso, le cui soluzioni sono disponibili in un documento separato: in generale la discussione di tali problemi presentata nelle presenti note è più approfondita rispetto alla soluzione indicata nella raccolta delle prove di esame.

Indice

1	Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo	4
1.1	Teoria delle perturbazioni degenerare	4
1.1.1	Degenerazione rimossa al primo ordine	5
1.1.2	Degenerazione rimossa al secondo ordine	7
1.2	Correzione al terzo ordine del livello fondamentale dell'oscil- latore anarmonico	11
1.3	Caso degenerare al secondo ordine: oscillatore armonico in 2 dimensioni	12
1.3.1	Gli autostati esatti	15
1.4	Barriera dentro buca	16
1.5	Struttura iperfine in campo magnetico	20
2	Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo	22
2.1	Oscillatore forzato	22
2.1.1	Teoria delle perturbazioni	23
2.1.2	Soluzione esatta	23
2.1.3	Esempio: radiazione su elettroni atomici in approssi- mazione di dipolo	27
2.2	Atomo di idrogeno in campo elettrico	30
2.2.1	Rimozione della degenerazione accidentale	31
2.2.2	Campo elettrico uniforme costante	34
2.2.3	Perturbazione periodica	36
2.3	Regole di selezione per il momento angolare	39
2.3.1	Il teorema di Wigner-Eckart	41
2.4	Sistema a due livelli	44
2.4.1	Calcolo perturbativo al terzo ordine	47
2.5	Transizioni a stati nello spettro continuo	48
2.5.1	Perturbazioni periodiche	51
2.5.2	Buca di potenziale uni-dimensionale	54
2.5.3	Buca di potenziale infinitamente sottile e profonda	59
2.5.4	La densità degli stati dello spettro continuo	61
2.5.5	Buca di potenziale tridimensionale	64
3	Diffusione e matrice S	71
3.1	Relazione tra matrice S ed ampiezza di diffusione	71
3.2	Matrice S dalla teoria delle perturbazioni "old-fashioned"	77

3.3	Matrice S dalla teoria delle perturbazioni “covariante”	77
3.4	L’ampiezza di diffusione di Born dalla regola di Fermi	80
3.5	Il teorema ottico	81
4	Ampiezze parziali	83
4.1	Ampiezze parziali a bassa energia	86
4.2	Relazione con la funzione d’onda radiale	89
4.3	Il caso “risonante”	92
4.3.1	$l = 0$	94
4.3.2	$l \geq 1$	97
4.3.3	Esempio: il potenziale $V(r) = \lambda \delta(r - a)$	99
4.3.4	Esempio: il potenziale $V_\lambda(r) = -\frac{\hbar^2}{m a^2} \frac{\lambda}{\cosh^2 \frac{r}{a}}$	105
4.4	La buca/barriera di potenziale sferica	107
4.4.1	Approssimazione di Born	108
4.4.2	Approssimazione iconale	109
4.4.3	Ampiezza iconale nel limite semi-classico	111
4.4.4	Ampiezze parziali e limite di bassa energia	113
5	Stati coerenti e stati “squeezed”	119
5.1	Stati di minima indeterminazione	119
5.2	Rappresentazione olomorfa	121
5.3	Amplificatore parametrico degenere	126
6	Le disuguaglianze di Bell	128

1 Teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo

1.1 Teoria delle perturbazioni degenere

Le equazioni agli autovalori scritte nella base degli autovettori dell’Hamiltoniana imperturbata sono

$$(E_\alpha - E_\beta^{(0)}) a_{\beta\alpha} = \sum_\gamma V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha} \quad (1.1)$$

Sostituendo le espansioni

$$\begin{aligned} E_\alpha &= E_\alpha^{(0)} + E_\alpha^{(1)} + E_\alpha^{(2)} + \dots \\ a_{\beta\alpha} &= a_{\beta\alpha}^{(0)} + a_{\beta\alpha}^{(1)} + a_{\beta\alpha}^{(2)} + \dots \end{aligned} \quad (1.2)$$

Otteniamo all'ordine zero

$$(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) a_{\beta\alpha}^{(0)} = 0 \quad (1.3)$$

cioè

$$a_{\beta\alpha}^{(0)} = 0 \quad \text{per} \quad \alpha \not\sim \beta \quad (1.4)$$

dove abbiamo introdotto la notazione $\alpha \sim \beta$ per indicare che $E_\alpha^{(0)} = E_\beta^{(0)}$.

Al primo ordine

$$E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(0)} + (E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) a_{\beta\alpha}^{(1)} = \sum_\gamma V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(0)} = \sum_{\gamma \sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(0)} \quad (1.5)$$

Per $\beta \sim \alpha$ questa equazione diventa

$$E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(0)} = \sum_{\gamma \sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(0)} \quad \alpha \sim \beta \quad (1.6)$$

che è l'equazione agli autovalori per V ristretta all'autospazio relativo ad α . Prendiamo gli autovettori imperturbati degeneri $\psi_\beta^{(0)}$ con $\beta \sim \alpha$ autostati di questa matrice. Allora

$$V_{\beta\gamma} = \delta_{\beta\gamma} E_\beta^{(1)} \quad \beta \sim \gamma \sim \alpha \quad (1.7)$$

1.1.1 Degenerazione rimossa al primo ordine

Se la degenerazione del livello α è completamente rimossa al primo ordine (tutti gli $E_\beta^{(1)}$, con $\beta \sim \alpha$ sono diversi) la base degli autovettori imperturbati degeneri è fissata dalla richiesta di diagonalizzazione della matrice $V_{\beta\gamma}$ ristretta all'autospazio α . Con questa scelta abbiamo

$$a_{\beta\alpha}^{(0)} = \delta_{\alpha\beta} \quad (1.8)$$

per tutti i β ed α . Prendendo $\beta \not\sim \alpha$ nell'equazione del primo ordine otteniamo

$$a_{\beta\alpha}^{(1)} = \frac{V_{\beta\alpha}}{E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}} \quad \beta \not\sim \alpha \quad (1.9)$$

Si noti che $a_{\beta\alpha}^{(1)}$ con $\beta \sim \alpha$ non è determinato dalle equazioni del primo ordine. Consideriamo l'equazione del secondo ordine

$$E_{\alpha}^{(2)} a_{\beta\alpha}^{(0)} + E_{\alpha}^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} + (E_{\alpha}^{(0)} - E_{\beta}^{(0)}) a_{\beta\alpha}^{(2)} = \sum_{\gamma} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} \quad (1.10)$$

Per $\beta \sim \alpha$ e $\beta \neq \alpha$ otteniamo

$$E_{\alpha}^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} = \sum_{\gamma} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} = E_{\beta}^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} + \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\alpha}}{E_{\alpha}^{(0)} - E_{\gamma}^{(0)}} \quad (1.11)$$

e dunque

$$a_{\beta\alpha}^{(1)} = \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_{\alpha}^{(1)} - E_{\beta}^{(1)}) (E_{\alpha}^{(0)} - E_{\gamma}^{(0)})} \quad \beta \sim \alpha \text{ e } \beta \neq \alpha \quad (1.12)$$

L'equazione del secondo ordine con $\beta = \alpha$ dà invece

$$E_{\alpha}^{(2)} + E_{\alpha}^{(1)} a_{\alpha\alpha}^{(1)} = \sum_{\gamma} V_{\alpha\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} = V_{\alpha\alpha} a_{\alpha\alpha}^{(1)} + \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_{\alpha}^{(0)} - E_{\gamma}^{(0)})} \quad (1.13)$$

ovvero

$$E_{\alpha}^{(2)} = \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_{\alpha}^{(0)} - E_{\gamma}^{(0)})} \quad (1.14)$$

Si noti che la condizione di ortonormalità per ψ_{α} al primo ordine è

$$(a_{\beta\alpha}^{(1)})^* + a_{\alpha\beta}^{(1)} = 0 \quad (1.15)$$

Questa condizione, che è soddisfatta dalle soluzioni trovate per $\beta \neq \alpha$, per $\beta = \alpha$ diventa

$$\Re(a_{\alpha\alpha}^{(1)}) = 0 \quad (1.16)$$

Scegliendo la fase della funzione d'onda possiamo porre a zero anche la parte immaginaria di $a_{\alpha\alpha}^{(1)}$. In conclusione

$$a_{\alpha\alpha}^{(1)} = 0 \quad (1.17)$$

Infine l'equazione del secondo ordine per $\beta \not\sim \alpha$ diventa

$$\begin{aligned} (E_{\alpha}^{(0)} - E_{\beta}^{(0)}) a_{\beta\alpha}^{(2)} &= \sum_{\gamma} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} - E_{\alpha}^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} = \\ &= \sum_{\gamma \sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} + \sum_{\gamma \not\sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} - E_{\alpha}^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} \end{aligned}$$

Dunque

$$\begin{aligned}
a_{\beta\alpha}^{(2)} = & \sum_{\gamma \not\sim \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})} - \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\beta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})^2} + \\
& + \sum_{\gamma \sim \alpha, \gamma \neq \alpha} \sum_{\delta \not\sim \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(1)} - E_\gamma^{(1)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})} \quad (1.18)
\end{aligned}$$

1.1.2 Degenerazione rimossa al secondo ordine

Supponiamo che la degenerazione non venga rimossa al primo ordine. Consideriamo il caso in cui tutti gli $E_\beta^{(1)}$ sono coincidenti. La matrice V ristretta all'autospazio relativo a α è proporzionale all'identità

$$V_{\beta\gamma} = E_\alpha^{(1)} \delta_{\beta\gamma} \quad \beta \sim \gamma \sim \alpha \quad (1.19)$$

così che la base dell'autospazio degenerare non è determinata dall'equazione secolare del primo ordine. L'equazione del primo ordine per $\beta \not\sim \alpha$ è

$$a_{\beta\alpha}^{(1)} = \sum_{\gamma \sim \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(0)}}{E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}} \quad \beta \not\sim \alpha \quad (1.20)$$

L'equazione del secondo ordine per $\beta \sim \alpha$ dà pertanto

$$E_\alpha^{(2)} a_{\beta\alpha}^{(0)} + E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} = E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} + \sum_{\gamma \not\sim \alpha} \sum_{\delta \sim \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta}}{E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)}} a_{\delta\alpha}^{(0)} \quad (1.21)$$

che è l'equazione secolare del secondo ordine per $a_{\beta\alpha}^{(0)}$. Gli autovalori della matrice ristretta al sottospazio α

$$(\mathcal{V}_\alpha^{(2)})_{\beta\delta} = \sum_{\gamma \not\sim \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta}}{E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)}} \quad \beta \sim \delta \sim \alpha \quad (1.22)$$

danno le correzioni del secondo ordine del livello degenerare. Scegliamo come autovettori imperturbati $\psi_\beta^{(0)}$, con $\beta \sim \alpha$, gli autovettori di $\mathcal{V}_\alpha^{(2)}$. Con questa scelta

$$\sum_{\gamma \not\sim \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta}}{E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)}} = \delta_{\beta\delta} E_\beta^{(2)} \quad \beta \sim \delta \sim \alpha \quad (1.23)$$

Se gli $E_\beta^{(2)}$ sono tutti diversi autovettori imperturbati $\psi_\beta^{(0)}$ sono unicamente determinati e

$$a_{\beta\alpha}^{(0)} = \delta_{\beta\alpha} \quad (1.24)$$

per tutti i β ed α . In questa base riotteniamo la formula usuale per i coefficienti del primo ordine

$$a_{\beta\alpha}^{(1)} = \frac{V_{\beta\alpha}}{E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}} \quad \beta \not\sim \alpha \quad (1.25)$$

L'equazione del secondo ordine per $\beta \not\sim \alpha$

$$(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) a_{\beta\alpha}^{(2)} = \sum_{\gamma \sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} + \sum_{\gamma \not\sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)} - E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(1)} \quad (1.26)$$

contiene ancora i coefficienti $a_{\beta\alpha}^{(1)}$ con $\beta \sim \alpha$ che non sono determinati dalle equazioni del secondo ordine.

Consideriamo allora l'equazione del terzo ordine

$$E_\alpha^{(3)} a_{\beta\alpha}^{(0)} + E_\alpha^{(2)} a_{\beta\alpha}^{(1)} + E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(2)} + (E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) a_{\beta\alpha}^{(3)} = \sum_{\gamma} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(2)} \quad (1.27)$$

Per $\beta \sim \alpha$ e $\beta \neq \alpha$ abbiamo

$$E_\alpha^{(2)} a_{\beta\alpha}^{(1)} + E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(2)} = \sum_{\gamma \not\sim \alpha} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(2)} + E_\alpha^{(1)} a_{\beta\alpha}^{(2)} \quad (1.28)$$

Sostituendo in quest'equazione l'espressione (1.26) per $a_{\gamma\alpha}^{(2)}$ con $\gamma \not\sim \alpha$ otteniamo

$$\begin{aligned} E_\alpha^{(2)} a_{\beta\alpha}^{(1)} &= \sum_{\gamma \not\sim \alpha} \frac{\sum_{\delta \sim \alpha} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} a_{\delta\alpha}^{(1)} + \sum_{\delta \not\sim \alpha} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} a_{\delta\alpha}^{(1)} - E_\alpha^{(1)} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)}}{E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)}} = \\ &= E_\beta^{(2)} a_{\beta\alpha}^{(1)} + \sum_{\gamma \not\sim \alpha} \frac{\sum_{\delta \not\sim \alpha} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} a_{\delta\alpha}^{(1)} - E_\alpha^{(1)} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)}}{E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)}} \end{aligned} \quad (1.29)$$

Dunque

$$a_{\beta\alpha}^{(1)} = \sum_{\gamma \not\sim \alpha} \frac{\sum_{\delta \not\sim \alpha} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} a_{\delta\alpha}^{(1)} - E_\alpha^{(1)} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)}}{(E_\alpha^{(2)} - E_\beta^{(2)})(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})} =$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{\gamma \neq \alpha} \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(2)} - E_\beta^{(2)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})} + \\
&- \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(2)} - E_\beta^{(2)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})^2} \quad \beta \sim \alpha \quad \beta \neq \alpha \quad (1.30)
\end{aligned}$$

La condizione di ortonormalità delle autofunzioni e la scelta di un fattore di fase arbitrario impongono

$$a_{\alpha\alpha}^{(1)} = 0 \quad (1.31)$$

Dalla (1.26) otteniamo i coefficienti del secondo ordine per $\beta \not\sim \alpha$:

$$\begin{aligned}
a_{\beta\alpha}^{(2)} &= \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})} - \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\beta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})} + \\
&+ \sum_{\substack{\gamma \sim \alpha \\ \gamma \neq \alpha}} \frac{V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})} \quad (1.32)
\end{aligned}$$

Questa equazione vale in *qualsunque* caso, sia esso degenere che non-degenere. Nel caso non-degenere l'ultimo termine — quello dipendente dai coefficienti del primo ordine $a_{\gamma\alpha}^{(1)}$ — ovviamente si annulla. Nel caso degenere, con degenerazione rimossa completamente al primo ordine, sostituendo l'espressione per $a_{\gamma\alpha}^{(1)}$ (con $\gamma \sim \alpha, \gamma \neq \alpha$) ottenuta in (1.12), si ricava la (1.18). Nel caso in cui la degenerazione è rimossa soltanto al secondo ordine, otteniamo invece, sostituendo la (1.30):

$$\begin{aligned}
a_{\beta\alpha}^{(2)} &= \sum_{\substack{\gamma \sim \alpha \\ \gamma \neq \alpha}} \sum_{\delta \neq \alpha} \sum_{\epsilon \neq \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\epsilon} V_{\epsilon\alpha}}{(E_\alpha^{(2)} - E_\gamma^{(2)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\epsilon^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})} + \\
&- \sum_{\substack{\gamma \sim \alpha \\ \gamma \neq \alpha}} \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(2)} - E_\gamma^{(2)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})^2} + \\
&+ \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{V_{\beta\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})} - \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\beta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)}) (E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})} \quad (1.33)
\end{aligned}$$

con $\beta \not\sim \alpha$.

Consideriamo ora la correzione al terzo ordine $E_\alpha^{(3)}$ per l'autovalore dell'energia. Questa si ottiene prendendo $\beta = \alpha$ nell'equazione del terzo ordine

(1.27):

$$E_\alpha^{(3)} = \sum_\gamma V_{\alpha\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(2)} - E_\alpha^{(1)} a_{\alpha\alpha}^{(2)} = \sum_{\gamma \neq \alpha} V_{\alpha\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(2)} \quad (1.34)$$

Anche questa equazione vale in *qualsunque* caso, sia esso degenere che non-degenere. Si noti che il calcolo di $E_\alpha^{(3)}$ non richiede la conoscenza dei coefficienti $a_{\beta\alpha}^{(2)}$ con $\beta \sim \alpha$. Sostituendo in quest'equazione la (1.32), otteniamo un'equazione anch'essa valida sia nel caso degenere che non degenere:

$$\begin{aligned} E_\alpha^{(3)} &= \sum_{\gamma \neq \alpha} \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})} - \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})^2} + \\ &+ \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{\substack{\gamma \sim \alpha \\ \gamma \neq \alpha}} \frac{V_{\alpha\beta} V_{\beta\gamma} a_{\gamma\alpha}^{(1)}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})} \end{aligned} \quad (1.35)$$

Nel caso non degenere l'ultimo termine si annulla. Nel caso degenere con degenerazione rimossa al primo ordine dobbiamo sostituire la (1.12)

$$\begin{aligned} E_\alpha^{(3)} &= \sum_{\gamma \neq \alpha} \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})} - \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})^2} + \\ &+ \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{\substack{\gamma \sim \alpha \\ \gamma \neq \alpha}} \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\beta} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})(E_\alpha^{(1)} - E_\gamma^{(1)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})} \end{aligned} \quad (1.36)$$

Nel caso in cui la degenerazione è rimossa al secondo ordine otteniamo invece, sostituendo la (1.30)

$$\begin{aligned} E_\alpha^{(3)} &= \sum_{\gamma \neq \alpha} \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})} - \sum_{\gamma \neq \alpha} \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\alpha\gamma} V_{\gamma\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\gamma^{(0)})^2} + \\ &+ \sum_{\beta \neq \alpha} \sum_{\substack{\gamma \sim \alpha \\ \gamma \neq \alpha}} \left[\sum_{\delta \neq \alpha} \sum_{\epsilon \neq \alpha} \frac{V_{\alpha\beta} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\epsilon} V_{\epsilon\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})(E_\alpha^{(2)} - E_\gamma^{(2)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})(E_\alpha^{(0)} - E_\epsilon^{(0)})} + \right. \\ &\left. - \sum_{\delta \neq \alpha} \frac{E_\alpha^{(1)} V_{\alpha\beta} V_{\beta\gamma} V_{\gamma\delta} V_{\delta\alpha}}{(E_\alpha^{(0)} - E_\beta^{(0)})(E_\alpha^{(2)} - E_\gamma^{(2)})(E_\alpha^{(0)} - E_\delta^{(0)})^2} \right] \end{aligned} \quad (1.37)$$

1.2 Correzione al terzo ordine del livello fondamentale dell'oscillatore anarmonico

L'Hamiltoniana è

$$H = H_0 + V \quad (1.38)$$

dove

$$\begin{aligned} H_0 &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \\ V &= gx^4 = \hbar\omega\frac{\gamma}{4}(a^\dagger - a)^4 \\ x &= i\lambda(a - a^\dagger) \quad \lambda \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \end{aligned} \quad (1.39)$$

ed abbiamo introdotto l'accoppiamento anarmonico adimensionale

$$\gamma \equiv \frac{g\hbar}{m\omega^3} \quad (1.40)$$

Abbiamo

$$4V|0\rangle = \sqrt{2 \cdot 3 \cdot 4}|4\rangle - 6\sqrt{2}|2\rangle + 3|0\rangle \quad (1.41)$$

da cui deduciamo la correzione all'energia del fondamentale fino al secondo ordine

$$\begin{aligned} \frac{E_0(\gamma)}{\hbar\omega} &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\gamma - \frac{\gamma^2}{16}\left[\frac{6^2 \cdot 2}{2} + \frac{2 \cdot 3 \cdot 4}{4}\right] + \dots \\ &= \frac{1}{2} + \frac{3}{4}\gamma - \frac{21}{8}\gamma^2 + \dots \end{aligned} \quad (1.42)$$

Per la correzione del terzo ordine abbiamo bisogno di calcolare gli elementi di matrice di $\langle n|V|m\rangle$ per $n, m = 2, 4$. Scriviamo

$$\begin{aligned} 4V &= \left[a^2 + (a^\dagger)^2 - (2\hat{N} + 1)\right]^2 = \\ &= a^4 + (a^\dagger)^4 - \{a^2 + (a^\dagger)^2, 2\hat{N} + 1\} + \{a^2, (a^\dagger)^2\} + (2\hat{N} + 1)^2 \end{aligned}$$

Pertanto

$$\begin{aligned} \langle 2|4V|2\rangle &= 5^2 + \langle 2|\{a^2, (a^\dagger)^2\}|2\rangle = 5^2 + 3 \cdot 4 + 2 \cdot 1 = 39 \\ \langle 4|4V|4\rangle &= 9^2 + \langle 4|\{a^2, (a^\dagger)^2\}|4\rangle = 81 + 5 \cdot 6 + 4 \cdot 3 = 123 \\ \langle 4|4V|2\rangle &= \langle 2|4V|4\rangle = -5\sqrt{3 \cdot 4} - 9\sqrt{3 \cdot 4} = -28\sqrt{3} \end{aligned}$$

La correzione del terzo ordine è pertanto

$$\begin{aligned}
4^3 \frac{E_0^{(3)}}{\hbar \omega} &= 4^3 \left[\frac{|V_{02}|^2 V_{22}}{4} + \frac{|V_{04}|^2 V_{44}}{16} + 2 \frac{V_{02} V_{24} V_{40}}{4 \cdot 2} + \right. \\
&\quad \left. - 3 \left(\frac{|V_{02}|^2}{4} + \frac{|V_{04}|^2}{16} \right) \right] = \\
&= \frac{6^2 \cdot 2 \cdot 39}{4} + \frac{2 \cdot 3 \cdot 4 \cdot 123}{16} + \frac{-6\sqrt{2} \cdot (-28\sqrt{3})\sqrt{2 \cdot 3 \cdot 4}}{4} + \\
&\quad - 3 \left(\frac{6^2 \cdot 2}{4} + \frac{2 \cdot 3 \cdot 4}{16} \right) = \\
&= 3^2 \cdot 2 \cdot 39 + \frac{3 \cdot 123}{2} + 3^2 \cdot 56 - 3^3 \cdot 2 - \frac{3^2}{2} = \\
&= 3^2 \cdot 128 + \frac{3 \cdot 120}{2} = 3^2 \cdot 128 + 180 = 1332
\end{aligned}$$

In definitiva

$$\frac{E_0(\gamma)}{\hbar \omega} = \frac{1}{2} + \frac{3}{4} \gamma - \frac{21}{8} \gamma^2 + \frac{333}{16} \gamma^3 + \dots \quad (1.43)$$

1.3 Caso degenere al secondo ordine: oscillatore armonico in 2 dimensioni

Consideriamo l'hamiltoniana di un oscillatore armonico in 2d

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^2 \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \frac{m \omega^2 \hat{x}_i^2}{2} \quad (1.44)$$

perturbata dal potenziale

$$\hat{V} = m \Omega^2 x_1 x_2 = m \lambda^2 \Omega^2 (a_1 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_2 - a_1 a_2 - a_1^\dagger a_2^\dagger) \quad (1.45)$$

dove

$$\lambda \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (1.46)$$

Vogliamo calcolare la perturbazione al primo livello eccitato fino al secondo ordine.

Abbiamo

$$\begin{aligned}
\frac{\hat{V}}{m \lambda^2 \Omega^2} |1, 0\rangle &= |0, 1\rangle - \sqrt{2} |2, 1\rangle \\
\frac{\hat{V}}{m \lambda^2 \Omega^2} |1, 0\rangle &= |1, 0\rangle - \sqrt{2} |1, 2\rangle
\end{aligned} \quad (1.47)$$

Pertanto la matrice associata a V sul livello degenere è

$$\frac{\hat{V}}{m \lambda^2 \Omega^2} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (1.48)$$

e gli autovalori dell'energia al primo ordine sono

$$E_{\pm}^{(1)} = 2 \hbar \omega \pm \frac{\hbar \Omega^2}{2\omega} = 2 \hbar \omega \left(1 \pm \frac{\Omega^2}{4\omega^2} \right) \quad (1.49)$$

I corrispondenti autostati al primo ordine sono

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|1, 0\rangle \pm |0, 1\rangle) \quad (1.50)$$

Pertanto

$$\frac{\hat{V}}{m \lambda^2 \Omega^2} |\pm\rangle = \pm |\pm\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{2} (|2, 1\rangle \pm |1, 2\rangle) = \pm |\pm\rangle - (|2, 1\rangle \pm |1, 2\rangle) \quad (1.51)$$

Le correzioni al secondo ordine delle energie

$$\Delta E_{\pm}^{(2)} = \sum_{\alpha \neq |\pm\rangle} \frac{|\langle \alpha | V | \pm \rangle|^2}{2 \hbar \omega - E_{\alpha}^{(0)}} \quad (1.52)$$

dove $|\alpha\rangle$ corre sugli autostati dell'Hamiltoniana imperturbata, si scrivono dunque

$$\Delta E_{\pm}^{(2)} = -2 \left(\frac{\hbar \Omega^2}{2\omega} \right)^2 \frac{1}{4 \hbar \omega - 2 \hbar \omega} = -\hbar \omega \frac{\Omega^4}{4\omega^4} \quad (1.53)$$

In definitiva, gli autovalori dell'energia al secondo ordine sono

$$E_{\pm} = 2 \hbar \omega \left(1 \pm \frac{\Omega^2}{4\omega^2} - \frac{\Omega^4}{8\omega^4} + \dots \right) \quad (1.54)$$

Confrontiamo con il risultato esatto. L'Hamiltoniana totale si scrive

$$\hat{H} = \hbar \Omega_+ a_+^\dagger a_+ + \hbar \Omega_- a_-^\dagger a_- + \frac{\hbar}{2} (\Omega_+ + \Omega_-) \quad (1.55)$$

dove

$$\Omega_{\pm} = \sqrt{\omega^2 \pm \Omega^2} \quad (1.56)$$

Gli autovalori esatti corrispondenti al primo livello eccitato imperturbato sono

$$\begin{aligned}
E_{\pm} &= \hbar \Omega_{\pm} + \frac{\hbar}{2} (\Omega_{+} + \Omega_{-}) = \\
&= \hbar \omega \left[1 \pm \frac{\Omega^2}{2\omega^2} - \frac{\Omega^4}{8\omega^4} + O\left(\frac{\Omega^6}{\omega^6}\right) + \right. \\
&\quad \left. + 1 - \frac{\Omega^4}{8\omega^4} + O\left(\frac{\Omega^6}{\omega^6}\right) \right] \tag{1.57}
\end{aligned}$$

in accordo con la (1.54).

Deduciamo anche le correzioni al primo ordine degli stati dalla teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo. La perturbazione di primo ordine agli stati $|\pm\rangle$ si scrive

$$|\pm\rangle^{(1)} = |\pm\rangle + a_{\mp\pm}^{(1)}|\mp\rangle + \sum_{\beta \neq |\pm\rangle} a_{\beta\pm}^{(1)}|\beta\rangle \tag{1.58}$$

Abbiamo

$$a_{\beta\pm}^{(1)} = \frac{V_{\beta\pm}}{E_{\pm}^{(0)} - E_{\beta}^{(0)}} \quad |\beta\rangle \neq |\pm\rangle \tag{1.59}$$

dunque

$$\begin{aligned}
|\pm\rangle^{(1)} &= |\pm\rangle + a_{\mp\pm}^{(1)}|\mp\rangle + \frac{m\lambda^2\Omega^2}{2\hbar\omega}(|2,1\rangle \pm |1,2\rangle) = \\
&= |\pm\rangle + a_{\mp\pm}^{(1)}|\mp\rangle + \frac{\Omega^2}{4\omega^2}(|2,1\rangle \pm |1,2\rangle) \tag{1.60}
\end{aligned}$$

Inoltre

$$\begin{aligned}
a_{\mp\pm}^{(1)} &= \frac{V_{\mp|2,1\rangle} V_{|2,1\rangle\pm}}{(\pm\frac{\hbar\Omega^2}{\omega})(2\hbar\omega)} + \frac{V_{\mp|1,2\rangle} V_{|1,2\rangle\pm}}{(\pm\frac{\hbar\Omega^2}{\omega})(2\hbar\omega)} = \\
&= \pm \frac{m^2\lambda^4\Omega^2}{2\hbar^2} (1 - 1) = 0
\end{aligned}$$

In definitiva

$$|\pm\rangle^{(1)} = |\pm\rangle + \frac{\Omega^2}{4\omega^2}(|2,1\rangle \pm |1,2\rangle) \tag{1.61}$$

1.3.1 Gli autostati esatti

Calcoliamo anche gli autostati esatti. Avendo definito

$$a_{1,2} = \frac{\lambda p_{1,2}}{\hbar} - \frac{i x_{1,2}}{2 \lambda} \quad (1.62)$$

e

$$\begin{aligned} x_{1,2} &= i \lambda (a_{1,2} - a_{1,2}^\dagger) \\ p_{1,2} &= \frac{\hbar}{2 \lambda} (a_{1,2} + a_{1,2}^\dagger) \end{aligned} \quad (1.63)$$

abbiamo

$$a_\pm = \frac{\lambda_\pm p_\pm}{\hbar} - \frac{i x_\pm}{2 \lambda_\pm} \quad (1.64)$$

dove

$$\lambda_\pm \equiv \sqrt{\frac{\hbar}{2 m \Omega_\pm}} \quad (1.65)$$

e

$$x_\pm = \frac{x_1 \pm x_2}{\sqrt{2}} \quad p_\pm = \frac{p_1 \pm p_2}{\sqrt{2}} \quad (1.66)$$

Posto dunque

$$A_\pm = \frac{\lambda p_\pm}{\hbar} - \frac{i x_\pm}{2 \lambda} = \frac{a_1 \pm a_2}{\sqrt{2}} \quad (1.67)$$

abbiamo

$$\begin{aligned} a_\pm &= \frac{\lambda_\pm \frac{\hbar}{2 \lambda} (A_\pm + A_\pm^\dagger)}{\hbar} - \frac{i i \lambda (A_\pm - A_\pm^\dagger)}{2 \lambda_\pm} = \\ &= \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_\pm}{\lambda} + \frac{\lambda}{\lambda_\pm} \right) A_\pm + \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda_\pm}{\lambda} - \frac{\lambda}{\lambda_\pm} \right) A_\pm^\dagger = \\ &= \cosh \theta_\Omega^\pm A_\pm + \sinh \theta_\Omega^\pm A_\pm^\dagger \end{aligned} \quad (1.68)$$

con

$$\tanh \theta_\Omega^\pm = \frac{\lambda_\pm^2 - \lambda^2}{\lambda_\pm^2 + \lambda^2} = \frac{\omega - \Omega_\pm}{\omega + \Omega_\pm} = \frac{1 - \sqrt{1 \pm \frac{\Omega^2}{\omega^2}}}{1 + \sqrt{1 \pm \frac{\Omega^2}{\omega^2}}} \quad (1.69)$$

Pertanto

$$a_\pm = e^{-\frac{\theta_\Omega^\pm}{2} ((A_\pm^\dagger)^2 - A_\pm^2)} A_\pm e^{\frac{\theta_\Omega^\pm}{2} ((A_\pm^\dagger)^2 - A_\pm^2)} \quad (1.70)$$

Il vuoto relativo agli oscillatori a_{\pm} è

$$|0\rangle_{\pm} = e^{-\frac{\theta_{\pm}^{\dagger}}{2} ((A_{\pm}^{\dagger})^2 - A_{\pm}^2)} |0\rangle \quad (1.71)$$

Lo stato fondamentale esatto del sistema è

$$\psi_0 = |0\rangle_+ |0\rangle_- \quad (1.72)$$

Al primo ordine in $\frac{\Omega^2}{\omega^2}$

$$\begin{aligned} \psi_0 &= |0, 0\rangle - \frac{\theta_{\Omega}^+}{2} (A_+^{\dagger})^2 |0, 0\rangle - \frac{\theta_{\Omega}^-}{2} (A_-^{\dagger})^2 |0, 0\rangle = \dots \\ &= |0, 0\rangle - \frac{\theta_{\Omega}^+}{2 \cdot 2} (\sqrt{2}|2, 0\rangle + 2|1, 1\rangle + \sqrt{2}|0, 2\rangle) + \\ &\quad - \frac{\theta_{\Omega}^-}{2 \cdot 2} (\sqrt{2}|2, 0\rangle - 2|1, 1\rangle + \sqrt{2}|0, 2\rangle) + \dots \\ &= |0, 0\rangle + \frac{\Omega^2}{4 \cdot 4 \omega^2} 4|1, 1\rangle + \dots = \\ &= |0, 0\rangle + \frac{\Omega^2}{4 \omega^2} |1, 1\rangle + \dots \end{aligned} \quad (1.73)$$

I primi due stati eccitati sono

$$\begin{aligned} a_{\pm}^{\dagger} \psi_0 &= a_{\pm}^{\dagger} |0, 0\rangle + \frac{\Omega^2}{4 \omega^2} a_{\pm}^{\dagger} |1, 1\rangle + \dots = \\ &= A_{\pm}^{\dagger} |0, 0\rangle + \frac{\Omega^2}{4 \omega^2} (|2, 1\rangle \pm |1, 2\rangle) + \dots \end{aligned} \quad (1.74)$$

1.4 Barriera dentro buca

Il sistema imperturbato è quello di una particella unidimensionale confinata in un intervallo della retta di lunghezza $2a$. I livelli energetici sono

$$E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8 m a^2}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (1.75)$$

Prendendo la coordinata x della particella nell'intervallo $[-a, a]$, le autofunzioni normalizzate imperturbate si scrivono

$$\begin{aligned} \psi_0^{(+,k)} &= \frac{1}{\sqrt{a}} \cos \frac{k \pi x}{2 a} & k = 1, 3, 5, \dots \\ \psi_0^{(-,k)} &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin \frac{k \pi x}{2 a} & k = 2, 4, 6, \dots \end{aligned} \quad (1.76)$$

Consideriamo la perturbazione

$$V(x) = \lambda \delta(x) \quad \lambda > 0 \quad (1.77)$$

Le autofunzioni in presenza del potenziale soddisfano l'equazione

$$\frac{\Delta\psi'(0)}{\psi(0)} = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \quad (1.78)$$

dove $\Delta\psi'(0)$ è la discontinuità della derivata della funzione d'onda in $x = 0$. Per funzioni d'onda dispari la derivata è pari, e quindi $\Delta\psi'(0) = 0$. I livelli dispari non sono pertanto alterati dalla presenza della barriera.

Le funzioni d'onda pari per $x > 0$ hanno la forma

$$\psi_k^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin k(x - a) \quad x > 0 \quad (1.79)$$

L'equazione (1.78) determina gli autovalori corrispondenti

$$\frac{\Delta\psi'(0)}{\psi(0)} = -2k \cot ka = \frac{2m\lambda}{\hbar^2} \quad (1.80)$$

cioè

$$\tan \xi = -\frac{\xi}{g} \quad (1.81)$$

dove abbiamo introdotto i parametri adimensionali

$$\xi \equiv ka \quad g \equiv \frac{\lambda m a}{\hbar^2} \quad (1.82)$$

La soluzione ξ_0 di questa equazione che corrisponde allo stato fondamentale è quella per la quale

$$\frac{\pi}{2} < \xi_0 < \pi \quad (1.83)$$

È evidente che quando $g \rightarrow 0$, $\xi_0(g)$ tende al valore imperturbato:

$$\xi_0(g) = \frac{\pi}{2} + O(g) \quad (1.84)$$

Determiniamo $\xi_0(g)$ agli ordini più bassi in g . Posto

$$\xi_0 = \frac{\pi}{2} + \delta(g) \quad (1.85)$$

l'equazione per gli autovalori diventa

$$g \cot \delta = \delta + \frac{\pi}{2} \quad (1.86)$$

ovvero

$$\delta = \frac{g}{\delta + \frac{\pi}{2}} (\delta \cot \delta) = \frac{g}{\delta + \frac{\pi}{2}} \left(1 - \frac{\delta^2}{3} + \dots\right) \quad (1.87)$$

Questa equazione permette di determinare recursivamente δ all'ordine n in g dalla conoscenza di δ all'ordine $n - 1$:

$$\delta^{(n)} \equiv \frac{\frac{2}{\pi} g}{1 + \frac{2}{\pi} \delta^{(n-1)}} \left(1 - \frac{(\delta^{(n-1)})^2}{3} + \dots\right) \quad (1.88)$$

dove il segno di equivalenza indica che consideriamo solo i termini di ordine n . Per esempio all'ordine 1 abbiamo

$$\delta^{(1)} \equiv \frac{\frac{2}{\pi} g}{1 + \frac{2}{\pi} \delta^{(0)}} = \frac{2}{\pi} g \quad (1.89)$$

All'ordine 2

$$\delta^{(2)} \equiv \frac{\frac{2}{\pi} g}{1 + \frac{2}{\pi} \delta^{(1)}} \equiv \frac{\frac{2}{\pi} g}{1 + \frac{2^2}{\pi^2} g} \equiv \frac{2}{\pi} g - \frac{2^3}{\pi^3} g^2 \quad (1.90)$$

All'ordine 3

$$\begin{aligned} \delta^{(3)} &\equiv \frac{\frac{2}{\pi} g}{1 + \frac{2^2}{\pi^2} g - \frac{2^4}{\pi^4} g^2} \left(1 - \frac{2^2}{3 \cdot \pi^2} g^2\right) = \\ &\equiv \frac{2}{\pi} g - \frac{2^3}{\pi^3} g^2 + \frac{2}{\pi} \left(\frac{2^4}{\pi^4} + \frac{2^4}{\pi^4} - \frac{2^2}{3 \cdot \pi^2}\right) g^3 = \\ &= \frac{2}{\pi} g - \frac{2^3}{\pi^3} g^2 + \left(\frac{2^6}{\pi^5} - \frac{2^3}{3 \cdot \pi^3}\right) g^3 \end{aligned} \quad (1.91)$$

L'autovalore dell'energia è

$$\frac{E_1(g)}{E_1^{(0)}} = \left(1 + \frac{2}{\pi} \delta(g)\right)^2 \quad (1.92)$$

L'espansione di quest'espressione in potenze di g fino al terzo ordine è dunque

$$\begin{aligned} \frac{E_1(g)}{E_1^{(0)}} &= 1 + \frac{2^3}{\pi^2} g - \frac{2^4}{\pi^4} g^2 + \left(\frac{2^8}{\pi^6} - \frac{2^5}{3 \pi^4} - \frac{2^7}{\pi^6}\right) g^3 + \dots \\ &= 1 + \frac{2^3}{\pi^2} g - \frac{2^4}{\pi^4} g^2 + \left(\frac{2^7}{\pi^6} - \frac{2^5}{3 \pi^4}\right) g^3 + O(g^4) \end{aligned} \quad (1.93)$$

Otteniamo ora questo risultato in teoria delle perturbazioni indipendenti dal tempo.

La correzione dell'energia al primo ordine è data da

$$\Delta^{(1)} E_1 = (\psi_0^{(+,1)}, V \psi^{(+,1)}) = \frac{\lambda}{a} \quad (1.94)$$

Quella al secondo

$$\begin{aligned} \Delta^{(2)} E_1 &= -\frac{\lambda^2}{a^2 E_1^{(0)}} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{(2k+1)^2 - 1} = -\frac{2^6}{\pi^4} g^2 E_1^{(0)} \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k(k+1)} = \\ &= -\frac{2^4}{\pi^4} g^2 E_1^{(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{1}{k} - \frac{1}{k+1} \right) = -\frac{2^4}{\pi^4} g^2 E_1^{(0)} \end{aligned} \quad (1.95)$$

L'espressione generale della correzione del terzo ordine è :

$$\Delta^{(3)} E_1 = \sum_{\alpha, \beta \neq 1} \frac{V_{1\alpha} V_{\alpha\beta} V_{\beta 1}}{(E_\alpha^{(0)} - E_1^{(0)})(E_\beta^{(0)} - E_1^{(0)})} - V_{11} \sum_{\alpha \neq 1} \frac{|V_{1\alpha}|^2}{(E_\alpha^{(0)} - E_1^{(0)})^2} \quad (1.96)$$

Nel nostro caso gli elementi di matrice $V_{\alpha\beta}$ non nulli sono quelli in cui α e β si riferiscono a stati con la stessa parità: in questo caso gli elementi di matrice non dipendono dagli indici α e β :

$$V_{\alpha\beta} = \frac{\lambda}{a} = \frac{2^3}{\pi^2} g E_1^{(0)} \quad (1.97)$$

Dunque

$$\begin{aligned} \frac{\Delta^{(3)} E_1}{E_1^{(0)}} &= \frac{2^9}{\pi^6} g^3 \left[\sum_{m,n=1}^{\infty} \frac{1}{((2n+1)^2 - 1)((2m+1)^2 - 1)} + \right. \\ &\quad \left. - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{((2n+1)^2 - 1)^2} \right] = \\ &= \frac{2^9}{\pi^6} g^3 \frac{1}{2^4} \left[1 - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n(n+1))^2} \right] \end{aligned} \quad (1.98)$$

Abbiamo

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(n(n+1))^2} &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{n^2} + \frac{1}{(n+1)^2} - \frac{2}{n(n+1)} \right] = \\ &= 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} - 1 - 2 = \frac{\pi^2}{3} - 3 \end{aligned} \quad (1.99)$$

In definitiva

$$\frac{\Delta^{(3)} E_1}{E_1^{(0)}} = \frac{2^5}{\pi^6} \left(4 - \frac{\pi^2}{3} \right) g^3 \quad (1.100)$$

in accordo col risultato ottenuto sopra.

1.5 Struttura iperfine in campo magnetico

Consideriamo l'interazione iperfine

$$H_0 = f \vec{s}^{(e)} \cdot \vec{s}^{(p)} = \frac{f}{2} (\vec{S}^2 - (\vec{s}^{(e)})^2 - (\vec{s}^{(p)})^2) \quad (1.101)$$

dove $\vec{s}^{(e,p)}$ sono gli spin dell'elettrone e del protone dell'idrogeno e $\vec{S} = \vec{s}^{(e)} + \vec{s}^{(p)}$ lo spin totale. I livelli di H_0 sono

$$\begin{aligned} E_0^{(0)} &= \frac{f \hbar^2}{2} \left(-\frac{3}{4} \times 2 \right) = -\frac{3 f \hbar^2}{4} \\ E_1^{(0)} &= \frac{f \hbar^2}{2} \left(2 - \frac{3}{4} \times 2 \right) = \frac{f \hbar^2}{4} \end{aligned} \quad (1.102)$$

Il livello $E_0^{(0)}$ corrisponde all'autostato con $S = 0$

$$|S = 0, S_z = 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle_e |-\rangle_p - |-\rangle_e |+\rangle_p \right) \quad (1.103)$$

mentre il livello $E_0^{(1)}$ ha degenerazione 3 e corrisponde al multipletto con $S = 1$

$$\begin{aligned} |S = 1, S_z = 0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|+\rangle_e |-\rangle_p + |-\rangle_e |+\rangle_p \right) \\ |S = 1, S_z = \pm 1\rangle &= |\pm\rangle_e |\pm\rangle_p \end{aligned} \quad (1.104)$$

Immergiamo il sistema in un campo magnetico uniforme B diretto lungo l'asse delle z , il cui effetto è descritto dall'Hamiltoniana

$$H_1 = 2\omega_e s_z^{(e)} + 2\omega_p s_z^{(p)} \quad (1.105)$$

dove $\omega_{e,p} = \mu_{e,p} B$ con $\mu_{e,p}$ momenti magnetici dell'elettrone e protone. Abbiamo

$$\begin{aligned} s_z^{(e)} |S = 0, S_z = 0\rangle &= \frac{\hbar}{2} |S = 1, S_z = 0\rangle \\ s_z^{(p)} |S = 0, S_z = 0\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |S = 1, S_z = 0\rangle \\ s_z^{(e)} |S = 1, S_z = \pm 1\rangle &= \pm \frac{\hbar}{2} |S = 1, S_z = \pm 1\rangle \\ s_z^{(p)} |S = 1, S_z = \pm 1\rangle &= -\frac{\hbar}{2} |S = 1, S_z = \pm 1\rangle \end{aligned} \quad (1.106)$$

Dunque la matrice corrispondente a $H_0 + H_1$ nella base degli autostati del momento angolare totale è

$$H = H_0 + H_1 = \hbar \begin{pmatrix} -\frac{3}{4}\hbar f & \omega_- & 0 & 0 \\ \omega_- & \frac{\hbar f}{4} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\hbar f}{4} + \omega_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{\hbar f}{4} - \omega_+ \end{pmatrix} \quad (1.107)$$

dove $\omega_{\pm} = \omega_e \pm \omega_p$. I quattro autovalori di H sono

$$E_{\pm} = \frac{\hbar^2 f}{4} \pm \hbar \omega_+ \quad (1.108)$$

con autostati $|S = 1, S_z = \pm 1\rangle$, e

$$E_{1,2} = -\frac{\hbar^2 f}{4} \mp \sqrt{\frac{(\hbar^2 f)^2}{4} + \hbar^2 \omega_-^2} \quad (1.109)$$

Nel caso di campo debole $\hbar \omega_- \ll \hbar^2 f$ possiamo applicare la teoria delle perturbazioni separatamente ai livelli con $S = 0$ ed $S = 1$. Al primo ordine in ω_- la correzione al livello fondamentale è nulla

$$\Delta^{(1)} E_1 = \langle S = 0, S_z = 0 | H_1 | S = 0, S_z = 0 \rangle = 0 \quad (1.110)$$

La correzione al secondo ordine è

$$\Delta^{(2)} E_1 = - \sum_n \frac{|\langle n | H_1 | S=0, S_z=0 \rangle|^2}{E_n - E_1} = - \frac{(\hbar \omega_-)^2}{\hbar^2 f} = - \frac{\omega_-^2}{f} \quad (1.111)$$

in accordo con l'espansione al secondo ordine del risultato esatto per E_1

$$E_1 = -\frac{\hbar^2 f}{4} - \frac{\hbar^2 f}{2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{4\omega_-^2}{\hbar^2 f^2} + \dots \right) = -\frac{3\hbar^2 f}{4} - \frac{\omega_-^2}{f} + \dots \quad (1.112)$$

2 Teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo

2.1 Oscillatore forzato

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2} \quad (2.1)$$

La perturbazione è

$$\hat{V}(t) = -F(t)\hat{x} = i\lambda F(t)(a^\dagger - a) \quad (2.2)$$

dove λ è la lunghezza associata all'oscillatore

$$\lambda = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \quad (2.3)$$

Supponiamo

$$F(t) = 0 \quad \text{per} \quad t \leq 0 \quad (2.4)$$

Supponiamo che il sistema si trovi al tempo $t = 0$ nello stato fondamentale

$$\psi(t=0) = |0\rangle \quad (2.5)$$

Vogliamo valutare la probabilità che al tempo t il sistema si trovi in uno stato $|n\rangle$

2.1.1 Teoria delle perturbazioni

Al primo ordine (per $n \neq 0$) l'ampiezza di transizione è

$$A_{0 \rightarrow n} = \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t dt' e^{in\omega t'} F(t') \langle n | a^\dagger | 0 \rangle = \delta_{n,1} \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega t'} F(t') \equiv \delta_{n,1} f_\omega(t) \quad (2.6)$$

dove abbiamo posto

$$f_\omega(t) \equiv \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t dt' e^{i\omega t'} F(t') \quad (2.7)$$

Calcoliamo $A_{0 \rightarrow n}$ al primo ordine non-nullo, per $n > 1$, cioè all'ordine n in teoria delle perturbazioni:

$$\begin{aligned} A_{0 \rightarrow n} &= \frac{\lambda^n}{\hbar^n} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n e^{i\omega(t_1 + \cdots + t_n)} F(t_1) \cdots F(t_n) \langle n | (a^\dagger)^n | 0 \rangle = \\ &= \sqrt{n!} \frac{\lambda^n}{\hbar^n} \frac{1}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n e^{i\omega(t_1 + \cdots + t_n)} F(t_1) \cdots F(t_n) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} f_\omega(t)^n \end{aligned} \quad (2.8)$$

2.1.2 Soluzione esatta

Sia $\psi(t, z)$ lo stato al tempo t in rappresentazione olomorfa nella pittura dell'interazione:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t, z)}{\partial t} = iF(t) \lambda (z e^{i\omega t} - e^{-i\omega t} \partial_z) \psi(t, z) \quad (2.9)$$

Introduciamo

$$\psi(z, t) = e^{\chi(z, t)} \quad (2.10)$$

L'equazione per $\chi(z, t) = \log \psi(z, t)$ diventa

$$\frac{\partial \chi(t, z)}{\partial t} + \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t} \frac{\partial \chi(t, z)}{\partial z} = \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{i\omega t} z \quad (2.11)$$

Di questa equazione è possibile trovare la soluzione generale. Ma per cominciare cerchiamo delle soluzioni particolari, lineari in z :

$$\chi(z, t) = \alpha(t) z + \beta(t) \quad (2.12)$$

Sostituendo nella (2.11) otteniamo

$$\alpha'(t) z + \beta'(t) + \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t} \alpha(t) = \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{i\omega t} z \quad (2.13)$$

da cui deduciamo

$$\begin{aligned} \alpha'(t) &= \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{i\omega t} \\ \beta'(t) &= -\frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t} \alpha(t) \end{aligned} \quad (2.14)$$

Poiché cerchiamo la soluzione con le condizioni iniziali

$$\psi(0, z) = 1 \quad (2.15)$$

abbiamo

$$\alpha(0) = \beta(0) = 0 \quad (2.16)$$

Dunque la soluzione della prima delle (2.14) è

$$\alpha(t) = \frac{\lambda}{\hbar} \int_0^t dt' F(t') e^{i\omega t'} = f_\omega(t) \quad (2.17)$$

mentre la seconda dà

$$\beta(t) = - \int_0^t dt' \frac{\lambda F(t')}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' \frac{\lambda F(t'')}{\hbar} e^{i\omega(t''-t')} \quad (2.18)$$

Notiamo che

$$\begin{aligned} \text{Re } \beta(t) &= - \int_0^t dt' \frac{\lambda F(t')}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' \frac{\lambda F(t'')}{\hbar} \cos \omega(t'' - t') = \\ &= -\frac{1}{2} \int_0^t dt' \frac{\lambda F(t')}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' \frac{\lambda F(t'')}{\hbar} \cos \omega(t'' - t') = \\ &= -\frac{1}{2} \int_0^t dt' \frac{\lambda F(t')}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' \frac{\lambda F(t'')}{\hbar} e^{i\omega(t''-t')} = -\frac{1}{2} |f_\omega(t)|^2 \end{aligned} \quad (2.19)$$

mentre

$$\text{Im} \beta(t) = - \int_0^t dt' \frac{\lambda F(t')}{\hbar} \int_0^{t'} dt'' \frac{\lambda F(t'')}{\hbar} \sin \omega(t'' - t') \quad (2.20)$$

Pertanto lo stato $\psi(t)$ è uno stato coerente. Le ampiezze di transizione (a meno di fattori di fase inessenziali) sono pertanto

$$A_{0 \rightarrow n} = \frac{1}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{1}{2}|f_\omega(t)|^2} f_\omega^n(t) \quad (2.21)$$

in accordo, all'ordine n in teoria delle perturbazioni, con (2.8).

Consideriamo ora la soluzione generale dell'equazione (2.11). Questa è data dalla somma della soluzione particolare (2.12) e della soluzione generale dell'equazione differenziale omogenea associata:

$$\frac{\partial \chi(t, z)}{\partial t} + \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t} \frac{\partial \chi(t, z)}{\partial z} = 0 \quad (2.22)$$

Per risolvere l'equazione omogenea possiamo utilizzare il seguente metodo (delle *caratteristiche*). Si introduca il campo vettoriale sul "piano" (z, t)

$$\vec{v}(z, t) \equiv (v_t, v_z) = \left(1, \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t}\right) \quad (2.23)$$

ed il gradiente di $\chi(z, t)$

$$\vec{\nabla} \chi(t, z) \equiv (\partial_t \chi(t, z), \partial_z \chi(z, t)) \quad (2.24)$$

L'equazione omogenea (2.22) diventa

$$\vec{v} \cdot \vec{\nabla} \chi(z, t) = 0 \quad (2.25)$$

Questa equazione dice che la funzione $\chi(z, t)$ è costante lungo le curve tangenti al campo vettoriale $\vec{v}(z, t)$. Tali curve sono definite dal sistema di equazioni differenziali ordinarie

$$\begin{aligned} \frac{dz(\tau)}{d\tau} &= v_z = \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t} \\ \frac{dt(\tau)}{d\tau} &= v_t = 1 \end{aligned}$$

che è equivalente all'equazione differenziale ordinaria:

$$\frac{dz(t)}{dt} = \frac{\lambda}{\hbar} F(t) e^{-i\omega t} \quad (2.26)$$

La soluzione generale di quest' equazione è

$$z(t) = C + \int_0^t dt' \frac{\lambda}{\hbar} F(t') e^{-i\omega t'} = C + f_\omega^*(t) \quad (2.27)$$

dove C è una costante arbitraria, che parametrizza le curve. Si consideri ora la funzione di z e t che si ottiene dalla (2.27) esprimendo la costante C in termini di z e t

$$C(z, t) \equiv z - f_\omega^*(t) \quad (2.28)$$

Poiché $\chi(t, z)$ è costante lungo le curve parametrizzate da C , una generica funzione di $C(z, t)$ gode di questa stessa proprietà. La soluzione generale della (2.11) è pertanto:

$$\chi(z, t) = \alpha(t) z + \beta(t) + \phi(z - f_\omega^*(t)) \quad (2.29)$$

dove $\phi(z)$ è una funzione arbitraria di una singola variabile. La funzione d'onda $\psi(z, t)$ è dunque

$$\psi(z, t) = e^{-i \text{Im}g \beta(t)} e^{-\frac{1}{2}|f_\omega(t)|^2} e^{f_\omega(t) z} \varphi(z - f_\omega^*(t)) \quad (2.30)$$

(con $e^\phi = \varphi$). Determiniamo lo stato $\psi_m(z, t)$ che al tempo $t = 0$ coincide con un generico autostato $|m\rangle$ dell'Hamiltoniana imperturbata:

$$\psi_m(z, t = 0) = \frac{z^m}{\sqrt{m!}} = \varphi(z) \quad (2.31)$$

da cui

$$\psi_m(z, t) = e^{-i \text{Im}g \delta(t)} \frac{1}{\sqrt{m!}} e^{-\frac{1}{2}|f_\omega(t)|^2} e^{f_\omega(t) z} (z - f_\omega^*(t))^m \quad (2.32)$$

Da questa formula deriviamo l'espressione per l'ampiezza di transizione al tempo t dallo stato $|m\rangle$ allo stato $|n\rangle$.

$$\begin{aligned} A_{m \rightarrow n}(t) e^{\frac{1}{2}|f_\omega(t)|^2} &= \int \frac{d^2 z}{\pi \sqrt{n! m!}} e^{-z \bar{z} + f_\omega z \bar{z}^n} (z - f_\omega^*(t))^m = \\ &= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (-f_\omega^*)^{m-k} \int \frac{d^2 z}{\pi \sqrt{n! m!}} e^{-z \bar{z} + f_\omega z \bar{z}^n} z^k = \\ &= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (-f_\omega^*)^{m-k} \left(\frac{\partial}{\partial f_\omega} \right)^k \int \frac{d^2 z}{\pi \sqrt{n! m!}} e^{-z \bar{z} + f_\omega z \bar{z}^n} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sum_{k=0}^m \binom{m}{k} (-f_\omega^*)^{m-k} \left(\frac{\partial}{\partial f_\omega}\right)^k \frac{f_\omega^n}{\sqrt{n! m!}} = \\
&= \sum_{k=0}^{\min(m,n)} \binom{m}{k} \frac{(-f_\omega^*)^{m-k} f_\omega^{n-k} n!}{(n-k)! \sqrt{n! m!}} = \\
&= \sqrt{m! n!} \sum_{k=0}^{\min(m,n)} \frac{(-f_\omega^*)^{m-k} f_\omega^{n-k}}{(n-k)! k! (m-k)!} \tag{2.33}
\end{aligned}$$

Verifichiamo (2.33) all'ordine più basso in teoria delle perturbazioni. Sia $n > m$. In questo caso il termine di ordine più basso in f_ω nella (2.33) è quello con $k = m$

$$A_{m \rightarrow n}(t) = \sqrt{m! n!} \frac{f_\omega^{n-m}}{(n-m)! m!} + \dots \tag{2.34}$$

Al primo ordine in teoria delle perturbazioni l'unica ampiezza non nulla è dunque quella con $n = m + 1$:

$$A_{m \rightarrow m+1} = \sqrt{\frac{(m+1)!}{m!}} f_\omega + \dots = \sqrt{m+1} f_\omega + \dots \tag{2.35}$$

in accordo con la formula del primo ordine in teoria delle perturbazione, che coinvolge l'elemento di matrice $\langle m+1 | a^\dagger | m \rangle = \sqrt{m+1}$.

2.1.3 Esempio: radiazione su elettroni atomici in approssimazione di dipolo

Consideriamo il caso in cui l'elettrone è descritto da un oscillatore armonico di frequenza ω mentre la radiazione è un treno d'onda di frequenza ω' di durata τ :

$$F(t) = e \mathcal{E}_0 \sin \omega' t \quad \text{per } 0 \leq t \leq \tau \tag{2.36}$$

(Nell'approssimazione di dipolo si pone

$$\sin(\omega' t - k x) \rightarrow \sin \omega' t \tag{2.37}$$

perché si suppone che la lunghezza d'onda della radiazione incidente sia molto più grande rispetto alla lunghezza caratteristica del sistema: $k x \approx 0$.)

Allora

$$f_{\omega}(t) = \frac{e \lambda \mathcal{E}_0}{2 i \hbar} \left[\frac{e^{i(\omega+\omega')t} - 1}{(\omega + \omega')} - \frac{e^{i(\omega-\omega')t} - 1}{(\omega - \omega')} \right] \quad \text{per } t \leq \tau \quad (2.38)$$

e

$$f_{\omega}(t) = f_{\omega}(\tau) \quad \text{per } t \geq \tau \quad (2.39)$$

Supponiamo che la frequenza dell'onda incidente sia vicina a quella dell'oscillatore

$$\omega \approx \omega' \quad (2.40)$$

In questo caso trascuriamo il primo termine nella (2.38). La probabilità di transizione al tempo t è pertanto al primo ordine in teoria delle perturbazioni

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow n}(t) &= \delta_{n,1} \frac{e^2 \lambda^2 \mathcal{E}_0^2}{4 \hbar^2} t^2 \frac{\sin^2 \frac{(\omega-\omega')t}{2}}{\left[\frac{(\omega-\omega')t}{2} \right]^2} = \\ &= \delta_{n,1} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{2 \pi \lambda^2 I}{\hbar} t^2 \frac{\sin^2 \frac{(\omega-\omega')t}{2}}{\left[\frac{(\omega-\omega')t}{2} \right]^2} \quad \text{per } t \leq \tau \end{aligned} \quad (2.41)$$

e

$$P_{0 \rightarrow n}(t) = P_{0 \rightarrow n}(\tau) \quad \text{per } t \geq \tau \quad (2.42)$$

dove abbiamo introdotto l'intensità della radiazione I

$$I = \frac{c \mathcal{E}_0^2}{8 \pi} \quad (2.43)$$

che ha le dimensioni di $\frac{[energia]}{[lunghezza^2][tempo]}$.

Cerchiamo di determinare la validità dell'approssimazione del primo ordine nel contesto di un esempio numerico appropriato per la fisica atomica. Consideriamo il caso vicino alla risonanza, ed una differenza di energia tra il livello eccitato e quello fondamentale dell'oscillatore dell'ordine delle transizioni atomiche

$$\omega' \approx \omega \approx \mu e^2 / \hbar a_B \quad (2.44)$$

dove

$$a_B = \frac{\hbar^2}{m e^2} \approx .5 \cdot 10^{-8} \text{ cm} \quad (2.45)$$

è il raggio di Bohr e μ è un fattore dell'ordine di $10^{-1} - 1$. Pertanto

$$\lambda^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar^2}{2me^2} \frac{e^2}{\hbar\omega} = \frac{1}{2\mu} a_B^2 \quad (2.46)$$

Per tempi $t > \tau$ maggiori della durata del treno d'onda incidente abbiamo

$$P_{0 \rightarrow 1} \approx \frac{\pi}{\mu} \frac{e^2}{\hbar c} \frac{a_B^2 \tau I}{\hbar/\tau} \quad (2.47)$$

$\hbar/\tau \approx \Delta E$ è una energia dell'ordine della larghezza spettrale della radiazione incidente. Prendiamo

$$\tau \approx 10^{-4} \text{ sec} \rightarrow \hbar/\tau \approx 0.66 \cdot 10^{-11} \text{ ev} \approx 1.05 \cdot 10^{-23} \text{ erg} \quad (2.48)$$

In conclusione

$$\begin{aligned} P_{0 \rightarrow 1} &\approx (2.29 \cdot 10^{-2})(0.28 \cdot 10^{-20})(0.95 \cdot 10^{23}) \frac{I}{\mu} \times \frac{\text{cm}^2 \text{ sec}}{\text{erg}} \approx \\ &\approx 0.61 \cdot 10^1 \frac{I}{\mu} \times \frac{\text{cm}^2 \text{ sec}}{\text{erg}} \end{aligned} \quad (2.49)$$

Prendiamo per esempio un valore tipico per transizione atomiche, $\hbar\omega \approx 1.8 \text{ ev}$ (corrispondente ad una frequenza $\nu = \omega/2\pi = 0.439 \cdot 10^{15} \text{ Hz}$), per il quale $\mu \approx 0.66 \cdot 10^{-1}$. Allora

$$P_{0 \rightarrow 1} \approx 0.9 \cdot 10^2 I \times \frac{\text{cm}^2 \text{ sec}}{\text{erg}} \quad (2.50)$$

Vediamo dunque che in queste condizioni ci aspettiamo che il calcolo perturbativo del primo ordine sia accurato per intensità della radiazione incidente che non siano più grandi del valore

$$I \approx 10^{-3} \frac{\text{erg}}{\text{cm}^2 \text{ sec}} \quad (2.51)$$

Confrontiamo in effetti il risultato perturbativo del primo ordine con il risultato esatto in queste condizioni. Per

$$I = 10^{-3} \frac{\text{erg}}{\text{cm}^2 \text{ sec}} \quad (2.52)$$

abbiamo dunque che

$$P_{0 \rightarrow 1}^{\text{pert}} = |f_\omega|^2 = 0.09 \quad (2.53)$$

La formula esatta dà per la probabilità di transizione in questo caso

$$P_{0 \rightarrow 1} = e^{-|f_\omega|^2} |f_\omega|^2 \approx 0.08 \quad (2.54)$$

Supponiamo ora di avere un'intensità dieci volte maggiore

$$I = 10^{-2} \frac{erg}{cm^2 sec} \quad (2.55)$$

per la quale

$$P_{0 \rightarrow 1}^{pert} = |f_\omega|^2 = 0.9 \quad (2.56)$$

che è molto diverso dal risultato esatto

$$P_{0 \rightarrow 1} = e^{-|f_\omega|^2} |f_\omega|^2 \approx 0.37 \quad (2.57)$$

Discutiamo infine la validità dell'approssimazione di dipolo in questo esempio. La lunghezza d'onda della radiazione incidente è

$$\lambda_{rad} = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{2\pi}{\hbar\omega} \hbar c = \frac{2\pi \hbar c}{\mu e^2} a_B \quad (2.58)$$

Dalla (2.46) risulta che la lunghezza tipica del sistema è $\lambda = \frac{a_B}{\sqrt{2\mu}}$, per cui

$$\frac{\lambda}{\lambda_{rad}} = \frac{e^2}{\hbar c} \frac{\sqrt{\mu}}{2\sqrt{2}\pi} \quad (2.59)$$

Poiché la costante di struttura fine $\alpha \equiv \frac{e^2}{\hbar c} \approx 1/137$ abbiamo che $\frac{\lambda}{\lambda_{rad}} \approx 0.8 \cdot 10^{-3} \sqrt{\mu}$. Quindi, per μ dell'ordine di 1 come nelle transizioni ottiche, questo rapporto è sufficientemente piccolo da giustificare l'approssimazione di dipolo.

2.2 Atomo di idrogeno in campo elettrico

Sia H_0 l'Hamiltoniana dell'elettrone di un atomo idrogenoide, corrispondente ad un potenziale coulombiano

$$V_0(r) = -\frac{Z e^2}{r} \quad (2.60)$$

2.2.1 Rimozione della degenerazione accidentale

Consideriamo una correzione a questo potenziale che tenga conto della dimensione finita del nucleo dell'idrogenoide. Il modello per il nucleo che utilizzeremo è quello di una distribuzione uniforme di carica in una sfera di raggio R , comparabile con le dimensioni del nucleo. Sostituiamo dunque al potenziale $V_0(r)$ il potenziale

$$V_1(r) = \begin{cases} V_0(r) & \text{per } r \geq R \\ \frac{Z e^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} \right) & \text{per } r \leq R \end{cases} \quad (2.61)$$

La formula (2.61) tiene conto del fatto che il campo elettrico per $r \leq R$ è quello prodotto da una sfera uniformemente carica di raggio r , con densità di carica $\frac{Z e r^3}{R^3}$, cioè

$$E(r) = -\frac{Z e r^3}{R^3} \frac{1}{r^2} \quad \text{per } r \leq R \quad (2.62)$$

Scriviamo pertanto l'hamiltoniana del sistema nella forma

$$H_1 = H_0 + (V_1 - V_0) \equiv H_0 + \Delta_1 V \quad (2.63)$$

con

$$\Delta_1 V = \begin{cases} 0 & \text{per } r \geq R \\ \frac{Z e^2}{r} + \frac{Z e^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} \right) & \text{per } r \leq R \end{cases} \quad (2.64)$$

ed trattiamo $\Delta_1 V$ come una perturbazione di H_0 .

Calcoliamo l'effetto di $\Delta_1 V$ sui livelli con $n = 1$ ed $n = 2$ al primo ordine in teoria delle perturbazioni.

$$\begin{aligned} \Delta_1 E_{1,0,0} &= \langle 1, 0, 0 | \Delta_1 V | 1, 0, 0 \rangle = \\ &= \int_0^R dr r^2 |R_{10}(r)|^2 \left[\frac{Z e^2}{r} + \frac{Z e^2}{R} \left(\frac{r^2}{2R^2} - \frac{3}{2} \right) \right] = \\ &= \frac{4 Z^3}{a_B^3} \int_0^{\frac{Z R}{a_B}} d\rho e^{-2\rho} \left[\frac{a_B^2 e^2 \rho}{Z} + \frac{a_B^5 e^2 \rho^4}{2 Z^4 R^3} - \frac{3 e^2 a_B^3 \rho^2}{2 Z^2 R} \right] = \\ &= \frac{4 Z^2 e^2}{a_B} \int_0^{\frac{Z R}{a_B}} d\rho e^{-2\rho} \left[\rho + \frac{a_B^3}{2 Z^3 R^3} \rho^4 - \frac{3 a_B}{2 Z R} \rho^2 \right] = \\ &= \frac{Z^2 e^2}{a_B} \left[1 + \frac{3}{2 \hat{R}^3} (1 - e^{-2\hat{R}}) - \frac{3 e^{-2\hat{R}}}{\hat{R}^2} + \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{2 \hat{R}} (1 + e^{-2\hat{R}}) \right] \end{aligned} \quad (2.65)$$

dove abbiamo introdotto il parametro adimensionale

$$\hat{R} \equiv \frac{Z R}{a_B} \quad (2.66)$$

che misura la dimensione del nucleo rispetto a quella dell'orbita dell'elettrone. Nelle situazioni realistiche

$$\hat{R} \ll 1 \quad (2.67)$$

Per esempio per $Z = 6$, $\hat{R} \approx 30 \times 10^{-5} = 3 \cdot 10^{-4}$. Pertanto è lecito espandere (2.65) all'ordine più basso in \hat{R}

$$\Delta_1 E_{1,0,0} = \frac{Z^2 e^2}{a_B} \left[\frac{2 \hat{R}^2}{5} + O(\hat{R}^3) \right] \approx \frac{4 \hat{R}^2}{5} |E_1^{(0)}| \quad (2.68)$$

dove $E_1^{(0)}$ è l'energia dello stato fondamentale dell'Hamiltoniana imperturbata H_0 .

Per il livello $n = 2$ abbiamo similmente

$$\begin{aligned} \Delta_1 E_{2,0,0} &= \langle 2, 0, 0 | \Delta_1 V | 2, 0, 0 \rangle = \\ &= \int_0^R dr r^2 |R_{20}(r)|^2 \left[\frac{Z e^2}{r} + \frac{Z e^2}{R} \left(\frac{r^2}{2 R^2} - \frac{3}{2} \right) \right] = \\ &= \frac{Z^3}{2 a_B^3} \int_0^{\frac{Z R}{a_B}} d\rho e^{-\rho} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right)^2 \left[\frac{a_B^2 e^2 \rho}{Z} + \frac{a_B^5 e^2 \rho^4}{2 Z^4 R^3} - \frac{3 e^2 a_B^3 \rho^2}{2 Z^2 R} \right] = \\ &= \frac{Z^2 e^2}{2 a_B} \int_0^{\frac{Z R}{a_B}} d\rho e^{-\rho} \left(1 - \frac{\rho}{2} \right)^2 \left[\rho + \frac{a_B^3}{2 Z^3 R^3} \rho^4 - \frac{3 a_B}{2 Z R} \rho^2 \right] = \\ &= \frac{Z^2 e^2}{a_B} \left[\frac{1}{4} (1 - 9 e^{-\hat{R}}) + \frac{21}{\hat{R}^3} (1 - e^{-\hat{R}}) - \frac{21 e^{-\hat{R}}}{\hat{R}^2} \right. \\ &\quad \left. - \frac{3}{2 \hat{R}} - \frac{9 e^{-\hat{R}}}{\hat{R}} - \frac{3 \hat{R} e^{-\hat{R}}}{8} \right] \approx \frac{Z^2 e^2}{a_B} \frac{\hat{R}^2}{20} = |E_2^{(0)}| \frac{2 \hat{R}^2}{5} \quad (2.69) \end{aligned}$$

dove $E_2^{(0)}$ è il primo livello eccitato dell'Hamiltoniana imperturbata H_0 . Analogamente

$$\begin{aligned} \Delta_1 E_{2,1,m} &= \langle 2, 1, m | \Delta_1 V | 2, 1, m \rangle = \\ &= \int_0^R dr r^2 |R_{21}(r)|^2 \left[\frac{Z e^2}{r} + \frac{Z e^2}{R} \left(\frac{r^2}{2 R^2} - \frac{3}{2} \right) \right] = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{Z^3}{24 a_B^3} \int_0^{\frac{Z R}{a_B}} d\rho e^{-\rho} \rho^2 \left[\frac{a_B^2 e^2 \rho}{Z} + \frac{a_B^5 e^2 \rho^4}{2 Z^4 R^3} - \frac{3 e^2 a_B^3 \rho^2}{2 Z^2 R} \right] = \\
&= \frac{Z^2 e^2}{24 a_B} \int_0^{\frac{Z R}{a_B}} d\rho e^{-\rho} \left[\rho^3 + \frac{a_B^3}{2 Z^3 R^3} \rho^6 - \frac{3 a_B}{2 Z R} \rho^4 \right] = \\
&= \frac{Z^2 e^2}{a_B} \left[\frac{1}{4} - \frac{5 e^{-\hat{R}}}{4} + 15 \hat{R}^3 - \frac{15 e^{-\hat{R}}}{\hat{R}^3} + \right. \\
&\quad \left. - \frac{15 e^{-\hat{R}}}{\hat{R}^2} - \frac{3}{2 \hat{R}} - \frac{6 e^{-\hat{R}}}{\hat{R}} - \frac{e^{-\hat{R}} \hat{R}}{8} \right] \approx \frac{Z^2 e^2}{a_B} \frac{\hat{R}^4}{1120} = \\
&= |E_2^{(0)}| \frac{\hat{R}^4}{140} \tag{2.70}
\end{aligned}$$

Possiamo provare a simulare il raggio finito del nucleo con una diversa perturbazione ad H_0

$$\Delta'_1 V = \frac{Z e^2 e^{-\mu r}}{r} \tag{2.71}$$

Le correzioni dei primi livelli diventano

$$\begin{aligned}
\Delta'_1 E_{1,0,0} &= \langle 1, 0, 0 | \Delta'_1 V | 1, 0, 0 \rangle = \\
&= \int_0^\infty dr r^2 |R_{10}(r)|^2 \frac{Z e^2 e^{-\mu r}}{r} = \\
&= \frac{4 Z^2 e^2}{a_B} \int_0^\infty d\rho e^{-(2 + \frac{\mu a_B}{Z}) \rho} \rho = \\
&= \frac{4 Z^2 e^2}{a_B} \frac{1}{(2 + \frac{\mu a_B}{Z})^2} = \\
&\approx \frac{4 Z^2 e^2}{a_B} (\hat{R}')^2 = 8 (\hat{R}')^2 |E_1^{(0)}| \tag{2.72}
\end{aligned}$$

dove abbiamo introdotto il parametro adimensionale

$$\hat{R}' \equiv \frac{Z}{\mu a_B} \tag{2.73}$$

che misura la dimensione del nucleo rispetto a quella dell'orbita dell'elettrone.

Per il livello $n = 2$ abbiamo similmente

$$\Delta'_1 E_{2,0,0} = \langle 2, 0, 0 | \Delta_1 V | 2, 0, 0 \rangle =$$

$$\begin{aligned}
&= \int_0^\infty dr r^2 |R_{20}(r)|^2 \frac{Z e^2 e^{-\mu r}}{r} = \\
&= \frac{Z^2 e^2}{2 a_B} \int_0^\infty d\rho e^{-(1+\frac{\mu a_B}{Z})\rho} \left(1 - \frac{\rho}{2}\right)^2 \rho \approx \\
&\approx \frac{Z^2 e^2}{2 a_B} (\hat{R}')^2 = |E_2^{(0)}| 4 (\hat{R}')^2 \tag{2.74}
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\Delta'_1 E_{2,1,m} &= \langle 2, 1, m | \Delta_1 V | 2, 1, m \rangle = \\
&= \int_0^\infty dr r^2 |R_{21}(r)|^2 \frac{Z e^2 e^{-\mu r}}{r} = \\
&= \frac{Z^2 e^2}{24 a_B} \int_0^\infty d\rho e^{-(1+\frac{\mu a_B}{Z})\rho} \rho^3 = \\
&= \frac{Z^2 e^2}{24 a_B} \frac{6}{(1 + \frac{\mu a_B}{Z})^4} \approx |E_2^{(0)}| 2 (\hat{R}')^4 \tag{2.75}
\end{aligned}$$

2.2.2 Campo elettrico uniforme costante

Immergiamo ora il sistema della sottosezione precedente in un campo elettrico uniforme e costante:

$$H_2 = H_1 + \Delta_2 V \tag{2.76}$$

dove

$$\Delta_2 V = -e \hat{z} \mathcal{E} \tag{2.77}$$

Supponiamo che

$$\frac{e a_B \mathcal{E}}{Z} \ll \frac{Z^2 e^2}{a_B} \tag{2.78}$$

cioè

$$\mathcal{E} \ll 5.4 Z^3 10^9 \frac{\text{volt}}{\text{cm}} \tag{2.79}$$

Supponiamo però \mathcal{E} sufficientemente intenso che $e a_B \mathcal{E}/Z \geq \langle \Delta_1 V \rangle$. In accordo con i risultati della sottosezione precedente, questo significa che per i livelli con $l = 0$ dobbiamo prendere

$$\frac{e a_B \mathcal{E}}{Z} \geq \frac{Z^2 e^2}{a_B} \hat{R}^2 \tag{2.80}$$

cioè, poiché $\hat{R} \approx Z 10^{-5}$

$$\mathcal{E} \geq 0.54 Z^5 \frac{\text{volt}}{\text{cm}} \quad (2.81)$$

In queste condizioni è legittimo applicare la teoria delle perturbazioni del primo ordine separatamente allo stato fondamentale ed ai 4 stati intorno ad $E_2^{(0)}$. Come noto dall'analisi dell'effetto Stark "usuale" (senza tener conto della dimensione finita del nucleo) abbiamo

$$\langle 1, 0, 0 | \Delta_2 V | 1, 0, 0 \rangle = \langle 2, l, m | \Delta_2 V | 2, l, m \rangle = \langle 2, 0, 0 | \Delta_2 V | 2, 1, \pm 1 \rangle = 0 \quad (2.82)$$

per le note regole di selezione per \hat{z} ($\Delta m = 0$ e $\Delta l = 1$). Quindi gli unici stati che vengono mescolati dalla perturbazione sono $|2, 0, 0\rangle$ e $|2, 1, 0\rangle$. Sappiamo che

$$\langle 2, 0, 0 | \Delta_2 V | 2, 1, 0 \rangle = -\frac{3 e a_B \mathcal{E}}{Z} \equiv \delta_2 \quad (2.83)$$

Poniamo inoltre

$$2 \delta_1 \equiv E_{2,0,0} - E_{2,1,0} = \Delta_1 E_{2,0,0} - \Delta_1 E_{2,1,0} \approx \Delta_1 E_{2,0,0} \approx \frac{Z^2 e^2 \hat{R}^2}{a_B} \frac{1}{20} \quad (2.84)$$

in quanto $\hat{R}^2 \ll 1$. Gli autostati di H_2 sono pertanto

$$|2, \pm\rangle = x_{\pm} |2, 0, 0\rangle + y_{\pm} |2, 1, 0\rangle \quad (2.85)$$

dove

$$\begin{pmatrix} E_{2,1,0} + 2 \delta_1 & \delta_2 \\ \delta_2 & E_{2,1,0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_{\pm} \\ y_{\pm} \end{pmatrix} = E_2^{(\pm)} \begin{pmatrix} x_{\pm} \\ y_{\pm} \end{pmatrix} \quad (2.86)$$

Da cui

$$E_2^{(\pm)} = E_{2,1,0} + \delta_1 \pm \sqrt{\delta_1^2 + |\delta_2|^2} \quad (2.87)$$

e

$$x_{\pm} = \frac{\delta_2}{N_{\pm}} \quad y_{\pm} = \frac{-\delta_1 \pm \sqrt{\delta_1^2 + |\delta_2|^2}}{N_{\pm}} \quad (2.88)$$

dunque

$$\frac{y_{\pm}^2}{x_{\pm}^2} = \frac{(\sqrt{1 + \eta^2} \mp 1)^2}{\eta^2} \quad (2.89)$$

dove abbiamo posto

$$\eta \equiv \frac{|\delta_2|}{\delta_1} \quad (2.90)$$

La condizione di normalizzazione:

$$y_{\pm}^2 + x_{\pm}^2 = 1 = x_{\pm}^2 \left(1 + \frac{(\sqrt{1+\eta^2} \mp 1)^2}{\eta^2} \right) = x_{\pm}^2 \frac{2\sqrt{1+\eta^2}(\sqrt{1+\eta^2} \mp 1)}{\eta^2} \quad (2.91)$$

da cui

$$x_{\pm}^2 = \frac{\sqrt{1+\eta^2} \pm 1}{2\sqrt{1+\eta^2}} \quad y_{\pm}^2 = \frac{\sqrt{1+\eta^2} \mp 1}{2\sqrt{1+\eta^2}} \quad (2.92)$$

Lo splitting dei livelli E_2^{\pm} è

$$\Delta E_2^{\pm} \equiv E_2^+ - E_2^- = 2\sqrt{\delta_1^2 + |\delta_2|^2} \quad (2.93)$$

2.2.3 Perturbazione periodica

Supponiamo ora di inviare sul sistema, nello stato fondamentale, della radiazione elettromagnetica la cui interazione con l'elettrone descriviamo attraverso l'Hamiltoniana

$$H_3 = H_2 + \Delta_3 V(t) \quad (2.94)$$

con

$$\Delta_3 V(t) = -e \vec{x} \cdot \vec{\mathcal{E}}_3(t) \quad (2.95)$$

Vogliamo studiare quali stati eccitati di livello $n = 2$ verranno popolati a partire dalla stato fondamentale.

Se la radiazione si propaga lungo l'asse delle z (quello definito dal campo elettrico statico) allora sono possibili solo transizioni con $\Delta m = \pm 1$ in quanto

$$\vec{x} \cdot \vec{\mathcal{E}}_3(t) = (x \pm iy) \mathcal{E}_3^{(\pm)}(t) \quad (2.96)$$

In questo caso verranno popolati solo gli stati $|2, 1, \pm 1\rangle$.

Supponiamo invece che la radiazione si propaghi in direzione ortogonale al campo elettrico statico e che

$$\Delta_3 V(t) = -e z \mathcal{E}_3(t) = -\frac{e z \mathcal{E}_3}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) \equiv V_3 \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) \quad (2.97)$$

Sia $\hbar\omega \approx E_2 - E_1$. Siamo interessati alle transizioni $1 \rightarrow 2$. L'unico elemento di matrice di V_3 non nullo per questo tipo di transizioni è

$$\langle 2, 1, 0 | V_3 | 1, 0, 0 \rangle = \frac{3 e a_B \mathcal{E}_3}{2 Z} \equiv \delta_3 \quad (2.98)$$

Pertanto

$$\langle 2, \pm | V_3 | 1, 0, 0 \rangle = \frac{3 e a_B \mathcal{E}_3}{2 Z} y_{\pm} \quad (2.99)$$

Sia dunque

$$\omega_{20}^{\pm} \equiv \frac{E_2^{(\pm)} - E_{1,0,0}}{\hbar} \quad (2.100)$$

Deduciamo che il rapporto tra le popolazioni dei due livelli è dato da

$$\frac{P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,+ \rangle}(t)}{P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,- \rangle}(t)} = \frac{y_+^2 \sin^2 \frac{(\omega_{20}^+ - \omega) t}{2}}{y_-^2 \sin^2 \frac{(\omega_{20}^- - \omega) t}{2}} \frac{(\omega_{20}^- - \omega)^2}{(\omega_{20}^+ - \omega)^2} \quad (2.101)$$

Per $\omega \approx \omega_{20}^{\pm}$ e $t \ll 1/(\omega - \omega_{20}^{\pm})$, otteniamo

$$\frac{P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,+ \rangle}(t)}{P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,- \rangle}(t)} \approx \frac{y_+^2}{y_-^2} = \frac{[\delta_1 - \sqrt{\delta_1^2 + |\delta_2|^2}]^2}{\delta_2^2} = \left[\frac{1 - \sqrt{1 + \eta^2}}{\eta} \right]^2 \quad (2.102)$$

dove abbiamo introdotto il parametro

$$\eta = \frac{|\delta_2|}{\delta_1} \approx \frac{\frac{3 e a_B \mathcal{E}_2}{Z}}{\frac{Z^2 e^2 \hat{R}^2}{a_B 40}} = \frac{120}{Z \hat{R}^2} \frac{e a_B \mathcal{E}_2}{\frac{Z^2 e^2}{a_B}} \quad (2.103)$$

Per esempio per $\mathcal{E} = 10^4 \text{ volts/cm}$, $Z = 10$, $\hat{R} = 6 \cdot 10^{-4}$

$$\begin{aligned} 2 \delta_1 &\approx \frac{Z^2 e^2 \hat{R}^2}{a_B 20} \approx 2.7 \cdot 10^3 \cdot 1.8 \cdot 10^{-8} \text{ ev} \approx 4.86 \cdot 10^{-5} \text{ ev} \\ 2 \delta_2 &= \frac{6 e a_B \mathcal{E}_2}{Z} \approx 3 \cdot 10^{-8} \cdot 10^4 \cdot 10^{-1} \text{ ev} \approx 3 \cdot 10^{-5} \text{ ev} \\ \eta &= \frac{2 \delta_2}{2 \delta_1} \approx 0.62 \end{aligned} \quad (2.104)$$

e per questo valore di η ,

$$\frac{P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,+ \rangle}(t)}{P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,- \rangle}(t)} \approx 0.08 \quad (2.105)$$

quindi l'intensità di una delle due righe di assorbimento è circa 12 volte quella dell'altra. La differenza in frequenza delle due righe è

$$\Delta E_2^{\pm} \approx 5.7 \cdot 10^{-5} \text{ ev} \quad (2.106)$$

ed in termini relativi

$$\frac{\Delta E_2^\pm}{E_2^{(0)} - E_1^{(0)}} = \frac{2 \delta_1^\pm}{\frac{3Z^2 e^2}{8a_B}} \sqrt{1 + \eta^2} \approx \frac{2 \hat{R}^2}{15} \sqrt{1 + \eta^2} \approx 5.6 \cdot 10^{-8} \quad (2.107)$$

La probabilità di transizione per unità di tempo per il processo $|1, 0, 0\rangle \rightarrow |2, -\rangle$ al primo ordine in teoria delle perturbazioni è

$$\begin{aligned} P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,-\rangle}(t) &= \frac{\delta_3^2 y_-^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{(\omega_{20}^- - \omega) t}{2}}{\frac{(\omega_{20}^- - \omega)^2}{4}} = \\ &\approx y_-^2 \frac{e^2}{\hbar c} \frac{2\pi\tau}{\hbar} \frac{9a_B^2 I \tau}{Z^2} \end{aligned} \quad (2.108)$$

dove $I = \frac{c\mathcal{E}_3^2}{8\pi}$ è l'intensità della radiazione incidente e τ è la lunghezza del treno d'onda. Prendendo, per esempio,

$$\tau \approx 10^{-4} \text{ sec} \quad I \approx 10^{-2} \frac{\text{erg}}{\text{sec} \times \text{cm}^2} \quad (2.109)$$

abbiamo

$$\begin{aligned} P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,-\rangle}(\tau) &\approx y_-^2 \frac{6.289 \cdot 0.5^2 \cdot 10^{-16} \cdot 10^{-2} \cdot 10^{-4} \text{ erg}}{137 \cdot 10^2 \cdot 1.05 \cdot 10^{-23} \text{ erg}} \approx \\ &\approx y_-^2 \cdot 9.8 \cdot 10^{-3} \end{aligned} \quad (2.110)$$

Dalla sottosezione precedente abbiamo

$$y_-^2 = \frac{\sqrt{1 + \eta^2} + 1}{2\sqrt{1 + \eta^2}} \quad (2.111)$$

dunque, per un campo elettrico come nell'esempio precedente, con $\eta \approx 0.62$, $y_-^2 \approx 0.93$, ed in definitiva

$$P_{|1,0,0\rangle \rightarrow |2,-\rangle}(\tau) \approx 9.1 \cdot 10^{-3} \quad (2.112)$$

OSSERVAZIONE: la misura diretta di δ_1 attraverso una transizione

$$|2, 1, 0\rangle \rightarrow |2, 0, 0\rangle \quad (2.113)$$

è difficile in quanto la differenza di energia tra i livelli ($2\delta_1$) è molto piccola e corrisponde a radiazione di frequenza troppo bassa per essere misurata direttamente ($2\delta_1 \approx 4.9 \cdot 10^{-5} \text{ ev}$ nell'esempio considerato sopra, che corrisponde

a lunghezze d'onda $\lambda \approx 2.5 \text{ cm}$). Inoltre, in assenza di campo elettrico, non è possibile misurare δ_1 attraverso la misura della differenza di frequenza tra le righe di assorbimento corrispondenti alle transizioni dal fondamentale agli stati $|2, 1, 0\rangle$ e $|2, 0, 0\rangle$, perché la seconda transizione è proibita dalla regola di selezione $\Delta l = \pm 1$. La formula (2.102) dimostra che in linea di principio è possibile misurare δ_1 immergendo il sistema in un campo elettrico ($\delta_2 \neq 0$) e misurando la differenza di intensità tra le due righe di assorbimento corrispondenti alle transizioni dal fondamentale agli stati $|2, \pm\rangle$.

2.3 Regole di selezione per il momento angolare

Denotiamo con $|\alpha, l, m\rangle$ la base degli stati con valori definiti l ed m del momento angolare \vec{L}^2 e della proiezione del momento angolare L_z . L'indice α denota l'insieme degli altri numeri quantici necessari per formare un sistema completo di osservabili. Per esempio, nel caso degli idrogenoidi e trascurando lo spin, α coincide col numero quantico principale $n = 1, 2, \dots$, associato al livello energetico.

Siano V_i , con $i = 1, 2, 3$, tre operatori che si trasformano come un vettore per rotazioni, ovvero che soddisfano le regole di commutazione

$$[L_i, V_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} V_k \quad (2.114)$$

Un esempio importante di operatori vettoriali, rilevante per le transizioni di dipolo atomiche, è costituito dagli operatori associati alle coordinate cartesiane

$$[L_i, x_j] = i \hbar \epsilon_{ijk} x_k$$

La relazione (2.114) mostra che il sottospazio $\mathcal{H}_{V;\alpha,l}$ generato dagli stati

$$\psi_{i;m} \equiv V_i |\alpha, l, m\rangle \quad i = 1, 2, 3; \quad m = -l, -l+1, \dots, l-1, l \quad (2.115)$$

è invariante sotto l'azione del momento angolare

$$\begin{aligned} L_i \psi_{j;m} &= i \hbar \epsilon_{ijk} \psi_{k;m} + \sum_{m'} V_j (L_i^{(l)})_{m'm} |\alpha, l, m'\rangle = \\ &= i \hbar \epsilon_{ijk} \psi_{k;m} + \sum_{m'} (L_i^{(l)})_{m'm} \psi_{j;m'} = \\ &= \sum_{k,m'} (i \hbar \epsilon_{ijk} \delta_{m'm} + \delta_{jk} (L_i^{(l)})_{m'm}) \psi_{k;m'} \end{aligned} \quad (2.116)$$

dove $(L_i^{(l)})_{m'm}$, con $m, m' = -l, -l+1, \dots, l-1, l$, sono le matrici $(2l+1) \times (2l+1)$ che rappresentano gli operatori L_i sullo spazio di momento angolare l , nella base degli stati con proiezione del momento angolare L_z definita.

Pertanto il sottospazio finito-dimensionale $\mathcal{H}_{V;\alpha,l}$ si decompone in sottospazi di momento angolare \vec{L}^2 determinato. Vogliamo determinare i valori possibili di l su $\mathcal{H}_{V;\alpha,l}$. A questo scopo è utile introdurre le seguenti combinazioni lineari degli operatori V_i :

$$\mathcal{V}_0 \equiv V_3 \quad \mathcal{V}_{\pm 1} = \mp \frac{V_1 \pm i V_2}{\sqrt{2}} \quad (2.117)$$

Gli operatori \mathcal{V}_m , $m = -1, 0, 1$ hanno, contrariamente a V_i , momento angolare L_z definito:

$$\begin{aligned} [L_z, \mathcal{V}_m] &= \hbar m \mathcal{V}_m & m &= -1, 0, 1 \\ [L_+, \mathcal{V}_1] &= 0 & [L_+, \mathcal{V}_{-1}] &= \sqrt{2} \hbar \mathcal{V}_0 & [L_+, \mathcal{V}_0] &= \sqrt{2} \hbar \mathcal{V}_1 \\ [L_-, \mathcal{V}_1] &= \sqrt{2} \hbar \mathcal{V}_0 & [L_-, \mathcal{V}_{-1}] &= 0 & [L_-, \mathcal{V}_0] &= \sqrt{2} \hbar \mathcal{V}_{-1} \end{aligned} \quad (2.118)$$

dove $L_{\pm} = L_1 \pm i L_2$.

Tenendo presente la forma esplicita delle matrici $(L_m^{(1)})_{m'm''}$ che rappresentano L_{\pm} e L_3 sullo spazio con $l = 1$ nella base in cui L_3 è diagonale, osserviamo che le regole di commutazione (2.118) possono essere riscritte come segue:

$$[L_m, \mathcal{V}_{m'}] = \sum_{m''=-1}^1 (L_m^{(1)})_{m''m'} \mathcal{V}_{m''} \quad (2.119)$$

dove $m \in \{z, \pm\}$ e $m' = -1, 0, 1$.

Sia $\Psi_{m_1; m_2}$ la base di $\mathcal{H}_{V;\alpha,l}$ definita attraverso gli operatori \mathcal{V}_{m_1} :

$$\begin{aligned} \Psi_{m_1; m_2} &\equiv \mathcal{V}_{m_1} |\alpha, l, m_2\rangle \\ m_1 &= -1, 0, 1; \quad m_2 = -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned} \quad (2.120)$$

Gli stati $\Psi_{m_1; m_2}$ hanno proiezione del momento angolare L_z definita e pari a $m_1 + m_2$. L'azione degli operatori L_m , con $m \in \{z, \pm\}$, sulla base $\Psi_{m_1; m_2}$ si ottiene dalla (2.118) in maniera analoga alla (2.116)

$$\begin{aligned} L_m \Psi_{m_1; m_2} &= ((L_m^{(1)})_{m'_1 m_1} \delta_{m'_2, m_2} + \delta_{m'_1, m_1} (L_m^{(1)})_{m'_2 m_2}) \Psi_{m'_1; m'_2} \\ m_1, m'_1 &= -1, 0, 1; \quad m_2, m'_2 = -l, -l+1, \dots, l-1, l \end{aligned} \quad (2.121)$$

L'azione di L_m sugli stati $\Psi_{m_1; m_2}$ è dunque identica all'azione del momento angolare sul sistema $\mathcal{H}^{(1)} \otimes \mathcal{H}^{(l)}$ composto da due sottosistemi $\mathcal{H}^{(1)}$ e $\mathcal{H}^{(l)}$, di momento angolare uguale a, rispettivamente, 1 e l , nella base con $L_z^{(1)}$ e $L_z^{(2)}$ definiti. Pertanto lo spazio generato dagli stati $\Psi_{m_1; m_2}$ si decompone in componenti con momento angolare

$$l' = l - 1, l, l + 1 \quad (2.122)$$

se $l \neq 0$. Per $l = 0$ lo spazio $\mathcal{H}_{V; \alpha, l}$ ha un'unica componente con $l = 1$ ¹.

In conclusione, gli elementi di matrice

$$\langle \alpha', l', m' | \mathcal{V}_{m_1} | \alpha, l, m_2 \rangle \quad (2.123)$$

si annullano, per $l \neq 0$, se $l' \neq l - 1, l, l + 1$. Se invece $l = 0$, gli elementi di matrice si annullano per $l' \neq 1$. Inoltre gli elementi di matrice (2.123) si annullano se $m' \neq m_1 + m_2$. In formule

$$\begin{aligned} \langle \alpha', l', m' | \mathcal{V}_{m_1} | \alpha, l, m_2 \rangle &= \delta_{m', m_1 + m_2} \left(\delta_{l', l-1} N_{m_1; m_2}^{(l-1, l)}(\alpha', \alpha) + \right. \\ &\quad \left. + \delta_{l', l} N_{m_1; m_2}^{(l, l)}(\alpha', \alpha) + \delta_{l', l+1} N_{m_1; m_2}^{(l+1, l)}(\alpha', \alpha) \right) \quad l \neq 0 \\ \langle \alpha', l', m' | \mathcal{V}_{m_1} | \alpha, 0, 0 \rangle &= \delta_{m', m_1} \delta_{l', 1} N_{m_1}^{(1)}(\alpha', \alpha) \end{aligned} \quad (2.124)$$

I coefficienti $N_{m_1; m_2}^{(l', l)}(\alpha', \alpha)$ dipendono, naturalmente, dall'operatore \mathcal{V} . Quando gli stati $\Psi_{m_1; m_2}$ non sono tutti linearmente indipendenti, i coefficienti $N_{m_1; m_2}^{(l', l)}(\alpha', \alpha)$ si annullano per uno o più valori di l' . Per esempio, per $\mathcal{V}_m = L_m$, lo spazio $\mathcal{H}_{V; \alpha, l}$ ha soltanto la componente con $l' = l$ e quindi $N_{m_1; m_2}^{(l \pm 1, l)}(\alpha', \alpha) = 0$

2.3.1 Il teorema di Wigner-Eckart

Per quanto riguarda gli elementi di matrici non nulli, è possibile, attraverso un'analisi un po' più complessa, determinare la dipendenza da m_1 e m_2 dei coefficienti $N_{m_1; m_2}^{(l', l)}(\alpha', \alpha)$. Più precisamente, è possibile dimostrare che

$$\begin{aligned} N_{m_1; m_2}^{(l', l)}(\alpha', \alpha) &= \mathcal{N}_{\mathcal{V}}^{(l', l)}(\alpha', \alpha) C_{m_1; l, m_2}^{(l')} \quad l \neq 0 \quad l' = l - 1, l, l + 1 \\ N_{m_1}^{(1)}(\alpha', \alpha) &= \mathcal{N}_{\mathcal{V}}(\alpha', \alpha) \quad l = 0 \end{aligned} \quad (2.125)$$

¹Per operatori \mathcal{V}_m particolari gli stati $\Psi_{m_1; m_2}$ possono non essere linearmente indipendenti. In questo caso gli autovalori di \vec{L}^2 sul sottospazio generato dagli stati $\Psi_{m_1; m_2}$ formano un sottoinsieme proprio dei valori possibili (2.122). Vedi più sotto per le conseguenze di questo sulle regole di selezione.

dove i coefficienti $C_{m_1; l, m_2}^{(l')}$ sono *universali*, nel senso che non dipendono da \mathcal{V}_m .

Due esempi di applicazione del teorema di Wigner-Eckart

Come prima semplice applicazione del teorema di Wigner-Eckart consideriamo gli elementi di matrice dell'operatore coordinata

$$\langle \alpha', l', m' | x_m | \alpha, 0, 0 \rangle = \delta_{l', 1} \delta_{m', m} \langle \alpha', 1, 1 | x_{+1} | \alpha, 0, 0 \rangle \equiv \delta_{l', 1} \delta_{m', m} \mathcal{N}(\alpha', \alpha)$$

dove

$$x_{\pm 1} \equiv \mp \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}} \quad x_0 \equiv z \quad (2.126)$$

Pertanto

$$\langle \alpha', 1, 1 | x_{+1} | \alpha, 0, 0 \rangle = \langle \alpha', 1, 0 | x_0 | \alpha, 0, 0 \rangle = \langle \alpha', 1, -1 | x_{-1} | \alpha, 0, 0 \rangle$$

ovvero

$$\begin{aligned} \langle \alpha', 1, 0 | z | \alpha, 0, 0 \rangle &= \mathcal{N}(\alpha', \alpha) \\ \langle \alpha', 1, -1 | x | \alpha, 0, 0 \rangle &= -\langle \alpha', 1, +1 | x | \alpha, 0, 0 \rangle = \frac{\mathcal{N}(\alpha', \alpha)}{\sqrt{2}} \\ \langle \alpha', 1, -1 | y | \alpha, 0, 0 \rangle &= \langle \alpha', 1, +1 | y | \alpha, 0, 0 \rangle = \frac{i\mathcal{N}(\alpha', \alpha)}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

Come secondo esempio di applicazione delle relazioni di Wigner-Eckart deriviamo una relazione tra i tre elementi di matrice dell'operatore coordinata z

$$M_m(\alpha', \alpha) \equiv \langle \alpha', 2, m | z | \alpha, 1, m \rangle \quad m = -1, 0, 1 \quad (2.127)$$

A questo scopo deriviamo i coefficienti di Clebsh-Gordon relativi alla decomposizione del prodotto di due momenti angolari $l = 1^2$. Partendo da

$$|1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle = |2, 2\rangle$$

otteniamo

$$L_- |1, 1\rangle \otimes |1, 1\rangle = \sqrt{2}(|1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle) = 2|2, 1\rangle$$

²Questi coefficienti sono naturalmente tabulati e si trovano in qualunque testo di meccanica quantistica elementare: in quanto segue ricordiamo il modo di derivarli.

ovvero

$$|1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle = \sqrt{2} |2, 1\rangle$$

Pertanto

$$|1, 0\rangle \otimes |1, 1\rangle - |1, 1\rangle \otimes |1, 0\rangle = \sqrt{2} |1, 1\rangle$$

ovvero

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

Analogamente

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

Inoltre

$$\begin{aligned} |1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle + 2 |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle &= \sqrt{6} |2, 0\rangle \\ |1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle - |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle &= \sqrt{2} |1, 0\rangle \end{aligned}$$

Quindi

$$|1, -1\rangle \otimes |1, 1\rangle - |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle + |1, 1\rangle \otimes |1, -1\rangle = \sqrt{3} |0, 0\rangle$$

Deduciamo

$$|1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |2, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0\rangle$$

In definitiva i coefficienti di Clebsh-Gordon cercati sono:

$$\begin{aligned} |1, 0\rangle \otimes |1, \pm 1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|2, \pm 1\rangle + |1, \pm 1\rangle) \\ |1, 0\rangle \otimes |1, 0\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |2, 0\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} |0, 0\rangle \end{aligned}$$

Questo significa che

$$\begin{aligned}\langle \alpha', 2, \pm 1 | z | \alpha, 1, \pm 1 \rangle &= \mathcal{N}(\alpha', \alpha) \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \langle \alpha', 2, 0 | z | \alpha, 1, 0 \rangle &= \mathcal{N}(\alpha', \alpha) \sqrt{\frac{2}{3}}\end{aligned}\tag{2.128}$$

ovvero

$$M_+ = M_- \quad \frac{M_0}{M_{\pm}} = \frac{2}{\sqrt{3}}\tag{2.129}$$

in accordo col calcolo esplicito (vedi esempio nella raccolta delle prove scritte di esame).

2.4 Sistema a due livelli

Supponiamo il sistema abbia soltanto due livelli $\psi_{1,2}$ di energie $E_{1,2}$. La funzione d'onda al tempo t in rappresentazione dell'interazione si scrive

$$\Psi^{int}(t) = a_1(t) \psi_1 + a_2(t) \psi_2\tag{2.130}$$

Supponiamo che al tempo $t = 0$ il sistema si trovi nello stato ψ_1 : vogliamo calcolare l'ampiezza di transizione allo stato ψ_2 al tempo t nel caso in cui il sistema sia perturbato da un potenziale

$$\hat{V}(t) = \hat{A} e^{-i\omega t} + \hat{A}^\dagger e^{i\omega t}\tag{2.131}$$

Le equazioni di evoluzione per la funzione d'onda nella rappresentazione dell'interazione

$$i \hbar \frac{d\Psi^{int}(t)}{dt} = \hat{V}^{int}(t) \Psi^{int}(t)\tag{2.132}$$

danno

$$\begin{aligned}i \hbar \dot{a}_1(t) &= \langle 1 | \hat{V}(t) | 1 \rangle a_1 + e^{-i\omega_{21}t} \langle 1 | \hat{V}(t) | 2 \rangle a_2 \\ i \hbar \dot{a}_2(t) &= \langle 2 | \hat{V}(t) | 2 \rangle a_2 + e^{i\omega_{21}t} \langle 2 | \hat{V}(t) | 1 \rangle a_1\end{aligned}\tag{2.133}$$

dove

$$\omega_{21} \equiv \frac{E_2 - E_1}{\hbar}\tag{2.134}$$

Nel caso di una perturbazione periodica (2.131) con frequenza ω vicina a ω_{21}

$$\omega = \omega_{21} - \epsilon \quad (2.135)$$

con ϵ piccolo, possiamo trascurare tutti i termini eccetto quelli che contengono le fasi $e^{i(\omega-\omega_{21})t}$. Approssimiamo dunque il problema con il sistema seguente

$$\begin{aligned} i \hbar \dot{a}_1(t) &= e^{i(\omega-\omega_{21})t} A_{21}^* a_2 = e^{-i\epsilon t} A_{21}^* a_2 \\ i \hbar \dot{a}_2(t) &= e^{-i(\omega_{21}-\omega)t} A_{21} a_1 = e^{i\epsilon t} A_{21} a_1 \end{aligned} \quad (2.136)$$

dove $A_{21} \equiv \langle 2|A|1\rangle$. Derivando la prima equazione otteniamo

$$\begin{aligned} i \hbar \ddot{a}_1 &= -i\epsilon i \hbar \dot{a}_1 + e^{-i\epsilon t} A_{21}^* \dot{a}_2 = \\ &= -i\epsilon i \hbar \dot{a}_1 - \frac{i}{\hbar} e^{-i\epsilon t} A_{21}^* e^{i\epsilon t} A_{21} a_1 \end{aligned} \quad (2.137)$$

Pertanto

$$\ddot{a}_1 + i\epsilon \dot{a}_1 + \frac{|A_{21}|^2}{\hbar^2} a_1 = 0 \quad (2.138)$$

Cerchiamo una soluzione della forma

$$a_1 = \alpha e^{i\beta t} \quad (2.139)$$

Otteniamo

$$\beta^2 + \epsilon\beta - \frac{|A_{21}|^2}{\hbar^2} = 0 \quad (2.140)$$

da cui

$$\beta_{\pm} = -\frac{\epsilon}{2} \pm \sqrt{\frac{\epsilon^2}{4} + \frac{|A_{21}|^2}{\hbar^2}} \equiv -\frac{\epsilon}{2} \pm \Omega \quad (2.141)$$

Pertanto

$$a_1(t) = e^{-i\frac{\epsilon}{2}t} (\alpha_+ e^{i\Omega t} + \alpha_- e^{-i\Omega t}) \quad (2.142)$$

Dalla (2.136) otteniamo $a_2(t)$

$$a_2(t) = i \hbar \dot{a}_1(t) \frac{e^{+i\epsilon t}}{A_{21}^*} = -\frac{\hbar e^{i\frac{\epsilon}{2}t}}{A_{21}^*} \left((\Omega - \frac{\epsilon}{2}) \alpha_+ e^{i\Omega t} - (\Omega + \frac{\epsilon}{2}) \alpha_- e^{-i\Omega t} \right) \quad (2.143)$$

Imponiamo la condizione che al tempo $t = 0$ il sistema si trovi nello stato $|1\rangle$:

$$a_2(0) = 0 = (\Omega - \frac{\epsilon}{2}) \alpha_+ - (\Omega + \frac{\epsilon}{2}) \alpha_- \quad (2.144)$$

da cui deduciamo

$$\alpha_+ = \frac{\Omega + \frac{\epsilon}{2}}{\Omega - \frac{\epsilon}{2}} \alpha_- \quad (2.145)$$

Pertanto

$$a_1(0) = 1 = \alpha_- \left(\frac{\Omega + \frac{\epsilon}{2}}{\Omega - \frac{\epsilon}{2}} + 1 \right) \quad (2.146)$$

cioè

$$\alpha_{\pm} = \frac{\Omega \pm \frac{\epsilon}{2}}{2\Omega} \quad (2.147)$$

In conclusione

$$\begin{aligned} a_1(t) &= \frac{e^{-i\frac{\epsilon}{2}t}}{2\Omega} \left((\Omega + \frac{\epsilon}{2}) e^{i\Omega t} + (\Omega - \frac{\epsilon}{2}) e^{-i\Omega t} \right) = \\ &= e^{-i\frac{\epsilon}{2}t} \left(\cos \Omega t + i \frac{\epsilon}{2\Omega} \sin \Omega t \right) \\ a_2(t) &= -\frac{A_{21} e^{i\frac{\epsilon}{2}t}}{2\Omega \hbar} (e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t}) = -\frac{i A_{21} e^{i\frac{\epsilon}{2}t}}{\Omega \hbar} \sin \Omega t \end{aligned} \quad (2.148)$$

La probabilità di transizione allo stato $|2\rangle$ al tempo t è pertanto

$$P_{1 \rightarrow 2}(t) = \frac{|A_{21}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \Omega t}{\Omega^2} \quad (2.149)$$

Sviluppiamo questo risultato per A_{12} piccoli, in modo da riottenere il risultato della teoria delle perturbazioni:

$$\Omega = \frac{\epsilon}{2} \left(1 + \frac{2|A_{12}|^2}{\hbar^2 \epsilon^2} + O\left(\frac{|A_{12}|^4}{\hbar^4 \epsilon^4}\right) \right) \quad (2.150)$$

dunque, al primo ordine in teoria delle perturbazioni, otteniamo

$$a_2^{pert}(t) = -\frac{A_{21}}{\hbar} \frac{e^{i\epsilon t} - 1}{\epsilon} \quad (2.151)$$

e

$$P_2^{pert}(t) = \frac{|A_{21}|^2}{\hbar^2} \frac{\sin^2 \frac{\epsilon t}{2}}{\frac{\epsilon^2}{4}} \quad (2.152)$$

in accordo con le formule generali.

Discutiamo il regime di validità del risultato perturbativo. Evidentemente una condizione *necessaria* per l'applicabilità della teoria delle perturbazioni è:

$$\frac{|A_{12}|}{\hbar} \ll \epsilon \quad (2.153)$$

Questa condizione non è però *sufficiente* per tempi arbitrariamente grandi. In effetti, confrontando (2.148) con (2.151) deduciamo che per tempi t tali che

$$\left(\Omega - \frac{\epsilon}{2}\right)t \sim 1 \quad (2.154)$$

il risultato perturbativo non è più affidabile — anche se la (2.153) è verificata: la ragione è che per tempi così grandi le fasi dei seni nelle (2.149) e (2.152) saranno significativamente diverse. In definitiva il risultato perturbativo è affidabile non soltanto se vale la (2.153) ma anche per tempi non troppo grandi:

$$\frac{|A_{12}|^2 t}{\hbar^2 \epsilon} \ll 1 \quad (2.155)$$

Notiamo infine che per $\epsilon = 0$, o più generalmente, nel regime opposto a quello perturbativo (2.153)

$$\frac{|A_{12}|}{\hbar} \gg \epsilon \quad (2.156)$$

l'ampiezza diventa (a meno di una fase)

$$a_1(t) = -i \sin \frac{|A_{12}|}{\hbar} t \quad (2.157)$$

Per tempi t sufficientemente piccoli

$$\frac{|A_{12}|}{\hbar} t \ll 1 \quad (2.158)$$

l'ampiezza si riduce a

$$a_1(t) = -i \frac{|A_{12}|}{\hbar} t \quad (2.159)$$

che coincide con l'espressione perturbativa se

$$\epsilon t \ll 1 \quad (2.160)$$

2.4.1 Calcolo perturbativo al terzo ordine

Espandiamo il risultato esatto (2.148) all'ordine successivo in teoria delle perturbazioni:

$$\begin{aligned} a_2(t) &= -\frac{i A_{21} e^{i \frac{\epsilon}{2} t}}{\Omega \hbar} \sin \Omega t = \\ &= -\frac{2i A_{21} e^{i \frac{\epsilon}{2} t}}{\epsilon \hbar} \sin \frac{\epsilon t}{2} \left[1 + \frac{2|A_{21}|^2}{\hbar^2 \epsilon^2} \left(\frac{\epsilon t}{2} \cot \frac{\epsilon t}{2} - 1 \right) + \dots \right] \end{aligned} \quad (2.161)$$

La correzione successiva al termine del primo ordine è pertanto del terzo ordine. Trascurando nella formula generale per la correzione perturbativa al terzo ordine i termini proporzionali alle fasi “grandi” rispetto a quelli proporzionali alla fase “piccola” $e^{i\epsilon t}$, otteniamo:

$$\begin{aligned}
a_2^{(3)}(t) &= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \langle 2|V^{(int)}(t_1) V^{(int)}(t_2) V^{(int)}(t_3)|1\rangle = \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 e^{i(\omega_{21} t_1 - \omega_{21} t_2 + \omega_{21} t_3)} \times \\
&\times \langle 2|V(t_1)|1\rangle \langle 1|V(t_2)|2\rangle \langle 2|V(t_3)|1\rangle = \\
&= \left(\frac{-i}{\hbar}\right)^3 |A_{21}|^2 A_{21} \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 e^{i(\epsilon t_1 - \epsilon t_2 + \epsilon t_3)} = \\
&= -\frac{|A_{21}|^2 A_{21}}{\hbar^3 \epsilon^3} \left[2(1 - e^{i\epsilon t}) + i t \epsilon (1 + e^{i\epsilon t}) \right] = \\
&= -\frac{2i |A_{21}|^2 A_{21} e^{i\frac{\epsilon}{2} t}}{\hbar^3 \epsilon^3} \left[-2 \sin \frac{\epsilon t}{2} + t \epsilon \cos \frac{\epsilon t}{2} \right] \tag{2.162}
\end{aligned}$$

in accordo con l’espansione del risultato esatto (2.161).

Notiamo che, per quanto piccolo sia il rapporto $\frac{|A_{21}|^2}{\hbar^2 \epsilon^2}$, per tempi grandi, tali che

$$\frac{|A_{21}|^2 t}{\hbar^2 \epsilon} \sim 1 \tag{2.163}$$

il termine del secondo ordine diventa dello stesso ordine di quello del primo — un segnale che in questo regime l’espansione perturbativa perde significato. Ritroviamo in questo modo la condizione (2.155) per la validità del risultato perturbativo.

2.5 Transizioni a stati nello spettro continuo

Si consideri un sistema che si trova al tempo $t = 0$ in uno stato discreto ψ_i , autostato dell’ Hamiltoniana imperturbata \hat{H}_0 con autovalore $E_i = \hbar \omega_i$. Al tempo $t = 0$ si accende la perturbazione $\hat{V}(t)$. Si vuole calcolare la probabilità che al tempo t il sistema transisca in uno stato dello spettro continuo con energia compresa tra $E_f - 1/2\Delta E$ e $E_f + 1/2\Delta E$.

L'operatore di evoluzione temporale nella rappresentazione di interazione è

$$U^{int}(t) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \hat{V}^{int}(t') + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_0^t dt' \hat{V}^{int}(t') \int_0^{t'} dt'' \hat{V}^{int}(t'') + \dots \quad (2.164)$$

Al primo ordine in teoria delle perturbazioni, l'ampiezza di probabilità per la transizione ad uno stato del continuo $|E\rangle$ di energia E è

$$\langle E|U^{int}(t)|\psi_i\rangle = -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle E|\hat{V}^{int}(t')|\psi_i\rangle \quad (2.165)$$

Quest'ampiezza di probabilità non ha un significato fisico diretto, in quanto gli stati dello spettro continuo non sono normalizzabili. In particolare il valore di questa ampiezza dipenderà dalla normalizzazione scelta per gli autostati dell'energia $|E\rangle$.

La quantità fisica misurabile è invece la probabilità che al tempo t il sistema si trovi in uno stato con energia compresa tra $E_f - 1/2\Delta E$ e $E_f + 1/2\Delta E$. Denotiamo con $\mathcal{H}_{E_f, \Delta E}$ il sottospazio degli stati con questi valori dell'energia. La probabilità in questione è data dall'espressione

$$P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) = \sum_n \left| \langle n|U(t)|\psi_i\rangle \right|^2 \quad (2.166)$$

dove

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} U^{int}(t) \quad (2.167)$$

è l'operatore di evoluzione temporale e $\{|n\rangle\}$ è una base ortornormale di stati *normalizzabili* del sottospazio $\mathcal{H}_{E_f, \Delta E}$. Naturalmente gli stati $|n\rangle$ non saranno autostati dell'energia.

Sia

$$\langle E|E'\rangle = \rho(E)\delta(E - E') \quad (2.168)$$

la normalizzazione scelta per le autofunzioni dell'Hamiltoniana dello spettro continuo. Stiamo supponendo per il momento, per semplicità, non-degeneri. Nel caso degeneri bisognerà includere nelle formule che seguono somme ed integrazione sui numeri quantici aggiuntivi che specificano gli stati finali.

Abbiamo

$$|n\rangle = \int_{E_f - 1/2\Delta E}^{E_f + 1/2\Delta E} dE a_n(E) |E\rangle \quad (2.169)$$

Pertanto

$$\langle E|n\rangle = a_n(E) \rho(E) \quad (2.170)$$

per cui

$$|n\rangle = \int_{E_f-1/2\Delta E}^{E_f+1/2\Delta E} \frac{dE}{\rho(E)} |E\rangle \langle E|n\rangle \quad (2.171)$$

Questa relazione implica che il proiettore sullo spazio $\mathcal{H}_{E_f,\Delta E}$

$$\mathcal{P}_{E_f,\Delta E} = \sum_n |n\rangle \langle n| \quad (2.172)$$

si scrive in termini delle autofunzioni dell'energia come

$$\mathcal{P}_{E_f,\Delta E} = \int_{E_f-1/2\Delta E}^{E_f+1/2\Delta E} \frac{dE}{\rho(E)} |E\rangle \langle E| \quad (2.173)$$

Equivalentemente

$$\begin{aligned} \sum_n a_n(E)^* a_n(E') &= \sum_n \frac{1}{\rho(E)\rho(E')} \langle E|n\rangle \langle n|E'\rangle = \\ &= \frac{1}{\rho(E)\rho(E')} \langle E|E'\rangle = \frac{1}{\rho(E)} \delta(E - E') \end{aligned} \quad (2.174)$$

In conclusione la probabilità di transizione (2.166) si esprime in termini delle ampiezze di transizione verso autostati dell'energia del continuo nel modo seguente

$$P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) = \int_{E_f-1/2\Delta E}^{E_f+1/2\Delta E} \frac{dE}{\rho(E)} \left| \langle E|U(t)|\psi_i\rangle \right|^2 \quad (2.175)$$

Utilizzando la (2.167) otteniamo, al primo ordine in teoria delle perturbazioni

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) &= \int_{E_f-1/2\Delta E}^{E_f+1/2\Delta E} \frac{dE}{\rho(E)} \left| \langle E|U^{int}(t)|\psi_i\rangle \right|^2 = \\ &= \frac{1}{\hbar^2} \int_{E_f-1/2\Delta E}^{E_f+1/2\Delta E} \frac{dE}{\rho(E)} \left| \int_0^t dt' \langle E|\hat{V}(t')|\psi_i\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_i)t'} \right|^2 + \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (2.176)$$

Nel caso in cui lo spettro continuo sia degenere, l'integrazione nel secondo membro dell'equazione (2.176) include l'integrazione e/o la somma sugli altri numeri quantici che specificano gli stati finali.

2.5.1 Perturbazioni periodiche

Consideriamo il caso in cui la perturbazione è periodica di frequenza ω

$$\hat{V}(t) = A e^{-i\omega t} + A^\dagger e^{i\omega t} \quad (2.177)$$

Come discusso precedentemente le ampiezze di transizione verso stati del continuo saranno più grandi per quei valori dell'energia E dello stato finale vicini a

$$E_f = E_i + \hbar\omega \quad (2.178)$$

Per questi valori il termine dominante nell'ampiezza del primo ordine è

$$\begin{aligned} \langle E|U^{int}(t)|\psi_i\rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \langle E|\hat{A}|\psi_i\rangle e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_i-\hbar\omega)t'} = \\ &= -\langle E|\hat{A}|\psi_i\rangle \frac{e^{\frac{i}{\hbar}(E-E_i-\hbar\omega)t} - 1}{E - E_i - \hbar\omega} \end{aligned} \quad (2.179)$$

Inserendo quest'espressione nella (2.176) otteniamo

$$P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{E_f-1/2\Delta E}^{E_f+1/2\Delta E} dE \frac{|\langle E|\hat{A}|\psi_i\rangle|^2}{\rho(E)} t^2 \frac{\sin^2 \frac{(E-E_i-\hbar\omega)t}{2\hbar}}{\left(\frac{(E-E_i-\hbar\omega)t}{2\hbar}\right)^2} \quad (2.180)$$

Operando il cambio di variabili nell'integrale

$$E = E_f + \epsilon = E_i + \hbar\omega + \epsilon \quad (2.181)$$

abbiamo

$$P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) = \frac{1}{\hbar^2} \int_{-1/2\Delta E}^{+1/2\Delta E} \frac{d\epsilon}{\rho(E_f + \epsilon)} |\langle E_f + \epsilon|\hat{A}|\psi_i\rangle|^2 t^2 \frac{\sin^2 \frac{\epsilon t}{2\hbar}}{\left(\frac{\epsilon t}{2\hbar}\right)^2} \quad (2.182)$$

Poniamo ora

$$x = \frac{\epsilon t}{2\hbar} \quad (2.183)$$

(2.182) diventa

$$P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) = \frac{2}{\hbar} \int_{-\frac{\Delta E t}{4\hbar}}^{\frac{\Delta E t}{4\hbar}} \frac{dx}{\rho\left(E_f + \frac{2\hbar x}{t}\right)} \left| \langle E_f + \frac{2\hbar x}{t} | \hat{A} | \psi_i \rangle \right|^2 t \frac{\sin^2 x}{x^2} \quad (2.184)$$

Osserviamo ora che la funzione $\frac{\sin^2 x}{x^2}$ è sostanzialmente diversa da zero solo nella regione $|x| \leq \pi$. Pertanto se

$$\frac{2\pi\hbar}{t} \ll E_f \rightarrow t \gg \frac{2\pi\hbar}{E_f} \quad (2.185)$$

le funzioni $\rho(E_f + \frac{2\hbar x}{t})$ e $|\langle E_f + \frac{2\hbar x}{t} | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2$ sono sostanzialmente costanti e coincidenti, nel caso di spettro continuo dell'energia non-degenere, con $\rho(E_f)$ e $|\langle E_f | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2$ nell'intervallo di integrazione significativo, $|x| \leq \pi$.

In conclusione, per tempi t grandi, nel senso specificato dalla relazione (2.185), la probabilità di transizione dipende linearmente dal tempo. Possiamo scrivere nel caso di spettro continuo non-degenere

$$\begin{aligned} P_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t) &= \frac{2t}{\hbar} \frac{|\langle E_f | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2}{\rho(E_f)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{\sin^2 x}{x^2} = \\ &= \frac{2\pi t}{\hbar} \frac{|\langle E_f | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2}{\rho(E_f)} \end{aligned} \quad (2.186)$$

dove si è anche supposto che, oltre alla (2.185) valga ugualmente la

$$t \gg \frac{2\pi\hbar}{\Delta E} \quad (2.187)$$

In queste condizioni è pertanto ben definita, ed è indipendente dal tempo, la probabilità di transizione per unità di tempo:

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{|\langle E_f | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2}{\rho(E_f)} \quad (2.188)$$

Possiamo riscrivere il risultato (2.188) in una maniera che è più conveniente nel caso (frequente) in cui gli autovalori dell'energia dello spettro continuo siano degeneri. L'argomento precedente dice che nel caso di tempi t grandi (nel senso della (2.185)) vale il limite nel senso delle distribuzioni

$$\frac{\sin^2 \left(\frac{(E-E_f)t}{2\hbar} \right)}{\left(\frac{(E-E_f)t}{2\hbar} \right)^2} \rightarrow \pi \delta \left(\frac{(E-E_f)t}{2\hbar} \right) = \frac{2\pi\hbar}{t} \delta(E-E_f) \quad (2.189)$$

Otteniamo dunque dalla (2.180) la “regola d’oro” di Fermi:

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{dE}{\rho(E)} |\langle E | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E-E_f) \quad (2.190)$$

dove $E_f = E_i + \hbar\omega$.

Nel caso più generale, gli stati finali del continuo $|E, \alpha\rangle$ sono labellati oltre che dall'energia E anche da altri numeri quantici α (che possono essere sia discreti che continui). Questi stati soddisferanno, in luogo della (2.168), la condizione di ortogonalità

$$\langle E', \alpha' | E, \alpha \rangle = \rho(E, \alpha) \delta(E - E') \delta(\alpha - \alpha') \quad (2.191)$$

dove la delta rispetto agli indici α indica una delta di Dirac per α continuo e di Kronecker per α discreto. La regola di Fermi (2.190) si generalizza come segue

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{dE d\alpha}{\rho(E, \alpha)} |\langle E, \alpha | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E - E_f) \quad (2.192)$$

dove il segno di integrale sottintende, oltre all'integrazione su E , anche l'integrazione e/o la somma sull'indice continuo e/o discreto α .

Può essere conveniente riscrivere la formula (2.192) in maniera leggermente più generale. Supponiamo di scegliere come base degli stati del continuo degli stati $|f\rangle$ labellati da indici f , che siano autostati dell'energia con autovalore $E(f)$:

$$\begin{aligned} \hat{H} |f\rangle &= E(f) |f\rangle \\ \langle f' | f \rangle &= \rho(f) \delta(f - f') \end{aligned} \quad (2.193)$$

(2.191) è un caso particolare di questa scelta, per il quale $f = \{E, \alpha\}$, ma è anche possibile prendere per f degli indici che non includono l'energia. Per esempio, nel caso di una particella in 3-dimensioni senza spin, una scelta conveniente per f è il vettore d'onda \vec{k} . In questo caso $E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$.

Dalla (2.193) possiamo dedurre, analogamente alla (2.172), l'espressione per il proiettore

$$\mathcal{P}_{E_f, \Delta E} = \int_{D_{E_f, \Delta E}} \frac{df}{\rho(f)} |f\rangle \langle f| \quad (2.194)$$

dove $D_{E_f, \Delta E}$ è il dominio nello spazio f definito dalle superfici

$$E(f) = E_f \pm \Delta E \quad (2.195)$$

Possiamo perciò riscrivere la regola d'oro (2.192) in termini di una base generica di autostati dell'energia $|f\rangle$ nella forma

$$\frac{dP_{i \rightarrow f}^{\Delta E}(t)}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \int \frac{df}{\rho(f)} |\langle f | \hat{A} | \psi_i \rangle|^2 \delta(E(f) - E_f) \quad (2.196)$$

2.5.2 Buca di potenziale uni-dimensionale

Si consideri un sistema uni-dimensionale con potenziale

$$V(x) = -V_0 \quad \text{per } |x| \leq a \quad \text{e} \quad V(x) = 0 \quad \text{per } |x| \geq a \quad (2.197)$$

dove $V_0 > 0$ e $a > 0$ sono rispettivamente la profondità e la larghezza della buca. Supponiamo che al tempo $t = 0$ il sistema si trovi nello stato fondamentale, descritto dalla autofunzione dell'Hamiltoniana $\psi_0(x)$ con autovalore $-E_0$, con $E_0 > 0$. In questo istante di tempo viene accesa la perturbazione dipendente dal tempo

$$v(x, t) = \frac{1}{2}v(x)(e^{-i\omega t} + e^{i\omega t}) \quad (2.198)$$

dove $v(x)$ è la funzione

$$v(x) = -v_0 \quad \text{per } |x| \leq a \quad \text{e} \quad v(x) = 0 \quad \text{per } |x| \geq a \quad (2.199)$$

Si vuole calcolare, al primo ordine in teoria delle perturbazioni, la probabilità per unità di tempo che la particella transisca in uno stato del continuo con energia

$$E_f = -E_0 + \hbar\omega > 0 \quad (2.200)$$

Una base per gli stati del continuo è data dalle autofunzioni dell'energia $\psi_E^{(\pm)}(x)$ con autovalore $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} > 0$, di parità definita rispetto alla riflessione $x \rightarrow -x$:

$$\begin{aligned} \psi_E^{(\pm)}(x) &= A_E^{(\pm)} e^{ikx} + B_E^{(\pm)} e^{-ikx} && \text{per } x > a \\ \psi_E^{(\pm)}(x) &= \frac{C_E^{(\pm)}}{2} (e^{ik_1 x} \pm e^{-ik_1 x}) && \text{per } |x| \leq a \\ \psi_E^{(\pm)}(x) &= \pm \psi_E^{(\pm)}(-x) && \text{per } x < -a \end{aligned} \quad (2.201)$$

dove

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}} \quad (2.202)$$

I coefficienti sono determinati dalle relazioni di continuità; per le autofunzioni pari abbiamo

$$\begin{aligned} C_E^{(+)} \cos k_1 a &= A_E^{(+)} e^{ika} + B_E^{(+)} e^{-ika} \\ -C_E^{(+)} \sin k_1 a &= ik(A_E^{(+)} e^{ika} - B_E^{(+)} e^{-ika}) \end{aligned} \quad (2.203)$$

da cui

$$i \frac{k_1}{k} \tan k_1 a = \frac{A_E^{(+)} e^{i k a} - B_E^{(+)} e^{-i k a}}{A_E^{(+)} e^{i k a} + B_E^{(+)} e^{-i k a}} \quad (2.204)$$

cioè

$$B_E^{(+)} = A_E^{(+)} e^{2 i k a} \frac{1 - i \frac{k_1}{k} \tan k_1 a}{1 + i \frac{k_1}{k} \tan k_1 a} \equiv A_E^{(+)} e^{2 i k a - 2 i \theta(k, a)} \quad (2.205)$$

dove $\theta(k, a)$ è una fase definita da

$$\frac{1 - i \frac{k_1}{k} \tan k_1 a}{1 + i \frac{k_1}{k} \tan k_1 a} = e^{-2 i \theta(k, a)} = e^{-2 i \arctan(\frac{k_1}{k} \tan k_1 a)} \quad (2.206)$$

Inoltre

$$C_E^{(+)} = A_E^{(+)} \frac{2}{\cos k_1 a + i \frac{k_1}{k} \sin k_1 a} e^{i k a} \quad (2.207)$$

In conclusione le autofunzioni dello spettro continuo pari sono

$$\begin{aligned} \psi_E^{(+)}(x) &= A_E^{(+)} [e^{i k x} + e^{2 i k a - 2 i \theta(k, a)} e^{-i k x}] && \text{per } x > a \\ \psi_E^{(+)}(x) &= \frac{2 A_E^{(+)} e^{i k a}}{\cos k_1 a + i \frac{k_1}{k} \sin k_1 a} \cos k_1 x && \text{per } |x| \leq a \\ \psi_E^{(+)}(x) &= \psi_E^{(+)}(-x) && \text{per } x < -a \end{aligned} \quad (2.208)$$

Se prendiamo pertanto

$$A_E^{(+)} = \frac{1}{\sqrt{4 \pi}} \quad (2.209)$$

le autofunzioni dell'energia pari saranno normalizzate come segue

$$(\psi_E^{(+)}, \psi_{E'}^{(+)}) = \delta(k - k') = \frac{\hbar^2 k}{m} \delta(E - E') \quad (2.210)$$

Determiniamo ora la funzione d'onda $\psi_0(x)$ dello stato fondamentale del sistema imperturbato:

$$\begin{aligned} \psi_0(x) &= \alpha e^{-k_0 x} && \text{per } x > a \\ \psi_0(x) &= \beta \cos k_2 x && \text{per } |x| \leq a \\ \psi_0(x) &= \psi_0(-x) && \text{per } x < -a \end{aligned} \quad (2.211)$$

dove

$$k_0 = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E_0)}{\hbar^2}} \quad (2.212)$$

Le condizioni di continuità danno

$$\begin{aligned} \beta \cos k_2 a &= \alpha e^{-k_0 a} \\ -\beta k_2 \sin k_2 a &= -k_0 \alpha e^{-k_0 a} \end{aligned} \quad (2.213)$$

Da queste ricaviamo l'equazione che determina l'energia dello stato fondamentale E_0

$$k_2 \tan k_2 a = k_0 \quad (2.214)$$

e

$$\beta = \alpha \sqrt{\frac{V_0}{V_0 - E_0}} e^{-k_0 a} \quad (2.215)$$

Imponiamo la condizione di normalizzazione

$$(\psi_0, \psi_0) = 1 \quad (2.216)$$

Abbiamo

$$I_1 \equiv 2 |\alpha|^2 \int_a^\infty e^{-2k_0 x} = \frac{|\alpha|^2}{k_0} e^{-2k_0 a} \quad (2.217)$$

e

$$\begin{aligned} I_2 &\equiv 2 |\alpha|^2 \frac{V_0 e^{-2k_0 a}}{V_0 - E_0} \int_0^a \cos^2 k_2 x = \\ &= |\alpha|^2 \frac{V_0 e^{-2k_0 a}}{V_0 - E_0} \frac{a k_2 + \cos k_2 a \sin k_2 a}{k_2} = \\ &= |\alpha|^2 \frac{V_0 e^{-2k_0 a}}{V_0 - E_0} \left(a + \frac{k_0}{k_2^2 + k_0^2} \right) = \\ &= |\alpha|^2 \frac{e^{-2k_0 a}}{V_0 - E_0} \left(a V_0 + \frac{\hbar^2 k_0}{2m} \right) \end{aligned} \quad (2.218)$$

Pertanto

$$|\alpha|^2 \frac{2m V_0 e^{-2k_0 a}}{\hbar^2 k_2^2 k_0} (1 + a k_0) = 1 \quad (2.219)$$

da cui

$$|\alpha|^2 = \frac{\hbar^2 k_2^2 k_0 e^{2k_0 a}}{2m V_0 (1 + a k_0)} \quad |\beta|^2 = \frac{k_0}{1 + a k_0} \quad (2.220)$$

L'elemento di matrice che appare nella formula (2.188) per la probabilità di transizione è pertanto

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2}(\psi_E^{(+)}, v(x) \psi_0(x)) &= \frac{e^{-ik_a} \beta v_0 \int_0^a dx \cos k_1 x \cos k_2 x}{\sqrt{\pi} (\cos k_1 a - i \frac{k_1}{k} \sin k_1 a)} = \\
&= \frac{e^{-ik_a} \beta v_0}{\sqrt{\pi} (\cos k_1 a - i \frac{k_1}{k} \sin k_1 a)} \frac{k_1 \cos a k_2 \sin a k_1 - k_2 \cos a k_1 \sin a k_2}{k_1^2 - k_2^2} \\
&= \frac{e^{-ik_a} \beta v_0 \cos k_2 a}{\sqrt{\pi} (\cos k_1 a - i \frac{k_1}{k} \sin k_1 a)} \frac{k_1 \sin a k_1 - k_0 \cos a k_1}{k_1^2 - k_0^2}
\end{aligned}$$

La probabilità di transizione per unità di tempo è pertanto

$$\begin{aligned}
\frac{d P_{i \rightarrow E}(t)}{dt} &= \frac{2 k_0 v_0^2 (k_1 \sin a k_1 - k_0 \cos a k_1)^2 \cos^2 k_2 a}{\hbar \rho(E_f) (1 + a k_0) (\cos^2 k_1 a + \frac{k_1^2}{k^2} \sin^2 k_1 a) (k_1^2 - k_2^2)^2} = \\
&= \frac{2 v_0^2 m k_0 \cos^2 k_2 a (k_1 \sin a k_1 - k_0 \cos a k_1)^2 k}{\hbar^3 (1 + a k_0) (k^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \sin^2 k_1 a) (k^2 + k_0^2)^2} \quad (2.221)
\end{aligned}$$

Vogliamo studiare il comportamento della formula (2.221) in varie situazioni. È utile introdurre delle variabili adimensionali. La scala di energia naturale del problema è $E_a \equiv \frac{\hbar^2}{2ma^2}$, la scala dei tempi è corrispondentemente $\tau_a \equiv \hbar/E_a$ mentre la scala naturale dei numeri d'onda è a . Introduciamo quindi le variabili adimensionali:

$$\hat{v}_0 = \frac{v_0}{E_a} \quad \hat{k} = a k \quad \hat{k}_{0,1,2} = a k_{0,1,2} \quad \frac{d \hat{P}_{i \rightarrow E}(t)}{dt} = \tau_a \frac{d P_{i \rightarrow E}(t)}{dt} \quad (2.222)$$

La funzione adimensionale che corrisponde pertanto alla probabilità per unità di tempo di transizione è :

$$\frac{1}{\hat{v}_0^2} \frac{d \hat{P}_{i \rightarrow E}(t)}{dt} = \frac{\hat{k}_0 \hat{k}_2^2 (\hat{k}_1 \sin \hat{k}_1 - \hat{k}_0 \cos \hat{k}_1)^2 \hat{k}}{\hat{V}_0 (1 + \hat{k}_0) (\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1) (\hat{k}^2 + \hat{k}_0^2)^2} \quad (2.223)$$

\hat{k}_0 e \hat{k}_2 sono funzioni del parametro adimensionale

$$\hat{V}_0 \equiv \frac{2 m V_0 a^2}{\hbar^2} \quad (2.224)$$

che misura la profondità della buca di potenziale. \hat{k}_1 è una funzione sia di \hat{k} che di \hat{V}_0

$$\hat{k}_1 = \sqrt{\hat{k}^2 + \hat{V}_0} \quad (2.225)$$

Le funzioni $\hat{k}_0(\hat{V}_0)$ e $\hat{k}_2(\hat{V}_0)$ non sono esprimibili in termini di funzioni elementari, ma hanno un'espressione semplice nei due limiti opposti;
 (i) $\hat{V}_0 \ll 1$ (buca poco profonda). In questo limite $\hat{k}_2 \ll 1$ pertanto

$$\hat{k}_0 = \hat{k}_2 \tan \hat{k}_2 \approx \hat{k}_2^2 \quad (2.226)$$

e

$$\hat{V}_0 = \hat{k}_0^2 + \hat{k}_2^2 \approx \hat{k}_0^2 + \hat{k}_0 \quad (2.227)$$

da cui

$$\hat{k}_0 \approx \frac{\sqrt{1 + 4\hat{V}_0} - 1}{2} \approx \hat{V}_0 \quad (2.228)$$

e

$$\hat{k}_2 \approx \hat{V}_0^{\frac{1}{2}} \quad (2.229)$$

Dunque in questo limite la (2.223) diventa

$$\frac{1}{\hat{v}_0^2} \frac{d\hat{P}_{i \rightarrow E}(t)}{dt} = \frac{\hat{V}_0 \hat{k} (\hat{k}_1 \sin \hat{k}_1 - \hat{V}_0 \cos \hat{k}_1)^2}{(\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1)(\hat{k}^2 + \hat{V}_0^2)} \quad (2.230)$$

(ii) $\hat{V}_0 \gg 1$ (buca molto profonda). In questo caso

$$\begin{aligned} \hat{k}_2 &\approx \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{2\hat{V}_0^{1/2}} \\ \hat{k}_0 &= \sqrt{\hat{V}_0 - \hat{k}_2^2} \approx \sqrt{\hat{V}_0 - \frac{\pi^2}{4}} \approx \hat{V}_0^{\frac{1}{2}} \left(1 - \frac{\pi^2}{8\hat{V}_0}\right) \end{aligned} \quad (2.231)$$

Dunque la (2.223) diventa

$$\frac{1}{\hat{v}_0^2} \frac{d\hat{P}_{i \rightarrow E}(t)}{dt} = \frac{\pi^2 \hat{k} (\hat{k}_1 \sin \hat{k}_1 - \hat{V}_0^{1/2} \cos \hat{k}_1)^2}{4\hat{V}_0 (\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1)(\hat{k}^2 + \hat{V}_0)^2} \quad (2.232)$$

Notiamo che la formula per la probabilità di transizione diverge quando il denominatore

$$\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1 = 0 \rightarrow \hat{k} = 0 \quad \text{e} \quad \hat{k}_1 = \hat{V}_0^{1/2} = n\pi \quad (2.233)$$

con n intero positivo. La ragione di questa divergenza è che i valori del potenziale

$$\hat{V}_0^{(n)} = (n\pi)^2 \quad (2.234)$$

sono precisamente quelli per i quali compaiono nuovi stati legati con $k_0 = 0$ cioè con energia di legame nulla. Per $k = 0$ la frequenza della perturbazione è tale da indurre dunque una transizione nello spettro discreto.

Se \hat{V}_0 non è esattamente uguale ad uno dei valori risonanti (2.234) ma è vicino ad uno di questi valori la ampiezza di transizione è notevolmente amplificata per valori piccoli di k . Infatti sia

$$\hat{V}_0 = (n\pi - \epsilon)^2 \quad (2.235)$$

con $\epsilon \ll 1$ piccolo. Allora il fattore che appare nella formula per la probabilità di transizione

$$\frac{\hat{k}}{\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1} \quad (2.236)$$

ha un massimo pronunciato per $\hat{k} \approx n\pi\epsilon$. Infatti per $\hat{k} \ll 1$

$$\frac{\hat{k}}{\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1} \approx \frac{\hat{k}}{\hat{k}^2 + (n\pi\epsilon)^2} \quad (2.237)$$

e questa funzione ha un massimo per $\hat{k} \approx n\pi\epsilon$. Per questo valore di k la funzione ha il valore grande

$$\left. \frac{\hat{k}}{\hat{k}^2 + \hat{V}_0 \sin^2 \hat{k}_1} \right|_{\hat{k} \approx n\pi\epsilon} \approx \frac{1}{2n\pi\epsilon} \quad (2.238)$$

2.5.3 Buca di potenziale infinitamente sottile e profonda

Un limite particolare della buca discussa nella sottosezione precedente è quello in cui

$$V_0 \rightarrow \infty \quad a \rightarrow 0 \quad \text{con} \quad V_0 a = \lambda > 0 \quad (2.239)$$

con λ costante. Questo limite corrisponde a quello di un potenziale dato dalla delta di Dirac

$$V(x) = -2\lambda\delta(x) \quad (2.240)$$

In questo caso la derivata prima della funzione d'onda è discontinua in $x = 0$ ed è data da

$$\Delta \psi'(x) \Big|_{x=0} \equiv \psi'(0^+) - \psi'(0^-) = -\frac{4\lambda m}{\hbar^2} \psi(0) \quad (2.241)$$

Pertanto la funzione d'onda dello stato legato diventa

$$\psi_0(x) = \alpha e^{-k_0|x|} \quad (2.242)$$

e

$$2k_0 = \frac{4\lambda m}{\hbar^2} \rightarrow k_0 = \frac{2\lambda m}{\hbar^2} \quad (2.243)$$

Questa relazione è in accordo col limite della (2.214) per $\hat{V}_0 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2} = \frac{2ma\lambda}{\hbar^2} \rightarrow 0$: in questo limite infatti, abbiamo, dalla (2.228)

$$k_0 = \hat{k}_0/a = \hat{V}_0/a = \frac{2maV_0}{\hbar^2} = \frac{2\lambda m}{\hbar^2} \quad (2.244)$$

Normalizzando all'unità la funzione d'onda dello stato fondamentale otteniamo

$$|\alpha|^2 = k_0 \quad (2.245)$$

in accordo con le (2.220).

Le autofunzioni pari dello spettro continuo sono

$$\begin{aligned} \psi_E^{(+)}(x) &= A_E^{(+)}(e^{ikx} + e^{-2i\theta_E} e^{-ikx}) \quad \text{per } x > 0 \\ \psi_E^{(+)}(x) &= A_E^{(+)}(e^{-ikx} + e^{-2i\theta_E} e^{ikx}) \quad \text{per } x < 0 \end{aligned} \quad (2.246)$$

e la condizione di discontinuità della derivata prima diventa

$$\frac{2ik(1 - e^{-2i\theta_E})}{(1 + e^{-2i\theta_E})} = -\frac{4\lambda m}{\hbar^2} \quad (2.247)$$

cioè

$$ik \frac{(e^{i\theta_E} - e^{-i\theta_E})}{(e^{i\theta_E} + e^{-i\theta_E})} = -2k \tan \theta_E = -\frac{2\lambda m}{\hbar^2} \quad (2.248)$$

o equivalentemente

$$\tan \theta_E = \frac{k_0}{k} \quad (2.249)$$

Anche questa relazione si può ottenere dai risultati della sottosezione precedente prendendo il limite $k_1 \rightarrow \sqrt{\frac{k_0}{a}}$ con $a \rightarrow$ nella (2.206).

L'elemento di matrice che interviene nella probabilità di transizione è pertanto

$$(\psi_E^{(+)}, v(x) \psi_0) = \delta\lambda \psi_E^{*(+)}(0) \psi_0(0) = A_E^{*(+)} \delta\lambda \sqrt{k_0}(1 + e^{2i\theta_E}) \quad (2.250)$$

dove abbiamo introdotto la perturbazione dipendente dal tempo

$$v(x, t) = v(x) \cos \omega t = -2 \delta \lambda \delta(x) \cos \omega t \quad (2.251)$$

La probabilità di transizione per unità di tempo diventa dunque

$$\begin{aligned} \frac{d P_{i \rightarrow E}(t)}{d t} &= \frac{2 \pi}{\hbar} \frac{4 m \delta \lambda^2 k_0 \cos^2 \theta_E}{4 \pi \hbar^2 k} \\ &= \frac{2 m \delta \lambda^2 k_0 k}{\hbar^3 (k^2 + k_0^2)} \end{aligned} \quad (2.252)$$

Notiamo che questa formula è in accordo con la formula più generale (2.221). Infatti, posto $k_\lambda \equiv \frac{2m\lambda}{\hbar^2}$, nel limite (2.239), abbiamo

$$k_1^2 = k^2 + \frac{k_\lambda}{a} \quad k_0 = k_\lambda - \frac{2}{3} a k_\lambda^2 + \dots \quad k_2^2 = \frac{k_\lambda}{a} - k_0^2 \quad (2.253)$$

Pertanto

$$\frac{\cos k_2 a (k_1 \sin a k_1 - k_0 \cos a k_1)}{k_0^2 + k^2} \rightarrow \frac{a k_1^2 - \frac{a}{3!} k_\lambda^2 - k_\lambda + \frac{2a}{3} k_\lambda^2 + \frac{a}{2} k_\lambda^2}{k_\lambda^2 + k^2} \rightarrow a \quad (2.254)$$

La (2.221) si riduce dunque nel limite (2.239) alla seguente espressione

$$\frac{d P_{i \rightarrow E}(t)}{d t} \rightarrow \frac{2 a^2 v_0^2 m k_\lambda k}{\hbar^3 (k^2 + k_\lambda k_1^2 a)} \rightarrow \frac{2 \delta \lambda^2 m k_\lambda k}{\hbar^3 (k^2 + k_\lambda^2)} \quad (2.255)$$

che coincide con la (2.252).

2.5.4 La densità degli stati dello spettro continuo

Consideriamo le autofunzioni dell' energia dello spettro continuo, pari, relative problema precedente

$$\begin{aligned} \psi_k^{(+)}(x) &= e^{i k x} + \beta_k e^{-i k x} \quad \text{per } x > 0 \\ \psi_k^{(+)}(x) &= e^{-i k x} + \beta_k e^{i k x} \quad \text{per } x < 0 \end{aligned}$$

dove abbiamo scelto $A_E^{(+)} = 1$ e posto

$$\begin{aligned} \beta_k &\equiv e^{-2i\theta(k)} = \frac{k - i k_0}{k + i k_0} \quad k > 0 \\ E &\equiv \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \end{aligned}$$

La condizione di ortogonalità per queste autofunzioni definisce la funzione $\rho(E)$:

$$\begin{aligned} \frac{m}{\hbar^2 k} \rho(E) \delta(k - k') &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_k^{(+)*})^*(x) \psi_{k'}^{(+)}(x) = \\ &= 2 \int_0^{\infty} dx (e^{i(k'-k)x} + \beta_{k'} \beta_k^* e^{-i(k'-k)x} + \\ &\quad + \beta_k' e^{-i(k'+k)x} + \beta_k^* e^{i(k'+k)x}) \end{aligned} \quad (2.256)$$

Osserviamo che se poniamo $\beta_k = 1$ otteniamo le funzioni d'onda del problema libero, per le quali evidentemente

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx (\psi_k^{(+)*})^*(x) \psi_{k'}^{(+)}(x) &= 2 \int_0^{\infty} dx (e^{i(k'-k)x} + e^{-i(k'-k)x} + \\ &\quad + e^{-i(k'+k)x} + e^{i(k'+k)x}) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx (e^{i(k'-k)x} + e^{-i(k'+k)x}) = 4\pi \delta(k - k') + 4\pi \delta(k + k') = \\ &= 4\pi \delta(k - k') \end{aligned} \quad (2.257)$$

in quanto $k > 0$ e $k' > 0$.

Sottraendo la (2.257) dalla (2.256) otteniamo

$$\begin{aligned} \left[\frac{m}{\hbar^2 k} \rho(E) - 4\pi \right] \delta(k - k') &= 2 \int_0^{\infty} dx [(\beta_{k'} \beta_k^* - 1) e^{-i(k'-k)x} + \\ &\quad + (\beta_{k'} - 1) e^{-i(k'+k)x} + (\beta_k^* - 1) e^{i(k'+k)x}] \end{aligned} \quad (2.258)$$

L'osservazione centrale è la seguente: l'eq. (2.258) stabilisce che la distribuzione definita dall'integrale nel secondo membro è proporzionale ad una delta di Dirac $\delta(k - k')$ moltiplicata per un fattore — il termine tra parentesi quadre nel primo membro dell'equazione — che è quello che vogliamo determinare.

D'altra parte l'integrale nel secondo membro, per $k = k'$ non ha la divergenza lineare che è necessaria a produrre una funzione delta di Dirac: infatti il termine nell'integrando proporzionale a $e^{-i(k'-k)x}$ che produrrebbe tale divergenza è moltiplicato per un fattore che si annulla per $k = k'$. Ne consegue che l'integrale nel secondo membro non può dare una delta di Dirac $\delta(k - k')$. L'unica possibilità che rende consistente l'equazione è quindi che il fattore

che moltiplica la $\delta(k - k')$ nel primo membro si annulli identicamente, ovvero che

$$\frac{m}{\hbar^2 k} \rho(E) = 4 \pi \quad (2.259)$$

La densità degli autostati dell'energia vale quindi

$$\frac{1}{\rho(E)} = \frac{m}{4 \pi \hbar^2 k} \quad (2.260)$$

Possiamo verificare con un calcolo esplicito questo argomento generale. Definiamo la funzione di k e k'

$$f(k, k', \mu) \equiv \int_0^\infty dx e^{-\mu x} [(\beta_{k'} \beta_k^* - 1) e^{-i(k' - k)x} + (\beta_{k'} - 1) e^{-i(k' + k)x} + (\beta_k^* - 1) e^{i(k' + k)x}] \quad (2.261)$$

con $\mu > 0$. Per $\mu \rightarrow 0^+$ la $f(k, k', \mu)$ tende, nel senso delle distribuzioni, al secondo membro della (2.258). Eseguendo gli integrali nella (2.261) otteniamo

$$f(k, k', \mu) = \frac{\beta_{k'} \beta_k^* - 1}{\mu + i(k' - k)} + \frac{\beta_{k'} - 1}{\mu + i(k' + k)} + \frac{\beta_k^* - 1}{\mu - i(k' + k)}$$

Sostituendo la (2.256) abbiamo

$$\begin{aligned} f(k, k', \mu) &= \frac{\frac{k' - i k_0}{k' + i k_0} \frac{k + i k_0}{k - i k_0} - 1}{\mu + i(k' - k)} + \frac{\frac{k' - i k_0}{k' + i k_0} - 1}{\mu + i(k' + k)} + \frac{\frac{k + i k_0}{k - i k_0} - 1}{\mu - i(k' + k)} = \\ &= \frac{(k' - i k_0)(k + i k_0) - (k' + i k_0)(k - i k_0)}{(k' + i k_0)(k - i k_0)(\mu + i(k' - k))} + \\ &+ \frac{(k' - i k_0) - (k' + i k_0)}{(k' + i k_0)(\mu + i(k' + k))} + \frac{(k + i k_0) - (k - i k_0)}{(k - i k_0)(\mu - i(k' + k))} = \\ &= \frac{2 i k_0 (k' - k)}{(k' + i k_0)(k - i k_0)(\mu + i(k' - k))} + \\ &- \frac{2 i k_0}{(k' + i k_0)(\mu + i(k' + k))} + \frac{2 i k_0}{(k - i k_0)(\mu - i(k' + k))} = \\ &= \frac{2 i k_0 (k' - k)}{(k' + i k_0)(k - i k_0)(\mu + i(k' - k))} + \\ &- 2 i k_0 \frac{(k - i k_0)(\mu - i(k' + k)) - (k' + i k_0)(\mu + i(k' + k))}{(k' + i k_0)(\mu + i(k' + k))(k - i k_0)(\mu - i(k' + k))} = \end{aligned}$$

$$= \frac{2 i k_0 (k' - k)}{(k' + i k_0) (k - i k_0) (\mu + i (k' - k))} +$$

$$- 2 i k_0 \frac{(k - k' - 2 i k_0) \mu - i (k' + k) (k + k')}{(k' + i k_0) (\mu + i (k' + k)) (k - i k_0) (\mu - i (k' + k))}$$

Il limite di quest'espressione per $\mu \rightarrow 0^+$ è uniforme e vale

$$\lim_{\mu \rightarrow 0^+} f(k, k', \mu) = \frac{2 k_0}{(k' + i k_0) (k - i k_0)} - \frac{2 k_0}{(k' + i k_0) (k - i k_0)} = 0$$

Dunque l'integrale al secondo membro della (2.258) è la distribuzione nulla e la densità degli stati è data dalla (2.259).

L'argomento esposto si estende banalmente al caso più generale in cui le funzioni d'onda dello spettro continuo hanno il comportamento (2.256) solo asintoticamente, per $|x|$ sufficientemente grandi, ovvero nell'ipotesi in cui esiste un numero $L > 0$ per cui

$$\psi_k^{(+)}(x) = e^{i k x} + \beta_k e^{-i k x} \quad \text{per } x > L$$

$$\psi_k^{(+)}(x) = e^{-i k x} + \beta_k e^{i k x} \quad \text{per } x < -L$$

Questo è il caso di una buca di potenziale a supporto compatto o con potenziale che decresce in maniera sufficientemente rapida per $|x| \rightarrow \infty$. Ripercorrendo l'analisi precedente otteniamo che la (2.258) si generalizza in questa situazione alla seguente relazione

$$\left[\frac{m}{\hbar^2 k} \rho(E) - 4 \pi \right] \delta(k - k') = 2 \int_L^\infty dx [(\beta_{k'} \beta_k^* - 1) e^{-i (k' - k) x} +$$

$$+(\beta_{k'} - 1) e^{-i (k' + k) x} + (\beta_k^* - 1) e^{i (k' + k) x}] + R(k, k') =$$

$$= 2 \int_0^\infty dx [(\beta_{k'} \beta_k^* - 1) e^{-i (k' - k) x} +$$

$$+(\beta_{k'} - 1) e^{-i (k' + k) x} + (\beta_k^* - 1) e^{i (k' + k) x}] + \tilde{R}(k, k')$$

dove $R(k, k')$ e $\tilde{R}(k, k')$ sono funzioni completamente regolari di k e k' . Il secondo membro di questa equazione non presenta la singolarità per $k = k'$ richiesta per produrre la delta $\delta(k - k')$ e dunque si deve annullare nel senso delle distribuzioni. Anche in questo caso, pertanto, vale la (2.259).

2.5.5 Buca di potenziale tridimensionale

Consideriamo una particella in una buca tri-dimensionale :

$$V(r) = -V_0 \quad \text{per } r \leq a \quad \text{e} \quad V(r) = 0 \quad \text{per } r \geq a \quad (2.262)$$

Supponiamo che la particella si trovi nello stato $1p$, cioè nello stato di energia più bassa con momento angolare $l = 1$. Al tempo $t = 0$ il sistema è soggetto alla perturbazione dipendente dal tempo

$$V(t) = -\frac{e\mathcal{E}_\omega z}{2} \left(e^{i\omega t} + e^{-i\omega t} \right) \quad \text{per } t \geq 0 \quad (2.263)$$

Vogliamo calcolare la probabilità di transizione per unità di tempo in uno stato del continuo con momento angolare $l = 0$.

(a) Stato legato con $l = 1$

Sia $\chi_{E_0,1}(r) = r R_{E_0,1}$ la funzione d'onda radiale di energia $-E_0$ con $E_0 > 0$ e $l = 1$. Introduciamo i parametri adimensionali

$$\begin{aligned} X &\equiv \sqrt{\frac{2ma^2(V_0 - E_0)}{\hbar^2}} \\ Y &\equiv \sqrt{\frac{2ma^2E_0}{\hbar^2}} \end{aligned} \quad (2.264)$$

e corrispondentemente

$$x \equiv X \frac{r}{a} \quad y \equiv Y \frac{r}{a} \quad (2.265)$$

Allora

$$\chi_{E_0,1}(r) = \begin{cases} N_1 j_1(x) = N_1 \left(\cos x - \frac{\sin x}{x} \right) & \text{per } r \leq a \\ N_2 h_1(y) = N_2 e^{-y} \frac{1+y}{y} & \text{per } r \geq a \end{cases} \quad (2.266)$$

dove $j_1(x)$ e $h_1(y)$ sono legate alle funzioni di Bessel sferiche

$$\begin{aligned} j_l(x) &= x^{l+1} \left(\frac{d}{x dx} \right)^l \frac{\sin x}{x} \\ n_l(x) &= x^{l+1} \left(\frac{d}{x dx} \right)^l \frac{\cos x}{x} \\ h_l(x) &= x^{l+1} \left(\frac{d}{x dx} \right)^l \frac{1 - e^{-x}}{x} \end{aligned} \quad (2.267)$$

L'equazione che esprime la continuità della derivata logaritmica a $r = a$ determina gli autovalori dell'energia:

$$\frac{X \cot X + (X^2 - 1)}{1 - X \cot X} = -\frac{1 + Y + Y^2}{1 + Y} \quad (2.268)$$

con

$$X^2 + Y^2 = \frac{2 m a^2 V_0}{\hbar^2} \equiv v \quad (2.269)$$

La (2.268) dà

$$(1 - X \cot X) Y^2 + X^2 Y + X^2 = 0 \quad (2.270)$$

Sostituendo in questa equazione la (2.269), otteniamo che gli autovalori con $l = 1$ sono dati dall'intersezione delle curve

$$\begin{aligned} Y &= \frac{X \cot X - 1}{X^2} v - X \cot X \\ Y &= \sqrt{v - X^2} \end{aligned} \quad (2.271)$$

con le condizioni

$$0 \leq X \leq \sqrt{v} \quad 0 \leq Y \leq \sqrt{v} \quad (2.272)$$

Le due curve ammettono intersezioni nella regione (2.272) per

$$v \geq \pi^2 \quad (2.273)$$

Le curve hanno n intersezioni (X_i, Y_i) con $i = 1, \dots, n$ e

$$i \pi \leq X_i \leq (i + 1) \pi \quad (2.274)$$

dove n è determinato dalla condizione

$$(n \pi)^2 \leq v \leq (n + 1)^2 \pi^2 \quad (2.275)$$

Determiniamo X_1 corrispondente all'autovalore più basso nel limite di buca molto profonda

$$v \gg 1 \quad (2.276)$$

In questo caso $X_1 \ll Y_1$, pertanto

$$Y_1 \approx \sqrt{v} - \frac{X_1^2}{2\sqrt{v}} \quad (2.277)$$

Dunque

$$\sqrt{v} \approx v \frac{X_1 \cot X_1 - 1}{X_1^2} \quad (2.278)$$

cioè

$$X_1 \cot X_1 - 1 \approx \frac{X_1^2}{\sqrt{v}} \quad (2.279)$$

Posto

$$\bar{X} \cot \bar{X} = 1 \quad \pi < \bar{X} < 2\pi \quad (2.280)$$

abbiamo in definitiva

$$X_1 \approx \bar{X} - \frac{\bar{X}}{\sqrt{v}} \quad Y_1 \approx \sqrt{v} - \frac{\bar{X}^2}{2\sqrt{v}} \quad (2.281)$$

Il valore numerico di \bar{X} è

$$\bar{X} \approx 4.49 \quad (2.282)$$

In conclusione per

$$v \gg \bar{X}^2 \approx 20 \quad (2.283)$$

abbiamo

$$V_0 - E_0 \approx \frac{\hbar^2}{2ma^2} 20 \quad (2.284)$$

Calcoliamo ora il rapporto dei fattori di normalizzazione $N_{1,2}$ per lo stato con $n = 1$, nel limite (2.276)

$$\begin{aligned} \frac{N_1}{N_2} &= e^{-Y_1} \frac{Y_1 + 1}{Y_1} \frac{X_1}{\sin X_1} \frac{1}{(X_1 \cot X_1 - 1)} \approx e^{-\sqrt{v}} \frac{\bar{X}}{\sin \bar{X}} \frac{\sqrt{v}}{\bar{X}^2} \approx \\ &\approx e^{-\sqrt{v}} \frac{\sqrt{v}}{\bar{X} \sin \bar{X}} \end{aligned} \quad (2.285)$$

Normalizziamo inoltre la funzione d'onda dello stato legato ad uno. Poiché

$$\begin{aligned} N_1^2 \int_0^a dr j_1(x)^2 &= \frac{aN_1^2}{X_1} \int_0^{X_1} dx \left(\cos^2 x - \frac{2 \cos x \sin x}{x} + \frac{\sin^2 x}{x^2} \right) = \\ &= \frac{aN_1^2}{2X_1} \left(X_1 + \cos X_1 \sin X_1 - \frac{2 \sin^2 X_1}{X_1} \right) \approx \\ &= \frac{aN_1^2}{2} \left(1 + \cos^2 \bar{X} - 2 \cos^2 \bar{X} \right) = \\ &= \frac{aN_1^2 \sin^2 \bar{X}}{2} \end{aligned} \quad (2.286)$$

e

$$\begin{aligned} N_2^2 \int_a^\infty dr h_1(y)^2 &= \frac{aN_2^2}{Y_1} \int_{Y_1}^\infty dy e^{-2y} \frac{1 + 2y + y^2}{y^2} = \\ &= \frac{aN_2^2}{Y_1} e^{-2Y_1} \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{Y_1} \right) \approx \frac{aN_2^2}{2\sqrt{v}} e^{-2\sqrt{v}} \approx \\ &\approx \frac{aN_1^2}{2v^{\frac{3}{2}}} \bar{X}^2 \sin^2 \bar{X} \end{aligned} \quad (2.287)$$

abbiamo

$$1 = \frac{a N_1^2 \sin^2 \bar{X}}{2} + \frac{a N_1^2}{2} v^{-\frac{3}{2}} \bar{X}^2 \sin^2 \bar{X} \approx \frac{a N_1^2 \sin^2 \bar{X}}{2} \quad (2.288)$$

cioè

$$N_1^2 \approx \frac{2}{a \sin^2 \bar{X}} \quad N_2^2 \approx \frac{2 \bar{X}^2}{a v} e^{2\sqrt{v}} \quad (2.289)$$

(b) Stati del continuo con $l = 0$

Sia $\chi_{E,0}(r) = r R_{E,0}$ la funzione d'onda radiale di energia E con $E > 0$ e $l = 0$. Introduciamo i parametri adimensionali

$$\begin{aligned} X' &\equiv \sqrt{\frac{2 m a^2 (V_0 + E)}{\hbar^2}} = \sqrt{v + (Y')^2} \\ Y' &\equiv \sqrt{\frac{2 m a^2 E}{\hbar^2}} = a k \end{aligned} \quad (2.290)$$

e corrispondentemente

$$x' \equiv X' \frac{r}{a} \quad y' \equiv Y' \frac{r}{a} \quad (2.291)$$

Allora

$$\chi_{E,0}(r) = \begin{cases} N_1' j_0(x') = N_1' \sin x' & \text{per } r \leq a \\ \cos \delta_1 j_0(y') + \sin \delta_1 n_0(y') = \sin(y' + \delta_1) & \text{per } r \geq a \end{cases} \quad (2.292)$$

La condizione di continuità della derivata logaritmica dà

$$X' \cot X' = Y' \cot(Y' + \delta_1) \quad (2.293)$$

che è l'equazione che determina δ_1 in funzione di E . L'equazione di continuità della funzione d'onda dà pertanto

$$N_1' = \frac{\sin(Y' + \delta_1)}{\sin X'} \quad (2.294)$$

per cui

$$(N_1')^2 = \frac{(Y')^2}{(Y')^2 \sin^2 X' + (X')^2 \cos^2 X'} \quad (2.295)$$

La normalizzazione degli stati $\chi_{E,0}$

$$(\chi_{E',0}, \chi_{E,0}) = \rho(E) \delta(E - E') \quad (2.296)$$

è determinata dalla condizione

$$\begin{aligned} \langle \chi_{E',0}, \chi_{E,0} \rangle &= \frac{1}{4} \int_0^\infty dr e^{i(k-k')r} + \frac{1}{4} \int_0^\infty dr e^{-i(k-k')r} = \\ &= \frac{1}{4} \int_{-\infty}^\infty dr e^{i(k-k')r} = \frac{\pi}{2} \delta(k-k') = \frac{\hbar^2 k \pi}{2m} \delta(E-E') \end{aligned} \quad (2.297)$$

e dunque

$$\rho(E) = \frac{\hbar^2 k \pi}{2m} \quad (2.298)$$

(c) L'elemento di matrice della perturbazione

$$\langle E, 0, 0 | z | E_0, 1, 0 \rangle = \langle \chi_{E,0}, r \chi_{E_0,1} \rangle \langle Y_{00}, \cos \theta Y_{10} \rangle \quad (2.299)$$

Abbiamo

$$\langle Y_{00}, \cos \theta Y_{10} \rangle = 2\pi \int_{-1}^1 d\cos \theta \frac{\sqrt{3}}{4\pi} \cos^2 \theta = \frac{1}{\sqrt{3}} \quad (2.300)$$

Nel limite $v \gg 1$ all'elemento di matrice $\langle \chi_{E,0}, r \chi_{E_0,1} \rangle$ contribuisce solo la regione con $r \leq a$, in quanto il fattore di normalizzazione N_2 decresce come $1/\sqrt{v}$. Pertanto

$$\begin{aligned} \langle \chi_{E,0}, r \chi_{E_0,1} \rangle &\approx \frac{a^2 N_1 N'_1}{\bar{X}^2} \int_0^{\bar{X}} dx \sin \frac{x X'}{\bar{X}} (x \cos x - \sin x) \approx \\ &\approx a^2 \bar{X}^2 N_1 N'_1 \times \\ &\times \frac{\cos \bar{X} \sin X' (2 - (X')^2 + \bar{X}^2) - 2 \frac{X'}{\bar{X}} \sin \bar{X} \cos X'}{(\bar{X}^2 - (X')^2)^2} \end{aligned} \quad (2.301)$$

dove abbiamo utilizzato la formula

$$\begin{aligned} \int_0^X dx \sin \alpha x (x \cos x - \sin x) &= \frac{1}{(\alpha^2 - 1)^2} \left[((\alpha^2 - 3) \sin X + \right. \\ &\left. - (\alpha^2 - 1) X \cos X) \alpha \cos \alpha X + (2 \cos X - (\alpha^2 - 1) X \sin X) \sin \alpha X \right] \end{aligned}$$

Dunque

$$\begin{aligned} \frac{2\pi \left| \langle E, 0, 0 | V_\omega | E_0, 1, 0 \rangle \right|^2}{\hbar \rho(E)} &= \frac{2m e^2 \mathcal{E}_\omega^2 a^4}{3 \hbar^3} \frac{\bar{X}^2 Y'}{(Y')^2 \sin^2 X' + (X')^2 \cos^2 X'} \times \\ &\times \left[\frac{\sin X' (2 - (X')^2 + \bar{X}^2) - 2 X' \cos X'}{(\bar{X}^2 - (X')^2)^2} \right]^2 \end{aligned} \quad (2.302)$$

Tenendo conto che stiamo considerando il caso di buca profonda

$$X' \geq \sqrt{v} \gg \bar{X} \quad (2.303)$$

otteniamo la formula finale per la probabilità di transizione per unità di tempo dallo stato $1p$ della buca di potenziale molto profonda ad uno stato del continuo con $l = 0$ ed energia E :

$$\begin{aligned} \frac{2\pi \left| \langle E, 0, 0 | V_\omega | E_0, 1, 0 \rangle \right|^2}{\hbar \rho(E)} &\approx \frac{16\pi m \alpha I_\omega a^4}{3\hbar^2} \times \\ &\times \frac{\bar{X}^2 Y'}{(Y')^2 \sin^2 X' + (X')^2 \cos^2 X'} \frac{\sin^2 X'}{(X')^4} \end{aligned} \quad (2.304)$$

dove abbiamo introdotto l'intensità di energia

$$I_\omega = \frac{c \mathcal{E}_\omega^2}{8\pi} \quad (2.305)$$

e la costante di struttura fine $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c}$.

Il limite di bassa energia della particella emessa $ak \rightarrow 0$ corrisponde alla situazione in cui

$$Y' \ll X' \approx \sqrt{v} + \frac{(Y')^2}{2\sqrt{v}} \quad (2.306)$$

In questo caso

$$\frac{2\pi \left| \langle E, 0, 0 | V_\omega | E_0, 1, 0 \rangle \right|^2}{\hbar \rho(E)} \approx \frac{16\pi m \alpha I_\omega^2 a^4 \bar{X}^2}{3\hbar^2} \frac{ak \tan^2 \sqrt{v}}{v^3} \quad (2.307)$$

Il limite di alta energia ($(ak)^2 \gg v$) corrisponde invece alla situazione in cui

$$Y' \approx X' \quad (2.308)$$

In questo caso la formula per la probabilità di transizione per unità di tempo si riduce a

$$\frac{2\pi \left| \langle E, 0, 0 | V_\omega | E_0, 1, 0 \rangle \right|^2}{\hbar \rho(E)} \approx \frac{16\pi m \alpha I_\omega^2 a^4 \bar{X}^2}{3\hbar^2} \frac{\sin^2 ak}{(ak)^5} \quad (2.309)$$

3 Diffusione e matrice S

3.1 Relazione tra matrice S ed ampiezza di diffusione

Gli elementi di matrice S sono definiti da

$$S_{\beta\alpha} \equiv (\psi_{\beta}^{(-)}, \psi_{\alpha}^{(+)}) \quad (3.1)$$

dove $\psi_{\alpha}^{(\pm)}$ sono gli stati “in” e “out”, autostati dell’Hamiltoniana interagente \hat{H} di energia E_{α} , definiti in corrispondenza con gli autostati ϕ_{α} dell’Hamiltoniana libera \hat{H}_0 . L’equazione di Lippmann-Schwinger per gli stati “in/out” è

$$\psi_{\alpha}^{(\pm)} = \phi_{\alpha} + \int d\beta \frac{T_{\beta\alpha}^{(\pm)}}{E_{\alpha} - E_{\beta} \pm i\epsilon} \phi_{\beta} \quad (3.2)$$

dove

$$T_{\beta\alpha}^{(\pm)} \equiv (\phi_{\beta}, V\psi_{\alpha}^{(\pm)}) \quad (3.3)$$

Deriviamo innanzitutto una relazione tra matrice S e matrice T, che vale per stati ϕ_{α} e $\psi_{\alpha}^{(+)}$ normalizzati secondo

$$(\phi_{\alpha}, \phi_{\beta}) = (\psi_{\alpha}^{(pm)}, \psi_{\beta}^{(\pm)}) = \delta(\alpha - \beta) \quad (3.4)$$

Consideriamo l’evoluzione temporale di un pacchetto di stati “in”:

$$\Psi^{(+)}(t) = \int d\alpha g(\alpha) e^{-iE_{\alpha}t} \psi_{\alpha}^{(+)} \quad (3.5)$$

dove $g(\alpha)$ è una funzione sufficientemente regolare di α . L’equazione di Lippmann-Schwinger dà

$$\Psi^{(+)}(t) = \Phi(t) + \int d\alpha d\beta g(\alpha) e^{-iE_{\alpha}t} \frac{T_{\beta\alpha}^{(+)}}{E_{\alpha} - E_{\beta} + i\epsilon} \phi_{\beta} \quad (3.6)$$

dove $\Phi(t) \equiv \int d\alpha g(\alpha) e^{-iE_{\alpha}t} \phi_{\alpha}$ è il pacchetto costruito con gli autostati dell’Hamiltoniana libera. Per $t \rightarrow -\infty$ l’integrale

$$\int d\alpha g(\alpha) e^{-iE_{\alpha}t} \frac{T_{\beta\alpha}^{(+)}}{E_{\alpha} - E_{\beta} + i\epsilon} \quad (3.7)$$

può essere calcolato chiudendo il contorno d’integrazione per la variabile E_{α} nel semipiano complesso *superiore* — il contributo dal semicerchio all’infinito è nullo a causa dell’esponenziale $e^{-iE_{\alpha}t}$. L’integrale è dato pertanto dal

residuo dei poli. Ma il polo è per $E_\alpha = E_\beta - i\epsilon$ e si trova nel semipiano inferiore. Quindi per $t \rightarrow -\infty$ l'integrale (3.7) è nullo e questo dimostra la validità dell'equazione di Lippmann-Schwinger: $\Psi^{(+)}(t)$ per tempi grandi negativi evolve come il pacchetto libero $\Phi(t)$. Consideriamo ora l'evoluzione di $\Psi^{(+)}(t)$ per $t \rightarrow +\infty$. In questo caso dobbiamo chiudere il contorno d'integrazione nel semipiano complesso *inferiore*: l'integrale (3.7) è dominato dal residuo a $E_\alpha = E_\beta - i\epsilon$ e diventa

$$-2\pi i e^{-i E_\beta t} \int d\alpha \delta(E_\alpha - E_\beta) g(\alpha) T_{\beta\alpha}^{(+)} \quad (3.8)$$

Dunque, per $t \rightarrow +\infty$ il pacchetto $\Psi^{(+)}(t)$ diventa

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)}(t) &= \Phi(t) - 2\pi i e^{-i E_\beta t} \int d\alpha d\beta \delta(E_\alpha - E_\beta) g(\alpha) T_{\beta\alpha}^{(+)} \phi_\beta \\ &= \int d\beta e^{-i E_\beta t} \phi_\beta \left[g(\beta) - 2\pi i \int d\alpha \delta(E_\alpha - E_\beta) g(\alpha) T_{\beta\alpha}^{(+)} \right] = \\ &= \int d\beta d\alpha e^{-i E_\beta t} \phi_\beta g(\alpha) \left[\delta(\alpha - \beta) - 2\pi i \delta(E_\alpha - E_\beta) T_{\beta\alpha}^{(+)} \right] \quad (3.9) \end{aligned}$$

D'altra parte per definizione di matrice S (e ricordando la scelta (3.4) per la normalizzazione di ψ_α^\pm) abbiamo

$$\psi_\alpha^{(+)} = \int d\beta S_{\beta\alpha} \psi_\beta^{(-)} \quad (3.10)$$

e quindi, per $t \rightarrow +\infty$

$$\begin{aligned} \Psi^{(+)}(t) &= e^{-i H t} \int d\alpha g(\alpha) \int d\beta S_{\beta\alpha} \psi_\beta^{(-)} = \\ &= e^{-i H t} \int d\beta \psi_\beta^{(-)} \int d\alpha g(\alpha) S_{\beta\alpha} \rightarrow \int d\beta e^{-i E_\beta t} \phi_\beta \int d\alpha g(\alpha) S_{\beta\alpha} \end{aligned} \quad (3.11)$$

Confrontando (3.9) con (3.12) giungiamo alla conclusione che

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_\alpha - E_\beta) T_{\beta\alpha}^{(+)} \quad (3.12)$$

Nel caso di una particella in 3 dimensioni che si muove in un potenziale $V(\vec{x})$ l'equazione (3.2) diventa

$$\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int \frac{d\vec{k}'}{\hbar^2 (2\pi)^3} d\vec{x}' e^{i\vec{k}'(\vec{x}-\vec{x}')} \frac{2m V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}')}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon} \quad (3.13)$$

(NOTA: Nel resto della sezione, per conformarci alle convenzioni del Landau, stiamo prendendo le $\psi_{\vec{k}}^{\pm}$ normalizzate come $e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$)

Introduciamo le funzioni di Green $G^{(\pm)}(|\vec{x}|)$ definite da

$$G_k^{(\pm)}(|\vec{x}|) \equiv \int \frac{d\vec{k}'}{(2\pi)^3} \frac{e^{i\vec{k}'\cdot\vec{x}}}{k^2 - k'^2 \pm i\epsilon} = -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} \quad (3.14)$$

L'equazione di Lippmann-Schwinger (3.13) diventa

$$\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}) = \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) + \int d\vec{x}' G_k^{(\pm)}(|\vec{x} - \vec{x}'|) \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}') \quad (3.15)$$

Consideriamo ora l'andamento asintotico della $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x})$ per $|\vec{x}| \rightarrow \infty$. Possiamo allora porre nella (3.15)

$$|\vec{x} - \vec{x}'| \approx |\vec{x}| - \vec{x}' \cdot \hat{x} \quad (3.16)$$

dove $\hat{x} \equiv \vec{x}/|\vec{x}|$. Otteniamo per il comportamento asintotico a grandi $|\vec{x}|$ della funzione d'onda "in/out" l'espressione seguente:

$$\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}) \stackrel{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\approx} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{\pm ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} \int d\vec{x}' e^{-ik\vec{x}'\cdot\hat{x}} \frac{2m}{\hbar^2} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}') \quad (3.17)$$

Ricordiamo che, nella derivazione di questa formula, abbiamo supposto le funzioni d'onda normalizzate secondo la (3.4). Osserviamo però che l'omogeneità dell'equazione garantisce che essa resta valida per una scelta arbitraria della normalizzazione delle funzioni d'onda libere $\phi_{\vec{k}}(\vec{x})$, purché *identica* a quella delle funzioni d'onda $\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x})$:

$$(\phi_{\vec{k}}, \phi_{\vec{k}'}) = (\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}, \psi_{\vec{k}'}^{(\pm)}) = \rho(\vec{k}) \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (3.18)$$

In particolare, l'*ampiezza di diffusione* $f_{\vec{k}}(\hat{x})$ è definita come il coefficiente del termine $\frac{e^{ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|}$ nell'espressione asintotica della funzione d'onda "in" $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x})$, normalizzata come le $\phi_{\vec{k}}(x) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$

$$\psi_{\vec{k}}^{(\pm)}(\vec{x}) \stackrel{|\vec{x}| \rightarrow \infty}{\approx} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{\pm ik|\vec{x}|}}{|\vec{x}|} f_{\vec{k}}(\hat{x}) \quad (3.19)$$

Ovvero:

$$f_{\vec{k}}(\hat{x}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{x}' e^{-ik\vec{x}'\cdot\hat{x}} V(\vec{x}') \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}') \quad (3.20)$$

dove la $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x})$ è normalizzata secondo la

$$(\psi_{\vec{k}}^{(+)}, \psi_{\vec{k}'}^{(+)}) = (2\pi)^3 \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (3.21)$$

L'ampiezza di diffusione ha un significato fisico diretto. Immaginiamo un esperimento di diffusione di particelle entranti con impulso \vec{k} da parte di un potenziale $V(x)$. La grandezza fisica misurata è il numero di particelle per unità di tempo che diffondono ad un angolo θ rispetto alla direzione del fascio entrante. Questa probabilità per unità di tempo è data da

$$\frac{dP}{dt} = R^2 d\Omega j_{out} \quad (3.22)$$

dove R è la distanza del rivelatore di particelle uscenti dal centro di interazione che naturalmente si suppone grande rispetto al raggio dell'interazione. Il flusso è dato da

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m} [\vec{\nabla} \psi^* \psi - \psi^* \vec{\nabla} \psi] \quad (3.23)$$

Dobbiamo utilizzare quest'espressione sostituendo per ψ la parte diffusa della funzione d'onda $\psi^{(+)}$. Fisicamente questo corrisponde al fatto che il fascio entrato si estende in una zona spaziale che è abbastanza grande da poter essere considerato un fascio di momento determinato ma è ben separata dalla zona dove sono collocati i rivelatori. Dunque

$$j_{out} = \frac{\hbar k}{m} \frac{|f_{\vec{k}}(\theta)|^2}{R^2} \quad (3.24)$$

e

$$\frac{dP}{dt} = d\Omega \frac{\hbar k}{m} |f_{\vec{k}}(\theta)|^2 \quad (3.25)$$

La *sezione d'urto* differenziale $d\sigma$ è definita come

$$\frac{dP}{dt} = d\sigma j_{in} = d\sigma \frac{\hbar k}{m} \quad (3.26)$$

In definitiva

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_{\vec{k}}|^2 \quad (3.27)$$

Consideriamo la relazione tra matrice S ed ampiezza di diffusione. L'elemento di matrice in Eq. (3.3) diventa nel caso della diffusione di una particella senza spin in un potenziale

$$T_{\vec{k}'\vec{k}}^{(+)} = (\phi_{\vec{k}'} V \psi_{\vec{k}}^{(+)}) = \int d\vec{x} \phi_{\vec{k}'}(\vec{x}) V(\vec{x}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}) \quad (3.28)$$

dove le funzioni d'onda sono definite attraverso la normalizzazione (3.4)

$$(\phi_{\vec{k}}, \phi_{\vec{k}'}) = (\psi_{\vec{k}}^{(+)}, \psi_{\vec{k}'}^{(+)}) = \delta(\vec{k} - \vec{k}') \quad (3.29)$$

Pertanto, riscrivendo questo elemento di matrice in termini della funzione $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x})$ che soddisfa la (3.21) usata per la definizione di ampiezza di diffusione, otteniamo

$$T_{\vec{k}'\vec{k}}^{(+)} = \int \frac{d\vec{x}}{(2\pi)^3} e^{-i\vec{k}'\cdot\vec{x}} V(\vec{x}) \psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}) \quad (3.30)$$

Confrontando con (3.30) con (3.20) deduciamo

$$f_{\vec{k}}(\hat{x}) = -\frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} T_{\vec{k}'\vec{k}}^{(+)} \quad (3.31)$$

con l'identificazione di \vec{k}' con $k\hat{x}$. In definitiva la relazione tra sezione d'urto e matrice S è

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |T_{\vec{k}'\vec{k}}^{(+)}|^2 \quad (3.32)$$

Deriviamo questa relazione in maniera più generale e leggermente più rigorosa. Consideriamo uno stato iniziale normalizzabile

$$\psi_i = \int d\alpha f_{\alpha_i; \Delta\alpha}(\alpha) \phi_\alpha \quad (3.33)$$

dove $f_{\alpha_i; \Delta\alpha}$ è una funzione che determina il pacchetto centrata sui numeri quantici α_i con larghezza $\Delta\alpha$. Nel caso della particella diffusa da potenziale in 3-dimensioni possiamo prendere per esempio

$$\begin{aligned} \phi_{\vec{k}}(\vec{x}) &= \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \\ f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k}) &= \frac{e^{-\frac{(\vec{k}-\vec{k}_i)^2}{2(\Delta k)^2}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}} (\Delta k)^3} \end{aligned} \quad (3.34)$$

La probabilità che lo stato ψ_i diffonda in uno stato finale i cui numeri quantici β sono compresi in un intervallo I_f di larghezza $\Delta\beta$ intorno al valore β_f è

$$\begin{aligned} dP(i; f, I_f) &= (2\pi)^2 \int_{I_f} d\beta \int d\alpha d\alpha' \delta(E_\beta - E_\alpha) \delta(E_\beta - E_{\alpha'}) \times \\ &\times f_{\alpha_i; \Delta\alpha}(\alpha) f_{\alpha_i; \Delta\alpha}^*(\alpha') T_{\beta\alpha}^{(+)} \bar{T}_{\beta\alpha'}^{(+)} \end{aligned} \quad (3.35)$$

Nel caso di una particella in 3d che diffonde in un potenziale questa formula diventa

$$dP(i; f, I_f) = (2\pi)^2 \int_{I_f} k_f^2 dk_f d\Omega_f d\alpha d\alpha' \frac{m}{\hbar^2 k_f} \delta(k_f - k_\alpha) \times \\ \times \delta(E_\alpha - E_{\alpha'}) f_{\alpha_i; \Delta\alpha}(\alpha) f_{\alpha_i; \Delta\alpha}^*(\alpha') T_{\beta\alpha}^{(+)} \bar{T}_{\beta\alpha'}^{(+)}$$

ovvero

$$\frac{dP(i; f, I_f)}{d\Omega_f} = \frac{(2\pi)^2 m}{\hbar^2} \int_{k \in I_f} d\vec{k} d\vec{k}' k \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}) \times \\ \times f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k}) f_{\vec{k}_i; \Delta k}^*(\vec{k}') T_{\vec{k}_f \vec{k}}^{(+)} \bar{T}_{\vec{k}_f \vec{k}'}^{(+)}$$

Nel limite in cui $\Delta k \rightarrow 0$ le funzioni di pacchetto $f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k})$ tendono (nel senso delle distribuzioni) alle $\delta(\vec{k} - \vec{k}_i)$. Pertanto in questo limite l'integrale nell'equazione sopra diventa

$$\frac{dP(i; f, I_f)}{d\Omega_f} = \frac{(2\pi)^2 m k_i |T_{\vec{k}_f \vec{k}_i}^{(+)}|^2}{\hbar^2} \times \\ \times \int_{k \in I_f} d\vec{k} d\vec{k}' \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}) f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k}) f_{\vec{k}_i; \Delta k}^*(\vec{k}')$$

Consideriamo ora la probabilità dP_0 che il pacchetto entrante

$$\psi_i(\vec{x}; t) = \int d\vec{k} f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k}) \frac{e^{i\vec{x}\cdot\vec{k}}}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{iE_k t}{\hbar}} \quad (3.36)$$

passi, in assenza di interazione, in una regione di area dA centrata intorno a $\vec{x} = 0$ nel corso del processo di diffusione

$$\frac{dP_0}{dA} = \frac{\hbar k_i}{m} \int_{-\infty}^{\infty} dt |\psi_i(\vec{x} = 0; t)|^2 = \\ = \frac{\hbar k_i}{(2\pi)^3 m} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int d\vec{k} d\vec{k}' f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k}) f_{\vec{k}_i; \Delta k}^*(\vec{k}') e^{\frac{i(E_k - E_{k'}) t}{\hbar}} = \\ = \frac{\hbar^2 k_i}{(2\pi)^2 m} \int d\vec{k} d\vec{k}' f_{\vec{k}_i; \Delta k}(\vec{k}) f_{\vec{k}_i; \Delta k}^*(\vec{k}') \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}) \quad (3.37)$$

(questa grandezza è chiamata la luminosità integrata). Confrontando con la (3.36) otteniamo

$$\frac{\frac{dP(i;f,\Delta_f)}{d\Omega_f}}{\frac{dP_0}{dA}} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} |T_{\vec{k}_f \vec{k}_i}^{(+)}|^2 \quad (3.38)$$

Il rapporto nel membro di sinistra di questa equazione definisce la sezione d'urto differenziale. Riotteniamo in questo modo la relazione (3.32) tra ampiezza di diffusione e matrice S .

3.2 Matrice S dalla teoria delle perturbazioni “old-fashioned”

L'equazione di Lippman-Schwinger (3.2) insieme alla relazione (3.12) rappresenta il punto di partenza per il metodo per calcolo perturbativo degli elementi di matrice S che va sotto il nome di “old-fashioned perturbation theory”. In effetti, iterando l'equazione di Lippman-Schwinger otteniamo:

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_\alpha - E_\beta) \left[(\phi_\beta, V \phi_\alpha) + \right. \\ &\quad \left. + \int d\gamma \frac{(\phi_\beta, V \phi_\gamma) (\phi_\gamma, V \psi_\alpha^{(+)})}{E_\alpha - E_\gamma + i\epsilon} \right] = \\ &= \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_\alpha - E_\beta) \left[(\phi_\beta, V \phi_\alpha) + \right. \\ &\quad \left. + \int d\gamma \frac{(\phi_\beta, V \phi_\gamma) (\phi_\gamma, V \phi_\alpha)}{E_\alpha - E_\gamma + i\epsilon} + \dots \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

3.3 Matrice S dalla teoria delle perturbazioni “covariante”

Possiamo partire dall'espressione

$$S_{\beta\alpha} = \lim_{\substack{t \rightarrow +\infty \\ t_0 \rightarrow -\infty}} (\phi_\beta, e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0} \phi_\alpha) \quad (3.40)$$

Introducendo l'operatore di evoluzione temporale

$$U(t, t_0) \equiv e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t_0} \quad (3.41)$$

procediamo secondo l'idea della teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo:

$$i \hbar \frac{dU(t, t_0)}{dt} = V^{(int)}(t) U(t, t_0) \quad (3.42)$$

dove

$$V^{(int)}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} V e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0 t} \quad (3.43)$$

Come nel caso delle perturbazioni dipendenti dal tempo otteniamo la serie perturbativa per l'operatore evoluzione temporale:

$$U(t, t_0) = 1 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 V^{(int)}(t_1) + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 V^{(int)}(t_1) V^{(int)}(t_2) + \dots \quad (3.44)$$

Nel caso in questione V è indipendente dal tempo e questo rende mal definite le integrazioni intermedie che conducono alle espressioni finali per gli elementi di matrice S . Pertanto introduciamo un potenziale "regolarizzato" che è spento "adiabaticamente" per tempi grandi positivi e negativi:

$$V_\lambda = e^{-\lambda|t|} V \quad (3.45)$$

dove $\lambda > 0$ è un numero reale positivo che verrà fatto tendere a zero alla fine dei calcoli. Sostituendo nella (3.44) otteniamo

$$\begin{aligned} (\phi_\beta, U_\lambda(t, t_0), \phi_\alpha) &= \delta_{\alpha\beta} - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt_1 e^{-\lambda|t_1|} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t_1} (\phi_\beta, V \phi_\alpha) + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\gamma \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 e^{-\lambda(|t_1| + |t_2|)} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\gamma)t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t_2} \times \\ &\times (\phi_\beta, V \phi_\gamma) (\phi_\gamma, V \phi_\alpha) + \dots \end{aligned} \quad (3.46)$$

Pertanto

$$\begin{aligned} S_{\beta\alpha} &= \delta_{\alpha\beta} - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-\lambda|t_1|} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t_1} (\phi_\beta, V \phi_\alpha) + \\ &+ \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int d\gamma \int_{-\infty}^{\infty} dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{-\lambda(|t_1| + |t_2|)} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\beta - E_\gamma)t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)t_2} \times \\ &\times (\phi_\beta, V \phi_\gamma) (\phi_\gamma, V \phi_\alpha) + \dots \end{aligned} \quad (3.47)$$

Valutiamo gli integrali:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt_1 e^{-\lambda|t_1|} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t_1} = \int_{-\infty}^0 dt_1 e^{\lambda t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta)t_1} +$$

$$\begin{aligned}
& + \int_0^\infty dt_1 e^{-\lambda t_1} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta) t_1} = \\
& = \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta) + \lambda} - \frac{1}{\frac{i}{\hbar}(E_\alpha - E_\beta) - \lambda} = \frac{2\lambda}{\frac{(E_\alpha - E_\beta)^2}{\hbar^2} + \lambda^2} \quad (3.48)
\end{aligned}$$

Nel limite $\lambda \rightarrow 0^+$, questa funzione di E_α tende, nel senso delle distribuzioni ad un multiplo della funzione delta di Dirac

$$\frac{2\lambda}{\frac{(E_\alpha - E_\beta)^2}{\hbar^2} + \lambda^2} \rightarrow 2\pi\hbar\delta(E_\alpha - E_\beta) \quad (3.49)$$

Otteniamo dunque per la matrice S al primo ordine perturbativo

$$S_{\beta\alpha} = \delta_{\alpha\beta} - 2\pi i \delta(E_\alpha - E_\beta) (\phi_\beta, V \phi_\alpha) + \dots \quad (3.50)$$

in accordo con le formule ottenute nella sezione precedente.

Calcoliamo ora l'integrale in t_2 che interviene nel contributo del secondo ordine

$$\begin{aligned}
\int_{-\infty}^{t_1} dt_2 e^{-\lambda|t_2|} e^{\frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha) t_2} & = \theta(t_1) \left[\frac{e^{(i\omega_{\gamma\alpha} - \lambda) t_1} - 1}{i\omega_{\gamma\alpha} - \lambda} + \frac{1}{i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda} \right] + \\
& + \theta(-t_1) \frac{e^{(i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda) t_1}}{i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda} \quad (3.51)
\end{aligned}$$

dove abbiamo posto $\omega_{\gamma\alpha} \equiv \frac{i}{\hbar}(E_\gamma - E_\alpha)$ etc. La funzione da integrare in t_1 è pertanto

$$\begin{aligned}
\theta(t_1) \left[\frac{e^{(i\omega_{\beta\alpha} - \lambda) t_1} - e^{(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda) t_1}}{i\omega_{\gamma\alpha} - \lambda} + \frac{e^{(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda) t_1}}{i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda} \right] + \\
+ \theta(-t_1) \frac{e^{(i\omega_{\beta\alpha} + \lambda) t_1}}{i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda} \quad (3.52)
\end{aligned}$$

Il risultato dell'integrazione in t_1 produce pertanto il fattore

$$\begin{aligned}
& \frac{-1}{(i\omega_{\beta\alpha} - \lambda)(i\omega_{\gamma\alpha} - \lambda)} + \frac{1}{(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda)(i\omega_{\gamma\alpha} - \lambda)} + \\
& - \frac{1}{(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda)(i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda)} + \frac{1}{(i\omega_{\beta\alpha} + \lambda)(i\omega_{\gamma\alpha} + \lambda)} = \\
& = \frac{1}{(i\omega_{\beta\alpha} - \lambda)(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda)} - \frac{1}{(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda)(i\omega_{\beta\alpha} + \lambda)} = \\
& = -\frac{2\lambda}{(\omega_{\beta\alpha}^2 + \lambda)(i\omega_{\beta\gamma} - \lambda)} \rightarrow -2\pi\hbar\delta(E_\alpha - E_\beta) \frac{1}{i\omega_{\beta\gamma} - \lambda} \quad (3.53)
\end{aligned}$$

In definitiva il termine del secondo ordine dell'elemento di matrice S si scrive:

$$S_{\beta\alpha}^{(2)} = 2\pi \delta(E_\alpha - E_\beta) \int d\gamma \frac{(\phi_\beta, V \phi_\gamma) (\phi_\gamma, V \phi_\alpha)}{i(E_\beta - E_\gamma) - \lambda} \quad (3.54)$$

in accordo con la (3.39) ottenuta dalla equazione di Lippman-Schwinger.

3.4 L'ampiezza di diffusione di Born dalla regola di Fermi

Possiamo derivare l'ampiezza di diffusione in approssimazione di Born dalla regola di Fermi (2.188), applicata nel caso di una perturbazione costante, cioè con $\omega = 0$. La probabilità di transizione per unità di tempo è, secondo la (2.188), data dalla seguente espressione:

$$\frac{dP}{dt} = \frac{2\pi}{\hbar} \delta(E_{k'} - E_k) \left| (\phi_{\vec{k}'}, V \phi_{\vec{k}}) \right|^2 d^3 \vec{k}' \quad (3.55)$$

dove $\phi_{\vec{k}} = \frac{e^{i \vec{k} \cdot \vec{x}}}{(2\pi)^{3/2}}$ sono le funzioni d'onda normalizzate secondo la

$$(\phi_{\vec{k}'}, \phi_{\vec{k}}) = \delta^3(\vec{k}' - \vec{k}) \quad (3.56)$$

NOTA: Nella (3.55) abbiamo scelto le normalizzazioni nel modo seguente: per quanto riguarda gli stati finali, la somma sugli stati finali deve essere l'identità

$$1 = \int d^3 \vec{k}' (\cdot, \phi_{\vec{k}'}) (\phi_{\vec{k}'}, \cdot) \quad (3.57)$$

che deve essere confrontata con l'espressione analoga

$$1 = \int \frac{dE}{\rho(E)} |E\rangle \langle E| \quad (3.58)$$

che compare nella (2.188). Per quanto riguarda gli stati iniziali $\phi_{\vec{k}}$ la scelta è arbitraria, ma avendo normalizzato secondo la (3.56) il flusso incidente sarà $\frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m}$, che è l'espressione che utilizziamo nel seguito.

Pertanto

$$\begin{aligned} \frac{dP}{dt} &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{2m}{\hbar^2} \delta(k'^2 - k^2) \left| (\phi_{\vec{k}'}, V \phi_{\vec{k}}) \right|^2 k'^2 dk' d\Omega = \\ &= \frac{2\pi m k}{\hbar^3} \left| (\phi_{\vec{k}'}, V \phi_{\vec{k}}) \right|^2 d\Omega \end{aligned} \quad (3.59)$$

Dividendo per il flusso $\frac{\hbar k}{(2\pi)^3 m}$ otteniamo la sezione d'urto

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{(2\pi)^4 m^2}{\hbar^4} \left| (\phi_{\vec{k}'}, V \phi_{\vec{k}}) \right|^2 \quad (3.60)$$

che è la formula di Born.

3.5 Il teorema ottico

Il teorema ottico è conseguenza dell'unitarietà della matrice S definita in Eq. (3.1):

$$\int d\gamma S_{\alpha\gamma} S_{\beta\gamma}^* = \delta(\alpha - \beta) \quad (3.61)$$

Riscrivendo questa relazione in termini della matrice $T^{(+)}$ (vedi Eq. (3.12)) otteniamo

$$\int d\gamma \left[\delta_{\alpha\gamma} - 2\pi i \delta(E_\alpha - E_\gamma) T_{\alpha\gamma}^{(+)} \right] \left[\delta_{\beta\gamma} + 2\pi i \delta(E_\beta - E_\gamma) \bar{T}_{\beta\gamma}^{(+)} \right] = \delta(\alpha - \beta) \quad (3.62)$$

o, equivalentemente,

$$\begin{aligned} -2\pi i \int d\gamma \left[\delta(\alpha - \gamma) \delta(E_\beta - E_\gamma) \bar{T}_{\beta\gamma}^{(+)} - \delta(\beta - \gamma) \delta(E_\alpha - E_\gamma) T_{\alpha\gamma}^{(+)} \right] = \\ = 4\pi^2 \int d\gamma \delta(E_\alpha - E_\gamma) \delta(E_\beta - E_\gamma) T_{\alpha\gamma}^{(+)} \bar{T}_{\beta\gamma}^{(+)} \end{aligned} \quad (3.63)$$

Pertanto

$$-i \delta(E_\beta - E_\alpha) \left[\bar{T}_{\beta\alpha}^{(+)} - T_{\alpha\beta}^{(+)} \right] = 2\pi \delta(E_\beta - E_\alpha) \int d\gamma \delta(E_\alpha - E_\gamma) T_{\alpha\gamma}^{(+)} \bar{T}_{\beta\gamma}^{(+)} \quad (3.64)$$

Ponendo in questa relazione $\alpha = \beta$, si ottiene il teorema ottico

$$-2 \text{Im}g T_{\alpha\alpha}^{(+)} = 2\pi \int d\gamma \delta(E_\alpha - E_\gamma) \left| T_{\alpha\gamma}^{(+)} \right|^2 \quad (3.65)$$

Specializziamo questa espressione al caso particolare di una particella non-relativistica in 3 dimensioni. Esprimendo la matrice $T^{(+)}$ in termini dell'ampiezza di diffusione attraverso la (3.31) arriviamo alla relazione seguente:

$$\begin{aligned} 2 \text{Im}g f_{\vec{k}}(\theta = 0) &= \frac{\hbar^2}{2\pi m} \int d\Omega p^2 dp \delta(E_{\vec{k}} - E_{\vec{p}}) \left| f_{\vec{k}}(\vec{k}/k, \vec{p}/p) \right|^2 \\ &= \frac{1}{2\pi p} \int d\Omega p^2 dp \delta(k - p) \left| f_{\vec{k}}(\vec{k}/k, \vec{p}/p) \right|^2 \\ &= \frac{k}{2\pi} \int d\Omega |f_{\vec{k}}(\theta)|^2 = \frac{k}{2\pi} \sigma \end{aligned} \quad (3.66)$$

dove $f_{\vec{k}}(\theta = 0)$ è l'ampiezza di diffusione "in avanti", cioè $f_{\vec{k}}(\vec{k}/k, \vec{k}/k)$; $d\Omega = \sin\theta d\theta d\phi$ è l'elemento di angolo solido, e σ è la sezione d'urto totale. In definitiva il teorema ottico per la particella non-relativistica in un potenziale si scrive

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im}g f_{\vec{k}}(\theta = 0) \quad (3.67)$$

Si noti che questa espressione non è molto utile per il calcolo della sezione d'urto nella teoria delle perturbazioni: infatti, si supponga che lo sviluppo perturbativo dell'ampiezza di diffusione abbia la forma

$$f_{\vec{k}} = f_{\vec{k}}^{(1)} g + f_{\vec{k}}^{(2)} g^2 + \dots \quad (3.68)$$

dove g è la costante di accoppiamento e $f_{\vec{k}}^{(n)}$ è l'ampiezza di diffusione all'ordine n -esimo in teoria delle perturbazioni. Corrispondentemente, la sezione d'urto avrà lo sviluppo

$$\sigma = \int d\Omega |f_{\vec{k}}|^2 = \sigma^{(1)} g^2 + \sigma^{(2)} g^3 + \dots \quad (3.69)$$

dove

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} &= \int d\Omega |f_{\vec{k}}^{(1)}|^2 \\ \sigma^{(2)} &= \int d\Omega (f_{\vec{k}}^{(1)} \bar{f}_{\vec{k}}^{(2)} + \bar{f}_{\vec{k}}^{(1)} f_{\vec{k}}^{(2)}) \\ \sigma^{(3)} &= \dots \end{aligned} \quad (3.70)$$

Volendo utilizzare il teorema ottico (3.67), otteniamo invece per le $\sigma^{(n)}$ le espressioni

$$\begin{aligned} \sigma^{(1)} &= \frac{4\pi}{k} \text{Im}g f_{\vec{k}}^{(2)}(\theta = 0) \\ \sigma^{(2)} &= \frac{4\pi}{k} \text{Im}g f_{\vec{k}}^{(3)}(\theta = 0) \\ \sigma^{(3)} &= \dots \end{aligned} \quad (3.71)$$

In altre parole per ottenere σ ad un dato ordine in teoria delle perturbazioni a partire dal teorema ottico dobbiamo calcolare l'ampiezza di diffusione in avanti ad un ordine più grande in teoria delle perturbazioni rispetto al calcolo che parte dalla definizione della sezione d'urto come ampiezza di diffusione integrata (3.70). Per questa ragione il teorema ottico si rivela utile quando abbiamo un modo non-perturbativo per determinare l'ampiezza di diffusione in avanti (vedi esempi nella sezione successiva).

4 Ampiezze parziali

Poniamoci nel caso in cui il potenziale $V(\vec{x})$ sia invariante per rotazioni. Espandiamo lo stato “in” $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x})$ in una base $|E, l, m\rangle$, di autostati dell’energia (con autovalore $E = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m}$), del momento angolare (con autovalore l) e della proiezione del momento angolare lungo l’asse $\hat{k} \equiv \vec{k}/|\vec{k}|$. Poichè lo stato è invariante per rotazioni lungo l’asse \hat{k} abbiamo

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l R_{kl}(r) P_l(\cos \theta) \quad (4.1)$$

dove $r \equiv |\vec{x}|$, $\cos \theta \equiv \frac{\vec{x} \cdot \hat{k}}{|\vec{x}|}$; $P_l(\cos \theta)$ sono i polinomi di Legendre, legati alle autofunzioni del momento angolare $Y_{l,m}(\theta, \phi)$ dalla relazione

$$Y_{l0} = i^l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_l(\cos \theta) \quad (4.2)$$

$R_{kl}(r)$ sono le soluzioni del problema unidimensionale con potenziale dipendente da l :

$$R_{kl}''(r) + \frac{2}{r} R_{kl}'(r) + \left(k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2mV(r)}{\hbar^2} \right) R_{kl}(r) = 0 \quad (4.3)$$

Il nostro scopo è determinare la relazione tra le a_l e l’ampiezza di diffusione $f_{\vec{k}}(\hat{x})$ che appare nell’espressione asintotica (3.19) per $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x})$. A grandi distanze dal centro dell’interazione, se $V(r)$ decresce in maniera sufficientemente rapida, l’equazione di Schrödinger radiale si riduce a quella libera. Introducendo la variabile adimensionale $y \equiv r k$, l’equazione di Schrödinger radiale *libera* diventa

$$R_{kl}''(y) + \frac{2}{y} R_{kl}'(y) + \left(1 - \frac{l(l+1)}{y^2} \right) R_{kl}(y) = 0 \quad (4.4)$$

La soluzione generale dell’equazione libera (4.4) è

$$R_{kl}(r) = 2 C_1(k, l) y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} + 2 C_2(k, l) y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\cos y}{y} \quad (4.5)$$

dove $C_{1,2}(k, l)$ sono costanti dipendenti da k ed l , che possiamo scegliere reali e con somma di quadrati uguale ad uno:

$$C_1(k, l) \equiv \cos \delta_l(k), \quad C_2(k, l) \equiv \sin \delta_l(k) \Rightarrow \tan \delta_l(k) = \frac{C_2(k, l)}{C_1(k, l)} \quad (4.6)$$

Per grandi r i termini dominanti in (4.5) sono quelli in cui tutte le l derivate agiscono sul seno o sul coseno:

$$\begin{aligned} R_{kl}(r) &\approx \frac{2(-1)^l}{y} \left[\cos \delta_l(k) \sin\left(y - \frac{\pi l}{2}\right) + \sin \delta_l(k) \cos\left(y - \frac{\pi l}{2}\right) \right] = \\ &= R_{kl}(r) \approx \frac{2(-1)^l}{y} \sin\left(y - \frac{\pi l}{2} + \delta_l(k)\right) \end{aligned} \quad (4.7)$$

Dunque per $y = kr \gg 1$ l'espressione asintotica per la funzione d'onda "in" diventa

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}) \approx \frac{1}{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l \left[e^{ikr+i\delta(k)+il\frac{\pi}{2}} - e^{-ikr-i\delta(k)-il\frac{\pi}{2}} \right] P_l(\cos \theta) \quad (4.8)$$

Determiniamo ora lo sviluppo in armoniche sferiche dell'onda piana. Nello sviluppo dell'onda piana compaiono naturalmente solo le soluzioni della equazione di Schrödinger radiale libera (4.4) che sono regolari in $r = 0$:

$$e^{ikr \cos \theta} = \sum_{l=0}^{\infty} a_l^{(0)} P_l(\cos \theta) 2 y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} \quad (4.9)$$

I coefficienti $a_l^{(0)}$ possono essere determinati nel modo seguente: il termine di ordine $(y \cos \theta)^l$ del membro di sinistra della (4.9) è

$$\frac{i^l (y \cos \theta)^l}{l!} \quad (4.10)$$

Il termine corrispondente nel membro di destra è invece:

$$2 a_l^{(0)} \frac{(-1)^l 2^l l! y^l}{(2l+1)!} \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2} (\cos \theta)^l \quad (4.11)$$

Il primo fattore deriva dal fatto che per $y \rightarrow 0$ abbiamo

$$\begin{aligned} y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} &= y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l (-1)^l \frac{y^{2l}}{(2l+1)!} (1 + O(y)) = \\ &= \frac{(-1)^l 2^l l! y^l}{(2l+1)!} (1 + O(y)) \end{aligned} \quad (4.12)$$

Il secondo fattore in (4.11) discende dal fatto che

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^l (\cos^2 \theta - 1)^l = \frac{(2l)!}{2^l (l!)^2} (\cos \theta)^l + \dots \quad (4.13)$$

dove i punti rappresentano termini di ordine più basso in $\cos \theta$. Dal confronto di (4.10) e (4.11) deduciamo che

$$a_l^{(0)} = \frac{(-i)^l (2l+1)}{2} \quad (4.14)$$

Per $y \gg 1$, pertanto, lo sviluppo dell'onda piana in armoniche sferiche (4.9) diventa

$$\begin{aligned} e^{ikr \cos \theta} &\approx \frac{1}{ikr} \sum_{l=0}^{\infty} a_l^{(0)} \left[e^{ikr+l\frac{\pi}{2}} - e^{-ikr-il\frac{\pi}{2}} \right] P_l(\cos \theta) = \\ &= \frac{1}{2iy} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[e^{iy} - e^{-iy-il\pi} \right] \end{aligned} \quad (4.15)$$

Confrontando (4.15) con (4.8) vediamo che affinché $\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}) - e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}}$ non contenga l'onda entrante, dobbiamo porre

$$a_l = e^{i\delta_l(k)} a_l^{(0)} = e^{i\delta_l(k)} \frac{(2l+1)(-i)^l}{2} \quad (4.16)$$

L'espansione asintotica della funzione d'onda "in" diventa allora

$$\psi_{\vec{k}}^{(+)}(\vec{x}) \approx e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} + \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta) \quad (4.17)$$

Otteniamo così lo sviluppo in onde parziali dell'ampiezza di diffusione

$$f_{\vec{k}}(\hat{x}) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)(e^{2i\delta_l(k)} - 1) P_l(\cos \theta) \equiv \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) f_l P_l(\cos \theta) \quad (4.18)$$

dove le

$$f_l \equiv \frac{1}{2ik} (e^{2i\delta_l(k)} - 1) = \frac{1}{k \cot \delta_l(k) - ik} \quad (4.19)$$

sono dette *ampiezze parziali*. Le sezioni d'urto parziali sono definite analogamente da

$$\sigma_l \equiv 4\pi(2l+1)|f_l|^2 = \frac{4\pi}{k^2} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \quad (4.20)$$

di modo che la sezione d'urto totale si scrive

$$\begin{aligned}\sigma &= 2\pi \int_0^{2\pi} |f_{\vec{k}}(\hat{x})|^2 \sin \theta \, d\theta = \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \delta_l(k) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_l\end{aligned}\quad (4.21)$$

dove si è fatto uso dell'ortogonalità dei polinomi di Legendre e della normalizzazione

$$\int d\Omega |P_l(\cos \theta)|^2 = \frac{4\pi}{2l+1} \quad (4.22)$$

4.1 Ampiezze parziali a bassa energia

Vogliamo determinare l'andamento delle fasi $\delta_l(k)$ per $k \rightarrow 0$. Più precisamente, indicato con a il raggio entro cui il potenziale $V(r)$ è (significativamente) diverso da zero, vogliamo studiare il comportamento di $\delta_l(k)$ per k tali che $ka \ll 1$. Per $r \gg a$, cioè per

$$ka \ll y, \quad (4.23)$$

l'equazione di Schrödinger radiale (4.3) si riduce a quella libera, Eq. (4.4): in questa regione $R_{kl}(r)$ è dato dall'espressione (4.24)

$$R_{kl}(r) = 2 \cos \delta_l(k) y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} + 2 \sin \delta_l(k) y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\cos y}{y} \quad (4.24)$$

Se $ak \ll 1$, nella regione di spazio per cui

$$a \ll r \ll 1/k \quad \Leftrightarrow \quad ak \ll y \ll 1 \quad (4.25)$$

l'equazione di Schrödinger radiale (libera) si semplifica ulteriormente, in quanto possiamo trascurare in essa il termine proporzionale a k^2 :

$$R_{kl}''(r) + \frac{2}{r} R_{kl}'(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{kl}(r) = 0 \quad (4.26)$$

In questa regione la soluzione generale ha la forma

$$R_{kl}(r) = C_1(l)r^l + C_2(l)r^{-l-1} \quad (4.27)$$

$C_{1,2}(l)$ dipendono da l ma *non* da k , in quanto in questa regione l'equazione di Schrödinger è indipendente dal momento: questo fatto determina la relazione tra $C_{1,2}(l)$ e $\delta_l(k)$. Poiché

$$\begin{aligned} y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} &= y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l (-1)^l \frac{y^{2l}}{(2l+1)!} (1 + O(y^2)) = \\ &= \frac{(-1)^l y^l}{(2l+1)!!} (1 + O(y^2)) \end{aligned} \quad (4.28)$$

e

$$\begin{aligned} y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \frac{\cos y}{y} &= y^l \left(\frac{1}{y} \frac{d}{dy} \right)^l \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{y^{2n-1}}{(2n)!} = \\ &= (-1)^l y^{-1-l} (2l-1)!! (1 + O(y^2)) \end{aligned} \quad (4.29)$$

la (4.24) diventa per $y \ll 1$

$$R_{kl}(r) = 2 \cos \delta_l(k) \frac{(-1)^l k^l}{(2l+1)!!} r^l + 2 \sin \delta_l(k) (-1)^l k^{-1-l} (2l-1)!! \frac{1}{r^{l+1}} \quad (4.30)$$

Confrontando con (4.27) otteniamo

$$(ak)^{2l+1} \cot \delta_l(k) = A_l + (ak)^2 B_l + O(k^4) \quad (4.31)$$

dove A_l è una costante adimensionale *indipendente* da k

$$A_l = a^{2l+1} \frac{C_1(l)}{C_2(l)} (2l+1)!! (2l-1)!! \quad (4.32)$$

Concludiamo che

$$\delta_l(k) \propto (ak)^{(2l+1)} \quad \text{per } ak \ll 1 \quad (4.33)$$

L'ampiezza di diffusione parziale diventa

$$f_l = \frac{1}{k \cot \delta_l(k) - ik} = \frac{a (ak)^{2l}}{A_l - i (ak)^{2l+1} + O(k^2)} \quad (4.34)$$

Pertanto per $ak \ll 1$, se gli A_l non sono nulli o “anomalmente” piccoli rispetto a $(ak)^2$, l'ampiezza di diffusione è dominata dall'ampiezza parziale con $l = 0$, detta di *onda s*:

$$f_{\vec{k}}(\hat{x}) \approx f_0 = \frac{1}{k \cot \delta_0(k) - ik} \approx \frac{a}{A_0 - i (ak) + O(k^2)} \approx \frac{a}{A_0} \equiv -\alpha \quad (4.35)$$

α , che può essere sia positivo che negativo, è detta *lunghezza di diffusione* e la sezione d'urto in questo limite diventa semplicemente

$$\sigma = 4 \pi \alpha^2 \quad (4.36)$$

Se il parametro adimensionale A_l è nullo o “anomalmente” piccolo — cioè dello stesso ordine di grandezza del parametro piccolo $(a k)^2$ — il termine di ordine successivo nell'espansione (4.31) di $(a k)^{2l+1} \cot \delta_l(k)$ diventa rilevante nell'espansione di bassa energia. Dall'espressione (4.32) per A_l risulta che A_l si annulla quando $C_1(l)$ è nullo, cioè quando la funzione d'onda radiale, nella regione $a < r \ll \frac{1}{k}$ è data da

$$R_{kl}(r) = C_2(l) r^{-l-1} \quad a < r \ll \frac{1}{k} \quad (4.37)$$

Nel limite in cui $k \rightarrow 0$ la regione di validità della (4.37) si estende a tutta la regione $r > a$. Pertanto per $l > 0$ la funzione d'onda radiale (4.37) diventa normalizzabile per $k \rightarrow 0$. Per $l = 0$ la funzione d'onda (4.37) non è normalizzabile per $k = 0$, ma se l'energia $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ è soltanto leggermente negativa lo stato in questione diventa uno stato legato con funzione d'onda

$$\chi_0(r) = r R_{k_0}(r) \sim e^{-k_0 r} \quad (4.38)$$

con

$$k_0 = \sqrt{\frac{-2 m E}{\hbar^2}} \quad (4.39)$$

Vedremo più avanti che il parametro A_0 è legato a k_0 dalla relazione

$$A_0 = -a k_0 \quad (4.40)$$

In definitiva quando A_l si annulla (od è anomalmente piccolo), esiste uno stato legato con energia nulla (o “anomalmente” piccola). Uno stato di questo tipo si chiama uno stato legato di *soglia*. I valori del potenziale per i quali A_l si annulla vengono detti *risonanti*.

Se il coefficiente A_0 si annulla, l'ampiezza di diffusione di bassa energia è ancora controllata dall'onda s , ma, se k non è piccolo rispetto a k_0 dobbiamo sostituire (4.35) con

$$f_0 = \frac{1}{k \cot \delta_0(k) - i k} \approx -\frac{1}{k_0 + i k} \quad (4.41)$$

e la sezione d'urto diventa

$$\sigma = \frac{4\pi}{k_0^2 + k^2} \quad (4.42)$$

Dunque la sezione d'urto è ancora isotropa, ma per $k \sim k_0 \ll 1/a$, cioè nella regione di risonanza,

$$\sigma \sim 1/k_0^2 \gg a^2 \quad (4.43)$$

cioè la sezione d'urto diventa molto più grande del suo valore “naturale” a^2 .

La (4.41) può essere ulteriormente raffinata aggiungendo, nell'espansione in k di $k \cot \delta_0(k)$, oltre al termine di ordine zero k_0 (“anomalmente grande”) anche il termine successivo

$$k \cot \delta_0(k) \approx -k_0 + \frac{1}{2}r_0k^2 \quad (4.44)$$

La (4.44) porta alla cosiddetta approssimazione di *raggio effettivo* per l'ampiezza di diffusione

$$f_0 = \frac{1}{-k_0 + \frac{1}{2}r_0k^2 - ik} \quad (4.45)$$

con $r_0 \sim a$.

4.2 Relazione con la funzione d'onda radiale

Abbiamo visto che nel limite

$$y_a \equiv ak \rightarrow 0 \quad (4.46)$$

vale la seguente espansione

$$y_a^{2l+1} \cot \delta_l = A_l + B_l y_a^2 + O(k^4) \quad (4.47)$$

dove A_l e B_l sono fattori adimensionali che dipendono dal momento angolare l ma non da k . Vogliamo determinare A_l ed B_l in termini della funzione d'onda all'interno della regione dove il potenziale è sensibilmente diverso da zero. Definiamo dunque la derivata logaritmica

$$f_l(r, E) \equiv \frac{r \chi_l'(r, E)}{\chi_l(r, E)} \quad (4.48)$$

dove

$$\chi_l(r, E) \equiv r R_{k,l}(r) \quad (4.49)$$

è la funzione d'onda radiale che soddisfa l'equazione di Schrödinger

$$\chi_l''(r, E) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_{eff}(r)) \chi_l(r, E) = 0 \quad (4.50)$$

con

$$V_{eff}(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} \quad (4.51)$$

La derivata logaritmica (4.48) valutata per $r = a$ ammette il seguente sviluppo di bassa energia

$$f_l(r, E) \Big|_{r=a} \equiv g_l(y_a) = \alpha_l + \beta_l y_a^2 + O(k^4) \quad (4.52)$$

α_l e β_l sono parametri adimensionali che dipendono dal momento angolare l ma non da k .

La funzione d'onda radiale nella regione $r \geq a$ è soluzione dell'equazione di Schrödinger libera:

$$\chi_l(r, E) = r R_{k,l}(r) = \cos \delta_l j_l(y) + \sin \delta_l n_l(y) \quad (4.53)$$

dove $y \equiv kr$ e

$$\begin{aligned} j_l(y) &= y^{l+1} \left(\frac{d}{y dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} = \\ &= (-1)^l \frac{2l!!}{(2l+1)!} y^{l+1} \left(1 - \frac{y^2}{2(2l+3)} + O(y^4) \right) \\ n_l(y) &= y^{l+1} \left(\frac{d}{y dy} \right)^l \frac{\cos y}{y} = \\ &= (-1)^l \frac{(2l-1)!!}{y^l} \left(1 + \frac{y^2}{2(2l-1)} + O(y^4) \right) \end{aligned} \quad (4.54)$$

sono le funzioni di Bessel sferiche. La condizione di raccordo tra la funzione d'onda dentro e fuori la buca di potenziale è

$$g_l(y_a) = \frac{\cot \delta_l(k) a j_l'(y_a) + a n_l'(y_a)}{\cot \delta_l(k) j_l(y_a) + n_l(y_a)} \quad (4.55)$$

da cui

$$\cot \delta_l(k) = \frac{n_l(y_a)}{j_l(y_a)} \frac{g_l(y_a) - \frac{a n_l'(y_a)}{n_l(y_a)}}{\frac{a j_l'(y_a)}{j_l(y_a)} - g_l(y_a)} \quad (4.56)$$

Dalle (4.54) deriviamo

$$\begin{aligned}\frac{n_l(y)}{j_l(y)} &= \frac{(2l-1)!!(2l+1)!!}{y^{2l+1}} \left(1 + \frac{(2l+1)y^2}{(2l-1)(2l+3)} + O(y^4)\right) \\ \frac{y j_l'(y)}{j_l(y)} &= \frac{l+1 - \frac{l+3}{2(2l+3)}y^2 + O(y^4)}{1 - \frac{1}{2(2l+3)}y^2 + O(y^4)} = l+1 - \frac{1}{(2l+3)}y^2 + O(y^4) \\ \frac{y n_l'(y)}{n_l(y)} &= -l + \frac{1}{(2l-1)}y^2 + O(y^4)\end{aligned}$$

Dunque

$$\begin{aligned}\cot \delta_l(k) &= \frac{(2l-1)!!(2l+1)!!}{y^{2l+1}} \left(1 + \frac{(2l+1)y_a^2}{(2l-1)(2l+3)} + O(y_a^4)\right) \times \\ &\times \frac{\alpha_l + l + (\beta_l - \frac{1}{2l-1})y_a^2 + O(y_a^4)}{l+1 - \alpha_l - (\beta_l + \frac{1}{2l+3})y_a^2 + O(y_a^4)}\end{aligned}\quad (4.57)$$

ovvero

$$\begin{aligned}\frac{y_a^{2l+1} \cot \delta_l}{(2l-1)!!(2l+1)!!} &= \frac{l + \alpha_l}{l+1 - \alpha_l} + \left[\frac{\beta_l - \frac{1}{2l-1}}{l+1 - \alpha_l} + \frac{(\beta_l + \frac{1}{2l+3})(\alpha_l + l)}{(l+1 - \alpha_l)^2} \right. \\ &\left. + \frac{(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)} \frac{l + \alpha_l}{l+1 - \alpha_l} \right] y_a^2 + O(y_a^4)\end{aligned}\quad (4.58)$$

od equivalentemente

$$\begin{aligned}\frac{A_l}{(2l-1)!!(2l+1)!!} &= \frac{l + \alpha_l}{l+1 - \alpha_l} \\ \frac{B_l}{(2l-1)!!(2l+1)!!} &= \frac{\beta_l - \frac{1}{2l-1}}{l+1 - \alpha_l} + \\ &+ \frac{\alpha_l + l}{l+1 - \alpha_l} \left[\frac{(\beta_l + \frac{1}{2l+3})}{l+1 - \alpha_l} + \frac{(2l+1)}{(2l-1)(2l+3)} \right]\end{aligned}\quad (4.59)$$

Dalla prima di queste equazioni riotteniamo il risultato ottenuto nella sottosezione precedente: in presenza di uno stato legato di soglia

$$\alpha_l = -l \quad (4.60)$$

il coefficiente “leading” dell’espansione di bassa energia si annulla

$$A_l = 0 \quad (4.61)$$

Quando A_l si annulla o diventa piccolo rispetto a $(ak)^2$, B_l è rilevante nell'espansione di bassa energia. Dalla seconda delle (4.59) deduciamo che il valore di B_l in condizioni "risonanti", cioè per $\alpha_l = -l$ è

$$\frac{B_l|_{\alpha_l=-l}}{(2l-1)!!(2l+1)!!} = \frac{1}{2l+1} \left[\beta_l|_{\alpha_l=-l} - \frac{1}{2l-1} \right] \quad (4.62)$$

4.3 Il caso "risonante"

In questa sottosezione vogliamo esprimere A_l e B_l in vicinanza di una risonanza in termini della funzione d'onda dello stato legato di soglia.

Lo strumento tecnico per questa analisi è un'identità che vale per soluzioni dell'equazione di Schrödinger dipendente da un parametro λ :

$$\chi_\lambda'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E_\lambda - V_\lambda)\chi_\lambda = 0 \quad (4.63)$$

Derivando (4.63) rispetto a λ otteniamo

$$\partial_\lambda \chi_\lambda'' + \frac{2m}{\hbar^2}(\partial_\lambda E_\lambda - \partial_\lambda V_\lambda)\chi_\lambda + \frac{2m}{\hbar^2}(E_\lambda - V_\lambda)\partial_\lambda \chi_\lambda = 0 \quad (4.64)$$

Moltiplicando (4.63) per $\partial_\lambda \chi_\lambda$ e (4.64) per χ_λ e sottraendo a membro a membro ricaviamo

$$\partial_\lambda \chi_\lambda \chi_\lambda'' - \chi_\lambda \partial_\lambda \chi_\lambda'' = \frac{2m}{\hbar^2}(\partial_\lambda E_\lambda - \partial_\lambda V_\lambda)\chi_\lambda^2 = \frac{\partial}{\partial r} \left[\partial_\lambda \chi_\lambda \chi_\lambda' - \chi_\lambda \partial_\lambda \chi_\lambda' \right]$$

ovvero

$$-\chi_\lambda^2(r) \partial_\lambda \frac{\chi_\lambda'(r)}{\chi_\lambda(r)} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_0^r dr' (\partial_\lambda E_\lambda - \partial_\lambda V_\lambda(r')) \chi_\lambda^2(r') \quad (4.65)$$

Utilizzeremo quest'equazione in maniere diverse, a seconda che χ_λ corrisponda ad un livello discreto od ad uno del continuo e/o il parametro λ sia una costante di accoppiamento o l'energia.

a) Spettro continuo

Nel caso dello spettro continuo l'energia E e gli eventuali parametri g da cui dipende il potenziale sono *indipendenti*: per ogni potenziale e per ogni valore di E dello spettro continuo abbiamo una soluzione dell'equazione di Schrödinger che denoteremo con $\chi(r, g, E)$ ³. Nel caso dello spettro continuo

³In questa sottosezione, per alleggerire la notazione, omettiamo nella funzione d'onda radiale l'indice l di momento angolare.

e di una buca di potenziale di raggio finito a l'equazione (4.65) è utilizzata ponendo $r = a$. La derivata logaritmica si scrive nell'espansione di bassa energia

$$f(a, E, g) = \frac{a \chi'(a, g, E)}{\chi(a, g, E)} = \alpha(g) + \beta(g) (ak)^2 + \dots \quad (4.66)$$

Possiamo dunque scegliere:

a.1) $\lambda = E$

In questo caso, dobbiamo porre $\partial_\lambda V_\lambda = 0$ nell'equazione generale (4.65):

$$\partial_E \frac{\chi'(a, g, E)}{\chi(a, g, E)} = -\frac{2m \int_0^a dr' \chi^2(r', g, E)}{\hbar^2 \chi^2(a, g, E)}$$

Prendendo $E = 0$ otteniamo un'equazione per $\beta(g)$

$$\beta(g) = -\frac{\int_0^a dr' \chi^2(r', g, 0)}{a \chi^2(a, g, 0)}$$

Questa relazione, coniugata con l'equazione (4.62), dà una formula per il raggio effettivo alla risonanza in termini della funzione d'onda dello stato legato di soglia. Se $g = g_0$ è il valore della costante di accoppiamento per il quale appare lo stato di soglia

$$\alpha(g_0) = -l \quad A_l(g_0) = 0 \quad (4.67)$$

allora

$$\frac{B_l(g_0)}{(2l-1)!!(2l+1)!!} = -\frac{1}{2l+1} \left[\frac{\int_0^a dr' \chi^2(r', g_0, 0)}{a \chi^2(a, g_0, 0)} + \frac{1}{2l-1} \right] \quad (4.68)$$

Concludiamo che

$$B_l(g_0) < 0 \quad \text{per } l > 1 \quad (4.69)$$

a.2) $\lambda = g$

In questo caso poniamo $\partial_\lambda E_\lambda = 0$ nell'equazione generale (4.65):

$$\partial_g \frac{\chi'(a, g, E)}{\chi(a, g, E)} = \frac{2m \int_0^a dr' \partial_g V_g(r') \chi^2(r', g, E)}{\hbar^2 \chi^2(a, g, E)}$$

Prendiamo in questa equazione $E = 0$ e $g = g_0$, dove g_0 è il valore risonante della costante di accoppiamento g per il quale

$$\alpha(g_0) = -l \quad (4.70)$$

Otteniamo

$$\partial_g \alpha(g)|_{g=g_0} = \frac{2 m a \int_0^a dr' \partial_g V_g(r') \Big|_{g=g_0} \chi^2(r', g_0, 0)}{\hbar^2 \chi^2(a, g_0, 0)} \quad (4.71)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{A_l(g)}{(2l-1)!!(2l+1)!!} &= \frac{\partial_g \alpha(g)|_{g=g_0}}{2l+1} (g - g_0) + O((g - g_0)^2) = \\ &= \frac{2 m a \int_0^a dr' \partial_g V_g(r') \Big|_{g=g_0} \chi^2(r', g_0, 0)}{\hbar^2 (2l+1) \chi^2(a, g_0, 0)} (g - g_0) + \dots \end{aligned} \quad (4.72)$$

b) *Spettro discreto*

L'autovalore dell'energia $E(g)$ di un livello discreto dipende dal parametro g da cui dipende il potenziale $V_g(r)$. Prendiamo $r \rightarrow \infty$ nell'equazione (4.65). Poiché un'autofunzione dello spettro discreto $\chi(r, E(g)) \rightarrow 0$ per $r \rightarrow \infty$, otteniamo

$$\partial_g E(g) = \frac{\int_0^\infty dr' (\partial_g V_g(r')) \chi^2(r', E(g))}{\int_0^\infty dr' \chi^2(r', E(g))} \quad (4.73)$$

Denotiamo con g_0 il valore risonante della costante di accoppiamento

$$E(g_0) = 0 \quad (4.74)$$

Utilizziamo ora le relazioni (4.67), (4.72) e (4.73) per studiare la relazione tra A_l e B_l e le proprietà dello stato legato di soglia in prossimità di una risonanza. Distingueremo il caso con $l = 0$ da quello con $l > 0$.

4.3.1 $l = 0$

Per una funzione d'onda normalizzabile con $l = 0$ possiamo scrivere

$$\begin{aligned} E(g) &= -\frac{\hbar^2 k^2(g)}{2m} \\ \chi(r, E(g)) &\rightarrow e^{-k(g)r} \quad \text{per } r \gg a \end{aligned} \quad (4.75)$$

Poiché

$$k(g_0) = 0 \quad (4.76)$$

lo stato di soglia non è normalizzabile. Consideriamo la norma della funzione d'onda $\chi(r, E(g))$ normalizzata secondo la (4.75) nel limite $g \rightarrow g_0$

$$\int_0^\infty \chi^2(r, E(g)) = \int_0^a \chi^2(r, E(g)) + \frac{e^{-2k(g)a}}{2k(g)} \approx \frac{1}{2k(g)} \quad \text{per } g \approx g_0 \quad (4.77)$$

Dunque, la (4.73) diventa per $g \approx g_0$

$$\partial_g E(g) = -\frac{\hbar^2 k(g) \partial_g k(g)}{m} = 2k(g) \int_0^\infty dr' (\partial_g V_g(r')) \chi^2(r', E(g))$$

ovvero

$$\partial_g k(g)|_{g=g_0} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' \partial_g V_g(r')|_{g=g_0} \chi^2(r', 0) \quad (4.78)$$

Poiché

$$\frac{a \chi'(a, E(g))}{\chi(a, E(g))} = -a k(g) \quad (4.79)$$

deduciamo

$$\begin{aligned} A_0(g) &= \alpha_0(g) + O((g - g_0)^2) = \\ &= -a k(g) + O((g - g_0)^2) = -a \sqrt{\frac{|E(g)|}{E_a}} + O((g - g_0)^2) = \\ &= -a \partial_g k(g)|_{g=g_0} (g - g_0) + O((g - g_0)^2) \end{aligned} \quad (4.80)$$

dove

$$E_a \equiv \frac{\hbar^2}{2m a^2} \quad (4.81)$$

In particolare otteniamo la relazione (4.40) che avevamo anticipato precedentemente.

La stessa relazione tra il valore di A_0 vicino alla risonanza e la funzione d'onda dello stato di soglia è derivabile dalla (4.72) che si applica ad uno stato risonante *virtuale*, cioè con $E > 0$. Infatti, tenendo conto che

$$\chi(a, g, E) \rightarrow e^{-k(g)a} \rightarrow 1 \quad \text{per } g \rightarrow g_0 \quad (4.82)$$

la (4.72) per $l = 0$ dà

$$A_0(g) = \frac{2m a}{\hbar^2} \int_0^a dr' \partial_g V_g(r') \Big|_{g=g_0} \chi^2(r', g_0, 0) (g - g_0) + \dots$$

che coincide con (4.78), in quanto si è supposto $V_g(r)$ nullo per $r > a$. Nel caso virtuale la funzione $k(g)$ che determina $A_0(g)$ vicino alla risonanza assume valori negativi ed $E(g)$ non ha l'interpretazione di un livello discreto reale.

Possiamo raffinare la relazione (4.80) tra $A_0(g)$ ed l'autovalore dello stato legato di soglia $E(g)$ fino al secondo ordine in $g - g_0$. La (4.66) valutata per $E = E(g) < 0$ corrispondente ad uno stato legato di soglia *reale* diventa

$$\begin{aligned} -a k(g) &= \alpha_0(g) + \beta_0(g) \frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3) = \\ &= \alpha_0(g) + \beta_0(g_0) \frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3) \end{aligned} \quad (4.83)$$

in quanto $E(g)$ è del secondo ordine in $g - g_0$. Le relazioni (4.59) danno

$$\begin{aligned} \alpha_0(g) &= \frac{A_0(g)}{1 + A_0(g)} \\ \beta_0(g_0) &= B_0(g_0) - 1 \end{aligned} \quad (4.84)$$

Dunque

$$\begin{aligned} -a k(g) &= \alpha_0(g) + \beta_0(g) \frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3) = \\ &= A_0(g) - A_0^2(g) + B_0(g_0) \frac{E(g)}{E_a} - \frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3) = \\ &= A_0(g) + B_0(g_0) \frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3) \end{aligned} \quad (4.85)$$

poiché $A_0^2 = -\frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3)$. In definitiva la relazione che generalizza la (4.80) fino al secondo ordine in $g - g_0$ è

$$\begin{aligned} A_0(g) &= -\sqrt{\frac{|E(g)|}{E_a}} - B_0(g_0) \frac{E(g)}{E_a} + O((g - g_0)^3) = \\ &= -a k(g) + B_0(g_0) (a k(g))^2 + O((g - g_0)^3) \end{aligned} \quad (4.86)$$

La relazione inversa è allo stesso ordine

$$\frac{E(g)}{E_a} = -A_0(g)^2 \left(1 + 2 A_0(g) B_0(g_0) + O((g - g_0)^2) \right) \quad (4.87)$$

Nel caso virtuale vale una relazione analoga nella quale $ak(g)$ diventa negativo. L'ampiezza di diffusione corrispondente alla (4.86) è quella di raggio effettivo

$$f_0 = \frac{a}{-\sqrt{\frac{|E(g)|}{E_a}} + B_0(g_0) \frac{E-E(g)}{E_a} - i k a} \quad (4.88)$$

e la sezione d'urto

$$\sigma_0 = \frac{4 \pi a^2}{\left(\sqrt{\frac{|E(g)|}{E_a}} - B_0(g_0) \frac{E-E(g)}{E_a}\right)^2 + \frac{E}{E_a}} \quad (4.89)$$

4.3.2 $l \geq 1$

In questo caso lo stato di soglia è normalizzabile:

$$\begin{aligned} E(g) &= \partial_g E(g)|_{g=g_0} (g - g_0) + \dots \\ \chi(r, 0) &= \frac{1}{r^l} \quad r > a \end{aligned} \quad (4.90)$$

La (4.73) diventa

$$\begin{aligned} \partial_g E(g)|_{g=g_0} &= \frac{\int_0^\infty dr' \partial_g V_g(r')|_{g=g_0} \chi^2(r', 0)}{\int_0^\infty dr' \chi^2(r', 0)} = \\ &= \frac{\int_0^a dr' \partial_g V_g(r')|_{g=g_0} \chi^2(r', 0)}{\int_0^\infty dr' \chi^2(r', 0)} \end{aligned} \quad (4.91)$$

Abbiamo

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dr' \chi^2(r', 0) &= \int_0^a dr' \chi^2(r', 0) + \frac{1}{(2l-1) a^{2l-1}} = \\ &= -\frac{\beta(g_0)}{a^{2l-1}} + \frac{1}{(2l-1) a^{2l-1}} = \\ &= -\frac{(2l+1) B_l(g_0)}{a^{2l-1}} \frac{1}{(2l-1)!! (2l+1)!!} \end{aligned} \quad (4.92)$$

dove abbiamo fatto uso della (4.67) e della (4.62). Quindi l'energia dello stato legato risonante si scrive, tenendo conto della (4.72),

$$\begin{aligned} E(g) &= -a^{2l-1} \frac{\int_0^a dr' \partial_g V_g(r')|_{g=g_0} \chi^2(r', 0)}{(2l+1) B_l(g_0)} (2l-1)!! (2l+1)!! (g - g_0) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m a^2} \frac{A_l(g)}{B_l(g_0)} \end{aligned} \quad (4.93)$$

In definitiva per $l > 0$ il coefficiente $A_l(g)$ si annulla in prossimità della risonanza proporzionalmente al valore dell'energia del livello (virtuale o reale) di soglia:

$$A_l(g) = -B_l(g_0) \frac{2 m a^2}{\hbar^2} E(g) = -B_l(g_0) \frac{E(g)}{E_a} \quad (4.94)$$

dove

$$E_a \equiv \frac{\hbar^2}{2 m a^2} \quad (4.95)$$

Ricordiamo che $B_l(g_0) < 0$ per $l > 0$. Pertanto $A_l(g) > 0$ se il livello di soglia è uno stato legato virtuale ($E(g) > 0$) mentre $A_l(g) < 0$ per uno stato legato reale ($E(g) < 0$). Il comportamento qualitativo dell'ampiezza di diffusione in vicinanza della risonanza è diverso nei due casi. L'ampiezza di diffusione parziale per $l > 0$ si scrive

$$\begin{aligned} f_l &= \frac{1}{k \cot \delta_l(k) - i k} = \\ &= \frac{a}{\frac{1}{(a k)^{2l}} (A_l(g) + B_l(g_0) (a k)^2 + O(k^4)) - i a k} = \\ &= \frac{a}{\frac{E_a^{l-1} B_l(g_0)}{E^l} (-E(g) + E + O(E^2)) - i a k} \end{aligned} \quad (4.96)$$

Nel caso virtuale ($A_l > 0$, $B_l < 0$, $E(g) > 0$) appare una risonanza molto netta quando l'energia assume il valore $E = E(g)$. Per questo valore dell'energia la sezione d'urto assume il valore grande

$$\sigma_l = 4 \pi (2l + 1) |f_l|^2 \approx \frac{4 \pi (2l + 1)}{k^2} = \frac{4 \pi (2l + 1) a^2 |B_l(g_0)|}{A(g)} \quad (4.97)$$

La larghezza della risonanza Γ è data dal valore di E

$$E = E(g) + \Gamma \quad (4.98)$$

per il quale il termine $k \cot \delta_l$ è dello stesso ordine di grandezza di k

$$\frac{B_l(g_0) E_a^{l-1} \Gamma}{E(g)^l} \approx \frac{E^{\frac{1}{2}}(g)}{E_a^{\frac{1}{2}}} \quad (4.99)$$

La larghezza relativa della risonanza è pertanto⁴

$$\frac{\Gamma}{E(g)} \approx \frac{1}{B_l(g_0)} \left(\frac{E(g)}{E_a} \right)^{l-\frac{1}{2}} = \frac{1}{B_l(g_0)} \left(\frac{A_l(g)}{|B_l(g_0)|} \right)^{l-\frac{1}{2}} \quad (4.100)$$

⁴Strettamente parlando, dunque, sia ha una vera risonanza soltanto in questo caso, con $A_l > 0$ e $B_l < 0$. Per comodità abbiamo parlato di risonanza ogni qualvolta A_l si annulla.

che è un numero piccolo perché $A_l(g) \ll 1$ (mentre $B_l(g_0)$ è di ordine uno).

Nel caso del livello reale, invece, $A_l < 0$, $B_l < 0$ e $E(g) < 0$. Poiché $A_l \ll 1$, l'ampiezza di diffusione è

$$f_l \approx \frac{a}{\frac{E_a^{l-1} B_l}{E^{l-1}} - i a k} \approx \frac{a}{B_l} \frac{E^{l-1}}{E_a^{l-1}} \quad (4.101)$$

invece del valore “normale” (cioè, lontano dalla risonanza)

$$f_l \approx \frac{a}{A_l} \frac{E^l}{E_a^l} \quad (4.102)$$

Dunque vicino al livello reale la sezione d'urto parziale di bassa energia di momento angolare l rimane piccola (per $l \geq 1$) ma è dello stesso ordine di grandezza della sezione d'urto parziale di momento angolare $l - 1$.

4.3.3 Esempio: il potenziale $V(r) = \lambda \delta(r - a)$

1. Approssimazione di Born

Introduciamo il parametro adimensionale

$$b \equiv \frac{2 m \lambda a}{\hbar^2} \quad (4.103)$$

L'ampiezza di Born è:

$$f_{Born}(\theta, k) = -\frac{a b}{2} \int_0^\pi d\hat{\theta} \sin \hat{\theta} e^{-i q a \cos \hat{\theta}} = -a b \frac{\sin a q}{a q} \quad (4.104)$$

dove abbiamo posto $q \equiv 2 k \sin \frac{\theta}{2}$. Lo sviluppo di bassa energia dell'ampiezza è

$$\begin{aligned} f_{Born}(\theta, k) &= -a b \left[1 - \frac{(a q)^2}{3!} + O((a q)^4) \right] = \\ &= -a b \left[1 - \frac{(a k)^2}{3} + \frac{\cos \theta (a k)^2}{3} + O((a q)^4) \right] \end{aligned} \quad (4.105)$$

La sezione d'urto integrata

$$\sigma_{Born}/a^2 = \int d\Omega |f_{Born}|^2 = \frac{2 \pi b^2}{(a k)^2} \int_0^{2 k a} dx \frac{\sin^2 x}{x} \quad (4.106)$$

Nel limite di bassa energia

$$\sigma_{Born}/a^2 = 4\pi b^2 \left[1 - \frac{2(a k)^2}{3} + O((a k)^4) \right] \quad (4.107)$$

Nel limite di alta energia

$$\sigma_{Born}/a^2 = \pi b^2 \frac{\log(a k)}{(a k)^2} + O(1/(a k)^2) \quad (4.108)$$

2. Ampiezze parziali

Le condizioni di discontinuità della derivata della funzione d'onda radiale χ_l a $r = a$ sono

$$\frac{y \chi_l'(y)}{\chi_l(y)} \Big|_{y=ak^+} = \frac{y \chi_l'(y)}{\chi_l(y)} \Big|_{y=ak^-} + b \quad (4.109)$$

dove abbiamo introdotto la coordinata radiale adimensionale $y \equiv a k$. La funzione d'onda radiale vale

$$\chi_l = \begin{cases} j_l(y) & y < a \\ \cos \delta_l j_l(y) + \sin \delta_l n_l(y) & y > a \end{cases} \quad (4.110)$$

dove abbiamo introdotto le funzioni

$$\begin{aligned} j_l(y) &= y^{l+1} \left(\frac{d}{y dy} \right)^l \frac{\sin y}{y} = \\ &= (-1)^l \frac{2l!!}{(2l+1)!} y^{l+1} \left(1 - \frac{y^2}{2(2l+3)} + O(y^4) \right) \\ n_l(y) &= y^{l+1} \left(\frac{d}{y dy} \right)^l \frac{\cos y}{y} = \\ &= (-1)^l \frac{(2l-1)!!}{y^l} \left(1 + \frac{y^2}{2(2l-1)} + O(y^4) \right) \end{aligned} \quad (4.111)$$

L'equazione di discontinuità dà pertanto

$$\frac{\cot \delta_l y j_l'(y) + y n_l'(y)}{\cot \delta_l j_l(y) + n_l(y)} = b + \frac{y j_l'(y)}{j_l(y)} \quad (4.112)$$

da cui otteniamo l'espressione per lo sfasamento δ_l per l generico

$$\cot \delta_l = -\frac{n_l}{j_l} - \frac{y}{b j_l^2} (j_l n_l' - n_l' j_l) = -\frac{n_l}{j_l} - \frac{y}{b j_l^2} \quad (4.113)$$

Abbiamo utilizzato il fatto che il wronskiano delle soluzioni j_l e n_l è una costante che può essere valutata per esempio per piccoli y : dalle espansioni (4.111) si ottiene facilmente che $(j_l n'_l - n'_l j_l) = 1$.

Per $l = 0$ otteniamo dunque

$$y \cot \delta_0 = -y \cot y - \frac{y^2}{b \sin^2 y} = -\frac{1+b}{b} + \frac{b-1}{3b} y^2 + O(y^4) \quad (4.114)$$

Il coefficiente A_l nell'espansione

$$y^{2l+1} \cot \delta_l = A_l + B_l y^2 + O(y^4) \quad (4.115)$$

per l generico si ottiene dalle espansioni (4.111) all'ordine più basso:

$$\begin{aligned} y^{2l+1} \cot \delta_l &= -\frac{(2l-1)!!(2l+1)!}{2l!!} - \frac{1}{b} \left(\frac{(2l+1)!}{2l!!} \right)^2 + O(y^2) = \\ &= -(2l-1)!!^2 (2l+1) \left(1 + \frac{2l+1}{b} \right) + O(y^2) \end{aligned} \quad (4.116)$$

cioè

$$\begin{aligned} A_l &= -(2l-1)!!^2 (2l+1) \left(1 + \frac{2l+1}{b} \right) = \\ &= (2l-1)!!^2 (b+2l+1) + O((b+2l+1)^2) \end{aligned} \quad (4.117)$$

I coefficienti A_l si annullano per $b = -2l - 1$ (potenziale attrattivo) valori cui corrisponde l'esistenza di stati legati (reali o virtuali) di soglia. Per questi valori di b l'approssimazione di bassa energia richiede la conoscenza dei coefficienti B_l .

Per il calcolo di B_l a partire dall'espressione esatta (4.113) si devono utilizzare i termini nelle espansioni (4.111) successivi a quello più basso. Otteniamo

$$B_l = -\frac{(2l+1)!!^2}{2l+3} \left[\frac{1}{2l-1} + \frac{1}{b} \right] \quad (4.118)$$

Per $b = -2l - 1$ e $A_l = 0$, B_l vale

$$B_l \Big|_{b=-2l-1} = -\frac{2(2l+1)(2l-1)((2l-3)!!)^2}{(2l+3)} \quad (4.119)$$

Per esempio, per $l = 1$ ricaviamo

$$y^3 \cot \delta_1 = -3 \left(1 + \frac{3}{b}\right) - \frac{9}{5} \left(1 + \frac{1}{b}\right) y^2 + O(y^4) \quad (4.120)$$

Le espressioni (4.114) e (4.120) danno l'ampiezza di diffusione a meno di termini dell'ordine di y^4 . A quest'ordine

$$f(k, \theta) = f_0 + 3 f_1 \cos \theta + \dots \quad (4.121)$$

con

$$\frac{f_0}{a} = \frac{1}{-\frac{1+b}{b} + \frac{b-1}{3b} y^2 - i y + O(y^4)} = -\frac{b}{1+b} + O(y) \quad (4.122)$$

e

$$3 \frac{f_1}{a} = -\frac{3 y^2}{3 \left(1 + \frac{3}{b}\right) + \frac{9}{5} \left(1 + \frac{1}{b}\right) y^2 + i y^3 + O(y^4)} = -\frac{b y^2}{3+b} + O(y^4) \quad (4.123)$$

Per confrontare con il risultato di Born dobbiamo espandere le ampiezze parziali in potenze di b e limitarci al primo ordine:

$$\frac{f_0}{a} = -\frac{1}{y \cot y + \frac{y^2}{b \sin^2 y} + i y} = -b \frac{\sin^2 y}{y^2} + O(b^2) \quad (4.124)$$

e per l generico

$$\frac{f_l}{a} = -\frac{b j_l^2}{y^2} + O(b^2) \quad (4.125)$$

Dunque l'ampiezza all'ordine b che si ricava dall'espansione in onde parziali è

$$f = -b \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{j_l^2(y)}{y^2} P_l(\cos \theta) + O(b^2) \quad (4.126)$$

che coincide in effetti con il risultato di Born grazie all'identità

$$\frac{\sin[2y \sin \theta/2]}{2y \sin \theta/2} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \frac{j_l^2(y)}{y^2} P_l(\cos \theta) \quad (4.127)$$

Per esempio, all'ordine y^2 , poiché

$$\frac{f_1}{a} = -\frac{b y^2}{9} + O(b^2, y^4) \quad (4.128)$$

l'ampiezza di diffusione totale è

$$f/a = f_0/a + 3 f_1/a \cos \theta + \dots = -b \left(1 - \frac{y^2}{3} + \frac{y^2}{3} \cos \theta\right) + \dots \quad (4.129)$$

in accordo con l'espressione di Born sviluppata a quest'ordine.

3. Relazione con gli stati di soglia

Quando b assume il valore risonante

$$b_0 = -2l - 1 \quad (4.130)$$

e $l > 0$ esiste uno stato di soglia di energia nulla e momento angolare l la cui funzione d'onda è

$$\chi_l(r, b_0, E)|_{E=0} = \begin{cases} r^{l+1} & r \leq a \\ \frac{a^{2l+1}}{r^l} & r \geq a \end{cases} \quad (4.131)$$

Il coefficiente $B_l(b_0)$ è determinato dalla (4.68) in termini di questa funzione d'onda

$$\begin{aligned} \frac{B_l(b_0)}{(2l-1)!!(2l+1)!!} &= -\frac{1}{2l+1} \left[\frac{\int_0^a dr' \chi^2(r', b_0, 0)}{a \chi^2(a, b_0, 0)} + \frac{1}{2l-1} \right] = \\ &= -\frac{1}{2l+1} \left[\frac{1}{2l+3} + \frac{1}{2l-1} \right] = -\frac{2}{(2l+3)(2l-1)} \end{aligned}$$

in accordo con (4.119).

Dalla (4.72) otteniamo il valore del coefficiente $A_l(b)$ per b vicino al valore risonante

$$\begin{aligned} \frac{A_l(b)}{(2l-1)!!(2l+1)!!} &= \frac{\int_0^a dr' \delta(r' - a) \chi^2(r', b_0, 0)}{(2l+1) \chi^2(a, b_0, 0)} (b + 2l + 1) + \dots = \\ &= \frac{1}{2l+1} (b + 2l + 1) + O((b + 2l + 1)^2) \end{aligned} \quad (4.132)$$

in accordo con (4.117). Il valore dell'energia dello stato di soglia in prossimità della risonanza è quindi per $l > 0$

$$E(b) = -\frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{A_l(b)}{B_l(b)} = \quad (4.133)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\hbar^2}{2ma^2} \frac{(2l+3)(2l-1)}{2(2l+1)} (b + 2l + 1) + \\ &\quad + O((b + 2l + 1)^2) \quad l > 0 \end{aligned} \quad (4.134)$$

Verifichiamo questo risultato calcolando il valore esatto dell'energia dello stato legato per $b < -2l - 1$ di energia

$$E(b) = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (4.135)$$

La funzione d'onda dello stato legato si scrive

$$\chi_l = \begin{cases} \tilde{j}_l(kr) & r < a \\ c_l h_l(kr) & r > a \end{cases} \quad (4.136)$$

dove abbiamo introdotto le funzioni

$$\begin{aligned} \tilde{j}_l(y) &= y^{l+1} \left(\frac{d}{y dy} \right)^l \frac{\sinh y}{y} = \\ &= \frac{2l!! (-1)^l}{(2l+1)!} y^{l+1} \left(1 + \frac{y^2}{2(2l+3)} + O(y^4) \right) \\ h_l(y) &= y^{l+1} \left(\frac{d}{y dy} \right)^l \frac{e^{-y}}{y} = \quad l > 0 \\ &= \frac{(-1)^l (2l-1)!!}{y^l} \left(1 - \frac{y^2}{2(2l-1)} + O(y^4) \right) \end{aligned} \quad (4.137)$$

Posto $y = ka$, le condizioni di giunzione per $r = a$ si scrivono

$$\tilde{j}_l(y) = c_l h_l(y) \quad (4.138)$$

e

$$\begin{aligned} b &= \frac{y h'_l(y)}{h_l(y)} - \frac{y \tilde{j}'_l(y)}{\tilde{j}_l(y)} = \\ &= \frac{y h'_l(y) \tilde{j}_l(y) - y \tilde{j}'_l(y) h_l(y)}{h_l(y) \tilde{j}_l(y)} = -\frac{y}{h_l(y) \tilde{j}_l(y)} \end{aligned}$$

che determina l'autovalore $E(b)$. Per $y \ll 1$ e $l > 0$ questa equazione dà

$$\begin{aligned} b &= -(2l+1) \frac{1}{\left(1 + \frac{y^2}{2(2l+3)} + O(y^4) \right) \left(1 - \frac{y^2}{2(2l-1)} + O(y^4) \right)} = \\ &= -(2l+1) \left(1 - \frac{2y^2}{(2l+3)(2l-1)} + O(y^4) \right) \quad l > 0 \end{aligned}$$

ovvero

$$y^2 = \frac{(2l+3)(2l-1)}{2(2l+1)} (b+2l+1) + O((b+2l+1)^2) \quad l > 0 \quad (4.139)$$

in accordo con la (4.134).

4.3.4 Esempio: il potenziale $V_\lambda(r) = -\frac{\hbar^2}{m a^2} \frac{\lambda}{\cosh^2 \frac{r}{a}}$

La buca di potenziale

$$V(r) = \frac{\hbar^2}{m a^2} \frac{1}{\cosh^2 \frac{r}{a}} \quad (4.140)$$

porta all'equazione di Schrödinger radiale con $l = 0$ seguente

$$\chi_0''(r) + k^2 \chi_0 + \frac{1}{a^2} \frac{1}{\cosh^2 \frac{r}{a}} \chi_0 = 0 \quad (4.141)$$

La soluzione che si annulla per $r = 0$ è data in termini di funzioni elementari

$$\chi_0(r) = 2 \cos k r \tanh \frac{r}{a} + 2 a k \sin k r \quad (4.142)$$

Per $r \gg a$

$$\chi_0 \approx 2 \cos k r + 2 a k \sin k r \quad (4.143)$$

e dunque

$$\cot \delta_0 = a k \quad (4.144)$$

L'ampiezza di diffusione parziale con $l = 0$ è pertanto

$$f_0 = \frac{1}{k \cot \delta_0 - i k} = \frac{1}{k} \frac{1}{a k - i} \quad (4.145)$$

e la sezione d'urto corrispondente

$$\sigma_0 = 4 \pi |f_0|^2 = \frac{4 \pi}{k^2} \frac{1}{a^2 k^2 + 1} \quad (4.146)$$

La divergenza per $k = 0$ è dovuta all'esistenza di uno stato legato di "soglia" di energia nulla:

$$\chi^{(soglia)}(r) = \tanh \frac{r}{a} \quad (4.147)$$

Questo stato *non* è normalizzabile, ma se il potenziale viene appena deformato e reso più negativo, lo stato in questione diventa un vero stato legato con energia piccola. Consideriamo dunque il potenziale

$$V_\lambda(r) = -\frac{\hbar^2}{m a^2} \frac{\lambda}{\cosh^2 \frac{r}{a}} \quad (4.148)$$

e prendiamo

$$\lambda = 1 + \epsilon \quad (4.149)$$

con $|\epsilon| \ll 1$. Da quanto detto ci aspettiamo che per $\epsilon > 0$ appaia nello spettro uno stato legato con energia di legame piccola (rispetto a $\frac{\hbar^2}{m a^2}$) e che questa energia vada a zero per $\epsilon \rightarrow 0$. Vogliamo risolvere il problema di determinare la fase di diffusione $\delta_0^{(\lambda)}$ per $\lambda \approx 1$. Dalla discussione generale sappiamo che

$$a k \cot \delta_0^{(\lambda)} = A_\lambda + B_\lambda (a k)^2 + O((a k)^3) \quad (4.150)$$

e dal risultato (4.144) per $\lambda = 1$ deduciamo che

$$\begin{aligned} A_\lambda &= \alpha \epsilon + O(\epsilon^2) \\ B_\lambda &= 1 + O(\epsilon) \end{aligned}$$

Vogliamo determinare il coefficiente α senza risolvere il problema di Schrödinger con $\lambda \neq 1$ (che è complicato e richiede l'uso di funzioni ipergeometriche).

Per $\lambda > 1$ indichiamo con $\chi_\lambda(r)$ lo stato legato di energia piccola

$$\begin{aligned} E_\lambda &= -\frac{\hbar^2 k_\lambda^2}{2m} \\ \chi_\lambda(r) &\approx e^{-k_\lambda r} \quad r \gg a \end{aligned} \quad (4.151)$$

Dalla discussione generale sappiamo (cfr. Eq. (4.78)) che

$$\partial_\lambda k_\lambda \Big|_{\lambda=1} = -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr' \partial_\lambda V_\lambda(r') \Big|_{\lambda=1} \chi_\lambda^2(r') \Big|_{\lambda=1} \quad (4.152)$$

Nel caso in questione la funzione d'onda dello stato di soglia è

$$\chi_\lambda(r) \Big|_{\lambda=1} = \tanh \frac{r}{a} \quad (4.153)$$

Dunque

$$\begin{aligned} \partial_\lambda k_\lambda \Big|_{\lambda=1} &= -\frac{2m}{\hbar^2} \int_0^\infty dr V(r) \tanh^2 \frac{r}{a} = \\ &= \frac{2}{a} \int_0^\infty dx \frac{\tanh^2 x}{\cosh^2 x} = \frac{2}{3a} \end{aligned} \quad (4.154)$$

L' energia dello stato legato è dunque

$$E_\lambda = -\frac{\hbar^2 k_\lambda^2}{2m} = -\frac{2}{9} \frac{\hbar^2}{m a^2} (\lambda - 1)^2 + O((\lambda - 1)^4) \quad (4.155)$$

in accordo con la soluzione esatta del problema in termini delle funzioni ipergeometriche (Cfr. per esempio il Landau). Il coefficiente A_λ per $\lambda \approx 1$ è

$$A_\lambda = -a k_\lambda = -\frac{2}{3} (\lambda - 1) \quad (4.156)$$

e l'ampiezza di diffusione con $l = 0$ vicino alla risonanza

$$f_0^{(\lambda)} = \frac{a}{-\frac{2}{3} (\lambda - 1) + (a k)^2 - i a k} \quad (4.157)$$

dove abbiamo trascurato termini dell'ordine di $\lambda - 1$ nel raggio effettivo.

Questa formula rimane valida naturalmente anche per $\lambda < 1$, quando non c'è un vero stato legato, ma solo uno stato legato virtuale. Per dimostrarlo esplicitamente rideriviamo la (4.156) dalla (4.71), valida per gli stati dello spettro continuo. Poiché stiamo considerando una buca che si estende fino all'infinito, dobbiamo prendere come estremo dell'integrale nell'equazione (4.71) una lunghezza $L \gg a$:

$$\partial_\lambda \alpha(\lambda)|_{\lambda=1} = -\frac{2}{a} \frac{\int_0^L dr' \frac{\tanh^2 \frac{r'}{a}}{\cosh^2 \frac{r'}{a}}}{\chi_{\lambda=1}^2(L)} = -2 \frac{\int_0^L dx \frac{\tanh^2 x}{\cosh^2 x}}{\tanh^2 \frac{L}{a}} \rightarrow -\frac{2}{3} \quad \text{per } L \gg a$$

in accordo con Eq. (4.156), se si tiene presente che $\alpha_\lambda \approx A_\lambda$ in prossimità della risonanza se $l = 0$ (Eqs. (4.59)).

4.4 La buca/barriera di potenziale sferica

Consideriamo un potenziale

$$\begin{aligned} V(\vec{x}) &= V_0 & \text{per } |\vec{x}| < a \\ V(\vec{x}) &= 0 & \text{per } |\vec{x}| \geq a \end{aligned} \quad (4.158)$$

4.4.1 Approssimazione di Born

L'ampiezza di Born è in questo caso:

$$f_{\vec{p}_1}^{Born}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p) = -\frac{m V_0}{\hbar^2} \int_0^a dr r^2 \int_0^\pi d\hat{\theta} \sin \hat{\theta} e^{-i q r \cos \hat{\theta}} \quad (4.159)$$

dove $\vec{q} \equiv \vec{p}_2 - \vec{p}_1$, $p = |\vec{p}_1| = |\vec{p}_2|$, e $\vec{x} \cdot \vec{q} = r q \cos \hat{\theta}$. Dunque

$$\begin{aligned} f_{\vec{p}_1}^{Born}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p) &= -\frac{m V_0}{\hbar^2} \int_0^a dr r^2 \int_{-1}^1 dy e^{-i q r y} = \\ &= -\frac{2 m V_0}{\hbar^2 q} \int_0^a dr r \sin q r = \\ &= -\frac{2 m V_0}{\hbar^2 q^3} (\sin qa - qa \cos qa) \end{aligned} \quad (4.160)$$

Se θ è l'angolo tra \vec{p}_1 e \vec{p}_2 , si ha

$$q = 2 p \sin \frac{\theta}{2} \quad (4.161)$$

Pertanto

$$q dq = 2 p^2 \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\theta = p^2 \sin \theta d\theta \quad (4.162)$$

e la sezione d'urto diventa

$$\begin{aligned} \sigma_{Born} &= 2\pi a^2 \left(\frac{2 m V_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \int_0^\pi \frac{(\sin qa - qa \cos qa)^2}{(qa)^6} \sin \theta d\theta = \\ &= 2\pi \left(\frac{2 m V_0 a^2}{p \hbar^2} \right)^2 \int_0^{2pa} \frac{(\sin x - x \cos x)^2}{x^5} dx \\ &= \frac{2\pi}{p^2} \left(\frac{m V_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \left[1 - \frac{1}{32a^4 p^4} - \frac{1}{4a^2 p^2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\cos 4a p}{32a^4 p^4} + \frac{\sin 4a p}{8a^3 p^3} \right] \end{aligned} \quad (4.163)$$

Nel limiti di bassa e alta energia otteniamo

$$\begin{aligned} \sigma_{Born} &= \frac{2\pi}{p^2} \left(\frac{m V_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \left[\frac{8a^2 p^2}{9} \right] = \frac{16 \pi a^2}{9} \left(\frac{m V_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \quad \text{per } ap \ll 1 \\ \sigma_{Born} &= \frac{2\pi}{p^2} \left(\frac{m V_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \quad \text{per } ap \gg 1 \end{aligned} \quad (4.164)$$

4.4.2 Approssimazione iconale

$$\begin{aligned}
f_{\vec{p}_1}^{iconale}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p) &= \frac{p}{2\pi i} \int_0^a \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\theta e^{-iq\rho \cos\theta} \left[e^{-\frac{2imV_0}{\hbar^2 p} \sqrt{a^2 - \rho^2}} - 1 \right] = \\
&= \frac{p}{i} \int_0^a \rho d\rho J_0(\rho q) \left[e^{-\frac{2imV_0}{\hbar^2 p} \sqrt{a^2 - \rho^2}} - 1 \right] = \\
&= \frac{p}{i q^2} \int_0^{aq} x dx J_0(x) \left[e^{-\frac{2imV_0}{\hbar^2 p q} \sqrt{(aq)^2 - x^2}} - 1 \right] = \\
&= -i a (ap) \int_0^1 y dy J_0(yaq) \left[e^{-2i\nu \sqrt{1-y^2}} - 1 \right] \equiv \\
&\equiv -i a (ap) F_{iconale}[\nu, aq]
\end{aligned} \tag{4.165}$$

dove abbiamo introdotto il parametro adimensionale ν che funge da “costante di accoppiamento”

$$\nu \equiv \frac{m V_0 a}{\hbar^2 p} \tag{4.166}$$

e la funzione dei due parametri adimensionali che caratterizzano l'ampiezza di diffusione, ν e $aq = 2ap \sin \theta/2$:

$$F_{iconale}[\nu, aq] \equiv \int_0^1 y dy J_0(yaq) \left[e^{-2i\nu \sqrt{1-y^2}} - 1 \right] \tag{4.167}$$

Si noti che per $\nu \ll 1$ l'ampiezza iconale (4.165) si riduce a

$$\begin{aligned}
f_{\vec{p}_1}^{iconale}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p) &\approx -a (ap) (2\nu) \int_0^1 y dy J_0(yaq) \sqrt{1-y^2} = \\
&= -a 2\nu (ap) \left[\frac{\sin aq - aq \cos aq}{(aq)^3} \right]
\end{aligned} \tag{4.168}$$

che coincide con l'ampiezza calcolata nell'approssimazione di Born (vedi Eq. (4.160)).

L'ampiezza di diffusione in avanti, con $\theta = 0$, cioè per $q = 0$ è

$$\begin{aligned}
f_{\vec{p}_1}^{iconale}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_1/p) &= \frac{p}{i} \int_0^a \rho d\rho \left[e^{-\frac{2imV_0}{\hbar^2 p} \sqrt{a^2 - \rho^2}} - 1 \right] = \\
&= \frac{p a^2}{i} \int_0^1 x dx \left[e^{-\frac{2imV_0 a}{\hbar^2 p} x} - 1 \right] = \\
&= \frac{ip a^2}{2} \left[1 + \frac{1}{2\nu^2} - \frac{e^{-2i\nu}}{2\nu^2} - \frac{i e^{-2i\nu}}{\nu} \right]
\end{aligned} \tag{4.169}$$

Usando il teorema ottico

$$\text{Im}g f(0) = \frac{p}{4\pi} \sigma \quad (4.170)$$

otteniamo per la sezione d'urto totale in approssimazione iconale

$$\sigma_{iconale} = 2\pi a^2 \left[1 + \frac{1}{2\nu^2} - \frac{\cos 2\nu}{2\nu^2} - \frac{\sin 2\nu}{\nu} \right] \quad (4.171)$$

Nel limite di Born $\nu \ll 1$ riotteniamo la seconda delle (4.164)

$$\sigma_{iconale} \approx 2\pi a^2 \nu^2 = \frac{2\pi}{p^2} \left(\frac{m V_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \quad \text{per } \nu \ll 1 \quad (4.172)$$

Nel limite opposto

$$\sigma_{iconale} \approx 2\pi a^2 \quad \text{per } \nu \gg 1 \quad (4.173)$$

Si noti la circostanza seguente: la funzione $F_{iconale}[\nu, aq]$ che determina l'ampiezza di diffusione in approssimazione iconale, contiene nel suo sviluppo in serie di potenze della costante di accoppiamento ν termini di ordine arbitrario

$$F_{iconale}[\nu, aq] = \nu F_1(aq) + \nu^2 F_2(aq) + \dots \quad (4.174)$$

In questo senso l'approssimazione iconale cattura effetti a tutti gli ordini in teoria delle perturbazioni. Abbiamo anche osservato che il termine di ordine più basso, $F_1(aq)$ coincide con quello che si ottiene dalla teoria delle perturbazioni all'ordine più basso (approssimazione di Born)

$$F_1(aq) = -2 \left[\frac{\sin aq - aq \cos aq}{(aq)^3} \right] \quad (4.175)$$

Va però tenuto presente che i termini nell'espansione dell'iconale (4.174), di ordine superiore in ν — $F_2(aq), F_3(aq)$, etc. — coincidono con le funzioni che si ottengono al corrispondente ordine in teoria delle perturbazioni *solo a meno di termini di ordine $\frac{1}{ap}$* . In altre parole, l'iconale include solamente i termini, ad ogni ordine in teoria delle perturbazioni, "leading" in $1/(ap)$ (Eccetto che per il primo ordine in ν che, come abbiamo visto, è esatto in $1/(ap)$). È per questa ragione che la sezione d'urto che abbiamo ottenuto attraverso il teorema ottico — che parte dall'ordine ν^2 — sviluppata all'ordine più basso in ν coincide con quella ottenuta dall'approssimazione di Born, solo per $ap \gg 1$.

4.4.3 Ampiezza iconale nel limite semi-classico

Vogliamo ora calcolare la sezione di diffusione differenziale iconale, nel limite semi-classico. Riscriviamo l'espressione ottenuta precedentemente

$$\begin{aligned}
\frac{f^{iconale}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p)}{a} &= \frac{p a}{2 \pi i} \int_0^1 y dy \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i p a y t \cos \phi} \left[e^{-i \epsilon (p a) \sqrt{1-y^2}} - 1 \right] \\
&= \frac{p a}{2 \pi i} \int_0^1 y dy \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i p a (y t \cos \phi + \epsilon \sqrt{1-y^2})} - \frac{J_1(t p a)}{i t} = \\
&\equiv \frac{f_1^{(iconale)}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p)}{a} - \frac{f_2^{(iconale)}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p)}{a}
\end{aligned} \tag{4.176}$$

dove abbiamo posto

$$\begin{aligned}
\epsilon &\equiv \frac{V_0}{E} = \frac{2 m V_0}{\hbar^2 p^2} \\
t &\equiv 2 \sin \frac{\theta}{2}
\end{aligned} \tag{4.177}$$

e

$$\begin{aligned}
\frac{f_1^{(iconale)}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p)}{a} &\equiv \frac{p a}{2 \pi i} \int_0^1 y dy \int_0^{2\pi} d\phi e^{-i p a (y t \cos \phi + \epsilon \sqrt{1-y^2})} \\
\frac{f_2^{(iconale)}(\vec{p}_1/p, \vec{p}_2/p)}{a} &\equiv \frac{J_1(t p a)}{i t}
\end{aligned} \tag{4.178}$$

Notiamo che la validità dell'approssimazione iconale richiede in ogni caso che

$$\epsilon \ll 1 \tag{4.179}$$

D'altra parte il limite semi-classico è quello in cui la lunghezza d'onda della particella incidente sia piccola rispetto alle dimensioni della buca:

$$a p \gg 1 \tag{4.180}$$

Valutiamo l'integrale in (4.178) nel regime semi-classico (4.180) col metodo del punto sella. Gli estremi dell'esponente nell'integrando sono dati dalle equazioni

$$\begin{aligned}
\sin \phi &= 0 \\
t \cos \phi &= \frac{\epsilon y}{\sqrt{1-y^2}}
\end{aligned} \tag{4.181}$$

Il punto stazionario con $0 \leq \theta_c \leq 2\pi$ e $0 \leq y_c \leq 1$ è

$$\begin{aligned}\phi_c &= 0 \\ y_c &= \frac{t}{\sqrt{\epsilon^2 + t^2}}\end{aligned}$$

Espandiamo l'esponente intorno a (ϕ_c, y_c) fino al secondo ordine

$$\begin{aligned}y t \cos \phi + \epsilon \sqrt{1 - y^2} &\approx \sqrt{\epsilon^2 + t^2} + \\ &-\frac{1}{2} \left(\frac{t^2}{\sqrt{\epsilon^2 + t^2}} \theta^2 + \frac{(\epsilon^2 + t^2)^{\frac{3}{2}}}{\epsilon^2} (y - y_c)^2 \right)\end{aligned}$$

Pertanto

$$\begin{aligned}\frac{f_1^{(iconale)}}{a} &\approx y_c \frac{(\epsilon^2 + t^2)^{\frac{1}{4}}}{t} \frac{\epsilon}{(\epsilon^2 + t^2)^{\frac{3}{4}}} e^{-i p a \sqrt{\epsilon^2 + t^2}} = \\ &= \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + t^2} e^{-i p a \sqrt{\epsilon^2 + t^2}}\end{aligned}\quad (4.182)$$

La sezione d'urto differenziale diventa

$$\begin{aligned}\frac{d\sigma_{iconale}}{d\Omega} &\approx \left| \frac{\epsilon}{\epsilon^2 + t^2} e^{-i p a \sqrt{\epsilon^2 + t^2}} - \frac{J_1(t p a)}{i t} \right|^2 = \\ &= \frac{\epsilon^2}{(\epsilon^2 + t^2)^2} \left| 1 - \frac{e^{i p a \sqrt{\epsilon^2 + t^2}} (\epsilon^2 + t^2) J_1(t p a)}{i t \epsilon} \right|^2\end{aligned}\quad (4.183)$$

La sezione d'urto è dunque significativamente diversa da zero per angoli di diffusione non molto più grandi di ϵ

$$\theta \lesssim \epsilon \ll 1 \quad (4.184)$$

Prendiamo $\nu \gg 1$. (Abbiamo visto nella sezione precedente che nel limite opposto $\nu \ll 1$ ritroviamo la formula di Born. L'approssimazione di punto sella che ha portato alla formula (4.183) richiede in effetti che $\nu \gg 1$). Prendiamo dunque

$$\epsilon(p a) \gg 1 \quad (4.185)$$

Se l'angolo di diffusione non è troppo piccolo

$$\frac{1}{p a} \ll \theta \lesssim \epsilon \ll 1 \quad (4.186)$$

valgono le seguenti stime dei due termini f_1 ed f_2 che compongono l'ampiezza di diffusione

$$f_1 \sim \frac{1}{\epsilon} \quad f_2 \sim \frac{(ap)}{(\theta ap)^{\frac{3}{2}}} \quad (4.187)$$

dove abbiamo fatto uso dell'espressione asintotica per $J_1(x)$

$$|J_1(x)| \sim \sqrt{\frac{2}{\pi x}} \quad \text{per } x \gg 1 \quad (4.188)$$

Dunque per angoli di diffusione sufficientemente grandi

$$\theta^2 \gg (\epsilon pa)^{\frac{1}{3}} \frac{\epsilon}{pa} \gg \frac{\epsilon}{pa} \quad (4.189)$$

il termine $|f_1| \gg |f_2|$ domina e la sezione d'urto diventa quella classica

$$\frac{d\sigma_{iconale}}{d\Omega} \approx \frac{\epsilon^2}{(\epsilon^2 + t^2)^2} \approx \frac{\epsilon^2}{(\epsilon^2 + \theta^2)^2} \quad \theta^2 \gg \frac{\epsilon}{pa} \quad (4.190)$$

Invece per angoli piccoli $\theta^2 \ll \frac{\epsilon}{pa}$ il termine dominante diventa f_2 e la sezione d'urto è controllata dai picchi diffrattivi intorno a $\theta \sim 0$. In questa regione degli angoli di diffusione la sezione non è mai descritta correttamente dalla sezione d'urto classica.

4.4.4 Ampiezze parziali e limite di bassa energia

(1) $l = 0$.

Vogliamo determinare l'ampiezza parziale per $l = 0$. Poniamo

$$\chi(r) = rR_{p0}(r) \quad (4.191)$$

che soddisfa l'equazione

$$\chi''(r) + \left(p^2 - \frac{2mV(r)}{\hbar}\right)\chi(r) = 0 \quad (4.192)$$

Cioè

$$\begin{aligned} \chi''(r) + p_0^2 \chi(r) &= 0 & \text{per } r < a \\ \chi''(r) + p^2 \chi(r) &= 0 & \text{per } r > a \end{aligned}$$

dove

$$p_0^2 \equiv p^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (4.193)$$

Distinguiamo i casi:

(a) $V_0 > 0$ (caso della *barriera*).

In questo caso possiamo prendere, per p sufficientemente piccolo, $p_0^2 < 0$. Poniamo

$$p_0 = i\omega = ip\sqrt{\frac{2\nu}{ap} - 1} \approx ip\sqrt{\frac{2\nu}{ap}}, \quad \text{per } pa \ll 1 \quad (4.194)$$

Dobbiamo prendere la soluzione di (4.193) che è nulla per $r = 0$

$$\chi(r) = A \sinh \omega r \quad \text{per } r < a \quad (4.195)$$

mentre fuori dalla buca χ deve essere

$$\chi(r) = B \sin(pr + \delta_0) \quad \text{per } r > a \quad (4.196)$$

La condizione di continuità di χ'/χ dà un'equazione che determina la fase δ_0 :

$$\omega \coth(a\omega) = p \cot(pa + \delta_0) = p \frac{\cot ap \cot \delta_0 - 1}{\cot \delta_0 + \cot ap} \quad (4.197)$$

ovvero

$$p \cot \delta_0 = \frac{p + \omega \cot ap \coth a\omega}{\cot ap - \frac{\omega}{p} \coth a\omega} \quad (4.198)$$

Nel limite di bassa energia $ap \ll 1$, l'equazione (4.197) diventa

$$\delta_0 \approx \frac{p}{\omega} (\tanh(a\omega) - a\omega) \quad (4.199)$$

da cui

$$f_0 \approx \frac{\delta_0}{p} \approx \frac{\tanh(a\omega) - a\omega}{\omega} \quad (4.200)$$

e la sezione d'urto

$$\begin{aligned} \sigma &\approx 4\pi |f_0|^2 \approx 4\pi a^2 \left(\frac{\tanh(a\omega) - a\omega}{a\omega} \right)^2 = \\ &\approx 4\pi a^2 \frac{[\tanh(\sqrt{2\nu ap}) - \sqrt{2\nu ap}]^2}{(2\nu ap)} \quad \text{per } ap \ll 1 \end{aligned} \quad (4.201)$$

Nel limite perturbativo, $\nu \ll 1$ riotteniamo la sezione di Born, nel limite di piccoli ap (la prima delle (4.164))

$$\sigma \approx 4\pi a^2 \frac{(2\nu ap)^2}{9} \quad \text{per } \nu \ll 1 \quad (4.202)$$

Nel limite opposto di grande accoppiamento $\nu \gg 1$ otteniamo

$$\sigma \approx 4\pi^2 a^2 \quad \text{per } \nu \gg 1 \quad (4.203)$$

(b) $-V_0 < 0$ (caso della *buca* di potenziale).

In questo caso $p_0^2 > 0$. Dunque

$$\chi(r) = A \sin p_0 r \quad \text{per } r < a \quad (4.204)$$

mentre fuori dalla buca χ deve essere

$$\chi(r) = B \sin(pr + \delta_0) \quad \text{per } r > a \quad (4.205)$$

La condizione di continuita di χ'/χ dà un'equazione che determina la fase δ_0 :

$$p_0 \cot(ap_0) = p \cot(pa + \delta_0) = p \frac{\cot ap \cot \delta_0 - 1}{\cot \delta_0 + \cot ap} \quad (4.206)$$

ovvero

$$p \cot \delta_0 = \frac{p + p_0 \cot ap \cot ap_0}{\cot ap - \frac{p_0}{p} \cot ap_0} \quad (4.207)$$

e

$$\begin{aligned} f_0 &= \frac{\cot ap - \frac{p_0}{p} \cot ap_0}{p + p_0 \cot ap \cot ap_0 - ip \cot ap + ip_0 \cot ap_0} = \\ &= \frac{\tan ap_0 - \frac{p_0}{p} \tan ap}{p \tan ap \tan ap_0 + p_0 - ip \tan ap_0 + ip_0 \tan ap} \end{aligned} \quad (4.208)$$

Nel limite di bassa energia $ap \ll 1$, l'equazione (4.206) diventa

$$p \cot \delta_0 \approx \frac{p}{\delta_0} \approx \frac{p_0}{\tan ap_0 - ap_0} \quad (4.209)$$

da cui

$$f_0 \approx \frac{\delta_0}{p} \approx \frac{\tan(ap_0) - ap_0}{p_0} \quad (4.210)$$

e la sezione d'urto

$$\begin{aligned}\sigma &\approx 4\pi |f_0|^2 \approx 4\pi a^2 \left(\frac{\tan(ap_0) - ap_0}{ap_0} \right)^2 = \\ &\approx 4\pi a^2 \left[\frac{\tan \sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}}}{\sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}}} - 1 \right]^2 \quad \text{per } ap \ll 1 \quad (4.211)\end{aligned}$$

Nel limite perturbativo, $\nu \ll 1$ riotteniamo la sezione di Born, nel limite di piccoli ap (la prima delle (4.164))

$$\sigma \approx \frac{4\pi a^2}{9} \left(\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2} \right)^2 \quad \text{per } \nu \ll 1 \quad (4.212)$$

Per

$$\sqrt{\frac{2mV_0 a^2}{\hbar^2}} \equiv \sqrt{v} = ap\nu \rightarrow \frac{\pi}{2} \quad (4.213)$$

l'espressione (4.211) diverge. La ragione è che in questo caso l'approssimazione (4.210) per f_0 non è corretta: in questo caso dobbiamo includere il termine di ordine superiore in $p \cot \delta_0$:

$$\begin{aligned}ap \cot \delta_0 &= \frac{v}{\tan \sqrt{v} - \sqrt{v}} + \\ &+ \frac{1 + \frac{\cot \sqrt{v}}{\sqrt{v}} - \sqrt{v} \cot \sqrt{v} - \cot^2 \sqrt{v} + \frac{2v}{3} \cot^2 \sqrt{v}}{2(1 - \sqrt{v} \cot \sqrt{v})^2} (ap)^2 + \\ &+ O(p^4) \quad (4.214)\end{aligned}$$

Dunque poniamo

$$v = \frac{\pi^2}{4} + \epsilon \quad (4.215)$$

con $\epsilon \ll 1$. Allora

$$p \cot \delta_0 \approx -\frac{\epsilon}{2a} + \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{\pi^2} \right) ap^2 + O(p^4) \quad (4.216)$$

e

$$f_0 \approx \frac{1}{-\frac{\epsilon}{2a} + \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{\pi^2} \right) ap^2 - ip} \quad (4.217)$$

con

$$\sigma \approx \frac{4\pi}{\left[\frac{\epsilon}{2a} - \left(\frac{1}{2} - \frac{\epsilon}{\pi^2} \right) ap^2 \right]^2 + p^2} \approx \frac{4\pi}{\frac{\epsilon^2}{4a^2} + \left(1 - \frac{\epsilon}{2} \right) p^2} \approx \frac{4\pi}{\frac{\epsilon^2}{4a^2} + p^2} \quad (4.218)$$

(2) $l = 1$

Consideriamo il caso $-V_0 < 0$ (caso della *buca* di potenziale).
All'interno della buca la χ soddisfa l'equazione

$$\chi''(r) + \left(p_0^2 - \frac{2}{r^2}\right) \chi(r) = 0 \quad (4.219)$$

con

$$p_0^2 = p^2 + \frac{2mV_0}{\hbar^2} \quad (4.220)$$

La soluzione di (4.219) regolare che si annulla a $r = 0$ è

$$\chi(r) = C y_0^2 \frac{d}{y_0 dy_0} \frac{\sin y_0}{y_0} = C \left(\cos y_0 - \frac{\sin y_0}{y_0} \right) \quad \text{per } r \leq a \quad (4.221)$$

dove

$$y_0 \equiv p_0 r \quad (4.222)$$

Dunque

$$\begin{aligned} r \frac{\chi'(r)}{\chi(r)} \Big|_{r \rightarrow a^-} &= \frac{-1 + y_0^2 + \cot y_0}{1 - y_0 \cot y_0} = \\ &= \frac{\sqrt{v} \cot \sqrt{v} - 1 + v}{1 - \sqrt{v} \cot \sqrt{v}} + \\ &+ \frac{2 - v - \sqrt{v} \cot \sqrt{v} - v \cot^2 \sqrt{v}}{2(1 - \sqrt{v} \cot \sqrt{v})^2} (ap)^2 + O(p^4) = \\ &\equiv \alpha_1(v) + \beta_1(v) (ap)^2 + O(p^4) \end{aligned} \quad (4.223)$$

D'altra parte la funzione d'onda per $r \geq a$ soddisfa l'equazione libera ed è dunque data da

$$\begin{aligned} \chi(r) &= \cos \delta_1 y^2 \frac{d}{y dy} \frac{\sin y}{y} + \sin \delta_1 y^2 \frac{d}{y dy} \frac{\cos y}{y} = \\ &= \cos \delta_1 \left(\cos y - \frac{\sin y}{y} \right) - \sin \delta_1 \left(\sin y + \frac{\cos y}{y} \right) = \\ &= \cos \delta_1 \left(-\frac{y^2}{3} + \frac{y^4}{30} + \dots \right) - \sin \delta_1 \left(\frac{1}{y} + \frac{y}{2} + \dots \right) \end{aligned} \quad (4.224)$$

Da cui

$$r \frac{\chi'(r)}{\chi(r)} \Big|_{r \rightarrow a^+} = \frac{\frac{1}{y_a} - \frac{y_a}{2} + \dots + \cot \delta_1 \left(-\frac{2y_a^2}{3} + \frac{4y_a^4}{30} + \dots \right)}{-\frac{1}{y_a} - \frac{y_a}{2} + \dots + \cot \delta_1 \left(-\frac{y_a^2}{3} + \frac{y_a^4}{30} + \dots \right)} =$$

$$= \frac{1 - \frac{y_a^2}{2} + \dots + \frac{y_a^3 \cot \delta_1}{3} \left(-2 + \frac{4y_a^2}{10} + \dots\right)}{-1 - \frac{y_a^2}{2} + \dots + \frac{y_a^3 \cot \delta_1}{3} \left(-1 + \frac{y_a^2}{10} + \dots\right)} \quad (4.225)$$

dove abbiamo posto $y_a \equiv ap$. Eguagliando le derivate (4.223) e (4.225) otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{y_a^3 \cot \delta_1}{3} &= \frac{1 + \alpha_1(v) + \frac{y_a^2}{2} (\alpha_1(v) - 1 + 2\beta_1(v)) + \dots}{2 - \alpha_1(v) + \frac{y_a^2}{10} (\alpha_1(v) - 4 - 10\beta_1(v)) + \dots} = \\ &= \frac{1 + \alpha_1(v)}{2 - \alpha_1(v)} + \\ &+ 3 \frac{5\beta_1(v) - 1 + 3\alpha_1(v) - \alpha_1^2(v)}{5(2 - \alpha_1(v))^2} (ap)^2 + \\ &+ O(p^4) \end{aligned} \quad (4.226)$$

Notiamo che

$$\alpha_1(\pi^2) = -1 \quad (4.227)$$

e dunque

$$A_1(\pi^2) = 0 \quad (4.228)$$

Pertanto prendiamo

$$\sqrt{v} = \pi - \epsilon \quad (4.229)$$

con $\epsilon \ll 1$. In questo limite

$$\alpha_1(v) = -1 + \pi \epsilon + O(\epsilon^2) \quad (4.230)$$

e

$$\beta_1(v) = \frac{-1}{2} + O(\epsilon) \quad (4.231)$$

per cui

$$\frac{A_1(v)}{3} = \frac{\pi \epsilon}{3} + O(\epsilon^2) \quad (4.232)$$

e

$$\frac{B_1(v)}{3} = -\frac{1}{2} + O(\epsilon) \quad (4.233)$$

L'ampiezza di diffusione parziale è dunque

$$f_1 = \frac{a}{\frac{1}{a^2 k^2} (A_1 + B_1 (ak)^2) - iak} \approx \frac{a}{\frac{1}{a^2 k^2} (\pi \epsilon - \frac{3}{2} (ak)^2) - iak} \quad (4.234)$$

mentre la sezione d'urto parziale è

$$\sigma_1 \approx \frac{12 \pi a^2}{\frac{1}{a^4 k^4} (\pi \epsilon - \frac{3}{2} (a k)^2)^2 + (a k)^2} \quad (4.235)$$

La sezione ha pertanto un picco intorno a

$$a k \approx \sqrt{\frac{2 \pi \epsilon}{3}} \quad (4.236)$$

dove vale

$$\sigma_1|_{a k \approx \sqrt{\frac{2 \pi \epsilon}{3}}} \approx \frac{12 a^2}{\epsilon} \quad (4.237)$$

La larghezza della risonanza Δ

$$(a k)^2 = \frac{2 \pi \epsilon}{3} + \Delta \quad (4.238)$$

è determinata dalla condizione che i due quadrati nel denominatore della (4.235) si equivalgono

$$\Delta^2 \approx \left(\frac{2 \pi \epsilon}{3}\right)^3 \quad (4.239)$$

cioè

$$\Delta \approx \epsilon^{\frac{3}{2}} \quad (4.240)$$

Pertanto la larghezza relativa

$$\frac{\Delta}{\frac{2 \pi \epsilon}{3}} \approx \epsilon^{\frac{1}{2}} \ll 1 \quad (4.241)$$

è molto più piccola di uno e la risonanza è stretta.

5 Stati coerenti e stati “squeezed”

5.1 Stati di minima indeterminazione

Siano X_1, X_2 variabili canonicamente coniugate:

$$[X_1, X_2] = 2i \quad (5.1)$$

(per esempio $X_1 = x$ e $X_2 = 2p/\hbar$). Sia $|\psi\rangle$ uno stato, e

$$X(\alpha) = \alpha(X_1 - \langle X_1 \rangle) + i(X_2 - \langle X_2 \rangle) \quad (5.2)$$

(dove $\langle X_{1,2} \rangle = \langle \psi | X_{1,2} | \psi \rangle$) un'operatore dipendente dal parametro reale α . Poiché

$$\|X(\alpha)|\psi\rangle\|^2 = \alpha^2 \langle (X_1 - \langle X_1 \rangle)^2 \rangle - 2\alpha + \langle (X_2 - \langle X_2 \rangle)^2 \rangle \geq 0 \quad \forall \alpha \quad (5.3)$$

deve essere

$$\delta x_1^2 \delta x_2^2 \equiv \langle (X_1 - \langle X_1 \rangle)^2 \rangle \langle (X_2 - \langle X_2 \rangle)^2 \rangle \geq 1 \quad (5.4)$$

Se lo stato ψ è di minima indeterminazione vale il segno di equaglianza e

$$\|X(\alpha)|\psi\rangle\|^2 = (\delta x_1 \alpha - \delta x_2)^2 \quad (5.5)$$

Pertanto se lo stato è di minima indeterminazione vale

$$X\left(\frac{\delta x_2}{\delta x_1}\right)|\psi\rangle = 0 \quad (5.6)$$

ovvero

$$(\delta x_2 X_1 + i \delta x_1 X_2)|\psi\rangle = \left(\frac{\langle x_1 \rangle}{\delta x_1} + i \frac{\langle x_2 \rangle}{\delta x_2}\right)|\psi\rangle \quad (5.7)$$

Introducendo gli operatori di creazione e distruzione

$$a = \frac{X_1 + i X_2}{2} \quad a^\dagger = \frac{X_1 - i X_2}{2} \quad (5.8)$$

la relazione sopra diventa

$$\left[\frac{(\delta x_2 + \delta x_1)}{2} a + \frac{(\delta x_2 - \delta x_1)}{2} a^\dagger\right] |\psi\rangle = 2 \left(\frac{\langle x_1 \rangle}{\delta x_1} + i \frac{\langle x_2 \rangle}{\delta x_2}\right) |\psi\rangle \quad (5.9)$$

In conclusione lo stato di minima indeterminazione ψ è uno stato coerente per un oscillatore b definito da

$$b = \mu a + \nu a^\dagger \quad (5.10)$$

nel caso in cui

$$\mu = \frac{(\delta x_2 + \delta x_1)}{2} \quad \nu = \frac{(\delta x_2 - \delta x_1)}{2} \quad (5.11)$$

Il più generale b che si ottiene attraverso una trasformazione canonica dagli oscillatori a e a^\dagger

$$b = U a U^\dagger \quad (5.12)$$

ha la forma (5.10) con μ e ν complessi

$$|\mu|^2 - |\nu|^2 = 1 \quad (5.13)$$

Ridefinendo la fase di α è sempre possibile scegliere

$$\mu = \cosh r \quad \nu \equiv e^{i2\phi} \sinh r \quad (5.14)$$

con r e ϕ reali. L'operatore che implemente la trasformazione unitaria è

$$U = e^{\frac{1}{2}\epsilon^* a^2 - \frac{1}{2}\epsilon (a^\dagger)^2} \quad (5.15)$$

dove

$$\epsilon = r e^{2i\phi} \quad (5.16)$$

Gli stati coerenti di b

$$b|\beta\rangle = \beta|\beta\rangle \quad (5.17)$$

sono detti stati “squeezed”. Riassumendo la sottosezione precedente, abbiamo dimostrato che il più generale stato di minima indeterminazione è uno stato squeezed con ν reale ($\phi = 0, \pi$):

$$\mu = \sinh r = \frac{(\delta x_2 + \delta x_1)}{2} \quad \nu = \cosh r = \pm \frac{(\delta x_2 - \delta x_1)}{2} \quad (5.18)$$

cioè

$$\delta x_1 = \mu \mp \nu = e^{\mp r} \quad \delta x_2 = \mu \pm \nu = e^{\pm r} \quad (5.19)$$

che motiva il nome “squeezed”. L'autovalore β di b è per lo stato ψ

$$\beta = 2 \left(\frac{\langle x_1 \rangle}{\delta x_1} + i \frac{\langle x_2 \rangle}{\delta x_2} \right) \quad (5.20)$$

da cui ricaviamo il valore medio degli operatori X_1 e X_2 in termini di β

$$\langle X_1 + i X_2 \rangle = 2 (\mu \beta - \nu \beta^*) \quad (5.21)$$

5.2 Rappresentazione olomorfa

Calcoliamo la funzione d'onda olomorfa $\psi(z)$ relativa ad uno stato “squeezed” associato all'operatore b :

$$b\psi(z) = \mu\psi'(z) + \nu z\psi(z) = \beta\psi(z) \quad (5.22)$$

Posto

$$\psi(z) = e^{\chi(z)} \quad (5.23)$$

abbiamo

$$\mu \chi'(z) + \nu z = \beta \quad (5.24)$$

cioè

$$\chi(z) = -\frac{\nu}{2\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z + \chi_0 \quad (5.25)$$

dove χ_0 è una costante. Dunque

$$\psi(z) = N e^{-\frac{\nu}{2\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z} \quad (5.26)$$

dove $N = e^{\chi_0}$. Determiniamo N normalizzando lo stato ψ ad 1. Abbiamo per l'integrale gaussiano sul piano complesso

$$\int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha z^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{z}^2 + \gamma z + \bar{\gamma} \bar{z} - z \bar{z}} = \frac{1}{\sqrt{1 - |\alpha|^2}} e^{-\frac{1}{2(1-|\alpha|^2)} [\alpha \bar{\gamma}^2 + \bar{\alpha} \gamma^2 - 2\gamma \bar{\gamma}]} \quad (5.27)$$

Notiamo che l'integrale è convergente solo se

$$|\alpha| < 1 \quad (5.28)$$

che è soddisfatta se $\alpha = \frac{\nu}{\mu}$ con ν e μ che soddisfano (5.13). Sarà utile disporre anche degli integrali che si ottengono per derivazione rispetto a γ della (5.27):

$$\begin{aligned} \int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha z^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{z}^2 + \gamma z + \bar{\gamma} \bar{z} - z \bar{z}} z &= -\frac{e^{-\frac{1}{2(1-|\alpha|^2)} [\alpha \bar{\gamma}^2 + \bar{\alpha} \gamma^2 - 2\gamma \bar{\gamma}]} (1 - |\alpha|^2)^{\frac{3}{2}} [\bar{\alpha} \gamma - \bar{\gamma}]}{\pi} \\ \int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha z^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{z}^2 + \gamma z + \bar{\gamma} \bar{z} - z \bar{z}} z^2 &= \frac{e^{-\frac{1}{2(1-|\alpha|^2)} [\alpha \bar{\gamma}^2 + \bar{\alpha} \gamma^2 - 2\gamma \bar{\gamma}]} (1 - |\alpha|^2)^{\frac{5}{2}} \times \\ &\times [(\bar{\alpha} \gamma - \bar{\gamma})^2 - \bar{\alpha}(1 - |\alpha|^2)] \end{aligned}$$

Sarà anche conveniente definire i valori medi di funzioni $f(z, \bar{z})$ secondo

$$\langle f(z, \bar{z}) \rangle = \frac{\int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha z^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{z}^2 + \gamma z + \bar{\gamma} \bar{z} - z \bar{z}} f(z, \bar{z})}{\int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha z^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{z}^2 + \gamma z + \bar{\gamma} \bar{z} - z \bar{z}}} \quad (5.29)$$

Pertanto

$$\begin{aligned} \langle z \rangle &= \frac{\bar{\gamma} - \bar{\alpha} \gamma}{1 - |\alpha|^2} \\ \langle z^2 \rangle &= \frac{(\bar{\alpha} \gamma - \bar{\gamma})^2 - \bar{\alpha}(1 - |\alpha|^2)}{(1 - |\alpha|^2)^2} \end{aligned} \quad (5.30)$$

La variabile

$$w = z - \frac{\bar{\gamma} - \bar{\alpha} \gamma}{1 - |\alpha|^2} \quad (5.31)$$

ha valore medio nullo. Può essere utile riscrivere i valori medi in termini di w e \bar{w}

$$\langle f(z, \bar{z}) \rangle = \frac{\int \frac{d^2 w}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha w^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{w}^2 - w \bar{w}} f\left(w + \frac{\bar{\gamma} - \bar{\alpha} \gamma}{1 - |\alpha|^2}, \bar{w} + \frac{\gamma - \alpha \bar{\gamma}}{1 - |\alpha|^2}\right)}{\int \frac{d^2 w}{\pi} e^{-\frac{1}{2} \alpha w^2 - \frac{1}{2} \bar{\alpha} \bar{w}^2 - w \bar{w}}} \quad (5.32)$$

Ritornando al calcolo della costante di normalizzazione della funzione d'onda dello stato squeezed, otteniamo dalla formula (5.27)

$$|N|^2 = \frac{1}{|\mu|} e^{-|\beta|^2 + \frac{1}{2} \beta^2 \frac{\nu}{\mu} + \frac{1}{2} \bar{\beta}^2 \frac{\nu}{\bar{\mu}}} \quad (5.33)$$

In definitiva

$$\psi(z) = \frac{1}{|\mu|^{\frac{1}{2}}} e^{-\frac{|\beta|^2}{2} + \frac{1}{2} \beta^2 \frac{\nu}{\mu}} e^{-\frac{\nu}{2\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z} \quad (5.34)$$

Calcoliamo ora la distribuzione di “fotoni” sullo stato “squeezed”:

$$\begin{aligned} \langle n | \psi \rangle &= N \int \frac{d^2 z}{\sqrt{n!} \pi} \bar{z}^n e^{-\frac{\nu}{2\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z - z \bar{z}} = \\ &= \frac{N}{\sqrt{n!}} \partial_z^n e^{-\frac{\nu}{2\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z} \Big|_{z=0} = \\ &= \frac{N}{\sqrt{n!}} \left[\frac{\nu}{2\mu} \right]^{\frac{n}{2}} \partial_z^n e^{-z^2 + \frac{\sqrt{2}\beta}{\sqrt{\mu\nu}} z} \Big|_{z=0} = \\ &= (-1)^n \frac{N}{\sqrt{n!}} \left[\frac{\nu}{2\mu} \right]^{\frac{n}{2}} H_n \left(\frac{\beta}{\sqrt{2\mu\nu}} \right) \end{aligned}$$

dove abbiamo usato l'espressione per i polinomi di Hermite

$$H_n(x) = e^{x^2} \partial_x^n e^{-x^2} \quad (5.35)$$

La distribuzione di probabilità fotonica è dunque

$$P_n = |\langle n | \psi \rangle|^2 = \frac{1}{n!} \frac{1}{|\mu|} e^{-|\beta|^2 + \frac{1}{2} \beta^2 \frac{\nu}{\mu} + \frac{1}{2} \bar{\beta}^2 \frac{\nu}{\bar{\mu}}} \left| \frac{\nu}{2\mu} \right|^n \left| H_n \left(\frac{\beta}{\sqrt{2\mu\nu}} \right) \right|^2$$

Calcoliamo il valor medio del numero fotonico su uno stato squeezed:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{N} \rangle &= |N|^2 \int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{\nu}{2\mu} z^2 - \frac{\bar{\nu}}{2\mu} \bar{z}^2 + \frac{\beta}{\mu} z + \frac{\bar{\beta}}{\mu} \bar{z} - z \bar{z}} \left[-\frac{\nu}{\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z \right] = \\
&= -\frac{\nu}{\mu} \mu^4 \left[\left(\frac{\bar{\nu} \beta}{\mu^2} - \frac{\bar{\beta}}{\mu} \right)^2 - \frac{\bar{\nu}}{\mu^3} \right] - \frac{\beta}{\mu} \mu^2 \left(\frac{\bar{\nu} \beta}{\mu^2} - \frac{\bar{\beta}}{\mu} \right) = \\
&= |\nu|^2 + |\mu \beta - \nu \bar{\beta}|^2
\end{aligned} \tag{5.36}$$

Notiamo che

$$\langle a^\dagger \rangle = \langle z \rangle = \mu \bar{\beta} - \bar{\nu} \beta \tag{5.37}$$

Calcoliamo la varianza di \hat{N} sullo stato squeezed

$$\begin{aligned}
\langle \hat{N}^2 \rangle &= |N|^2 \int \frac{d^2 z}{\pi} e^{-\frac{\nu}{2\mu} z^2 - \frac{\bar{\nu}}{2\mu} \bar{z}^2 + \frac{\beta}{\mu} z + \frac{\bar{\beta}}{\mu} \bar{z} - z \bar{z}} \left| -\frac{\nu}{\mu} z^2 + \frac{\beta}{\mu} z \right|^2 = \\
&= \left\langle \left| -\frac{\nu}{\mu} w^2 + \frac{w}{\mu} (\beta - 2\nu \langle z \rangle) + \langle z \rangle^2 \right|^2 \right\rangle = \\
&= \left\langle \frac{|\nu|^2}{\mu^2} |w|^4 + \langle z \rangle^4 + \frac{|w|^2}{\mu^2} |\beta - 2\nu \langle z \rangle|^2 + \right. \\
&\quad \left. - \frac{\nu |\langle z \rangle|^2}{\mu} w^2 - \frac{\bar{\nu} |\langle z \rangle|^2}{\mu} \bar{w}^2 \right\rangle = \\
&= |\nu|^2 (3\mu^2 - 1) + \langle z \rangle^4 + |\beta - 2\nu \langle z \rangle|^2 + 2|\nu|^2 |\langle z \rangle|^2
\end{aligned}$$

dove abbiamo inserito i valori medi

$$\langle w^2 \rangle = -\mu \bar{\nu} \quad \langle \bar{w}^2 \rangle = -\mu \nu \quad \langle |w|^2 \rangle = \mu^2 \quad \langle |w|^4 \rangle = \mu^2 (3\mu^2 - 1) \tag{5.38}$$

che si ottengono dall'espressione generale per l'integrale gaussiano (5.27). Otteniamo dunque per la varianza

$$\begin{aligned}
(\Delta N)^2 &= \langle \hat{N}^2 \rangle - (\langle \hat{N} \rangle)^2 = |\nu|^2 (3\mu^2 - 1 - |\nu|^2) + |\beta - 2\nu \langle z \rangle|^2 = \\
&= 2|\nu|^2 \mu^2 + |\langle \bar{z} \rangle \mu - \nu \langle z \rangle|^2
\end{aligned} \tag{5.39}$$

Introducendo la fase del valor medio di z

$$\langle z \rangle = |z| e^{-i\varphi} \tag{5.40}$$

otteniamo in definitiva

$$(\Delta N)^2 = |z|^2 (\cosh 2r - \sinh 2r \cos 2(\phi - \varphi)) + \frac{\sinh^2 2r}{2} \tag{5.41}$$

e

$$\langle N \rangle = \sinh^2 r + |z|^2 \quad (5.42)$$

Confrontiamo la varianza dello stato squeezed con quella di uno stato coerente. Per quest'ultimo

$$(\Delta N)^2|_{r=0} = |z|^2 = \langle N \rangle|_{r=0} \quad (5.43)$$

Dunque il rapporto tra la varianza di uno stato squeezed e quello di uno stato coerente con lo stesso valor medio di fotoni è

$$\frac{(\Delta N_{squeezed})^2}{(\Delta N_{coherent})^2} = \left(1 - \frac{\sinh^2 r}{\langle N \rangle}\right) (\cosh 2r - \sinh 2r \cos 2(\phi - \varphi))^2 + \frac{\sinh^2 2r}{2 \langle N \rangle} \quad (5.44)$$

Si noti che per numero medio $\langle N \rangle$ fissato, il parametro di squeezing è limitato dalla condizione $\sinh^2 r < \langle N \rangle$. Abbiamo

$$\text{per } \sinh^2 r \approx \langle N \rangle \gg 1 \Rightarrow \Delta N_{squeezed}^2 \approx 2 \langle N \rangle^2 \approx 2 \langle N \rangle \Delta N_{coherent}^2 \quad (5.45)$$

Per r piccoli invece la varianza dello stato squeezed può essere più piccola rispetto a quello di uno stato coerente con lo stesso numero di fotoni. Per dimostrarlo consideriamo per semplicità $\phi - \varphi = 0$: in questo caso otteniamo

$$\begin{aligned} \frac{(\Delta N_{squeezed})^2}{(\Delta N_{coherent})^2} &= \left(1 - \frac{\sinh^2 r}{\langle N \rangle}\right) e^{-4r} + \frac{\sinh^2 2r}{2 \langle N \rangle} = \\ &= e^{-4r} - \frac{1 + e^{-2r} + e^{-6r}}{4 \langle N \rangle} + \frac{e^{4r} + 5e^{-4r}}{8 \langle N \rangle} \end{aligned} \quad (5.46)$$

Gli estremi di questa funzione di r sono dati da

$$(8 \langle N \rangle + 5) x = 1 + \frac{1}{x^3} + 3x^2 \quad x \equiv e^{-2r} \quad (5.47)$$

Per $\langle N \rangle > 1$ la soluzione di questa equazione con $0 < x < 1$ è

$$x_{min} = e^{-2r_{min}} \approx \frac{1}{(2 \langle N \rangle + 5)^{\frac{1}{4}}} \quad (5.48)$$

Questo valore di r_{min} è nel limite dettato dalla condizione $\sinh^2 r \leq \langle N \rangle$ per $\langle N \rangle$ grandi. Il valore del rapporto delle varianze per questo valore del parametro di squeezing r e per $\phi = \varphi$ è, per $\langle N \rangle \gg 1$

$$\frac{(\Delta N_{squeezed})^2}{(\Delta N_{coherent})^2} \Big|_{\substack{r=r_{min} \\ \phi=\varphi}} \approx \frac{1}{\sqrt{2 \langle N \rangle}} \quad (5.49)$$

5.3 Amplificatore parametrico degenere

Consideriamo il sistema

$$H = \hbar\omega a^\dagger a - \frac{i\hbar}{2} (f(t) a^2 - \bar{f}(t) (a^\dagger)^2) \quad (5.50)$$

con $f(t)$ funzione classica dipendente dal tempo. Il cosiddetto modello per l'amplificatore parametrico degenere corrisponde al caso particolare

$$f(t) = \chi e^{2i\omega t} \quad (5.51)$$

che descrive il processo di distruzione ed annichilazione di due fotoni di frequenza ω in un mezzo con una suscettibilità non-lineare χ . L'equazione di Schrödinger in rappresentazione olomorfa nella pittura di interazione è

$$i\hbar \partial_t \psi(z, t) = -\frac{i\hbar}{2} (f(t) e^{-2i\omega t} \partial_z^2 - \bar{f}(t) e^{2i\omega t} z^2) \psi(z, t) \quad (5.52)$$

che dopo la sostituzione

$$\psi(z, t) = e^{\chi(z, t)} \quad (5.53)$$

diventa

$$\partial_t \chi(z, t) = -\phi(t) (\partial_z^2 \chi + (\partial_z \chi)^2) + \bar{\phi}(t) z^2 \quad (5.54)$$

dove abbiamo posto

$$\phi(t) \equiv \frac{1}{2} f(t) e^{-2i\omega t} \quad (5.55)$$

Espandiamo $\chi(z, t)$ in serie di potenze di z

$$\chi(z, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n(t) z^n \quad (5.56)$$

Il sistema di equazioni risultanti per le $a_n(t)$ è

$$\begin{aligned} \dot{a}_n(t) = & \delta_{n,2} \bar{\phi}(t) + \\ & -\phi(t) [(n+1)(n+2) a_{n+2} + \sum_{k=0}^n (k+1)(n-k+1) a_{k+1} a_{n-k+1}] \end{aligned}$$

Da queste equazioni risulta che l'unica condizione iniziale per $\chi(z, t)$ *polinomiale* in z a $t = 0$ che resta polinomiale per tempi successivi $t > 0$ è quella

quadratica. Cerchiamo allora una soluzione dell'equazione di evoluzione della forma

$$\chi(z, t) = \frac{1}{2} \alpha(t) z^2 + \beta(t) z + \gamma(t) \quad (5.57)$$

Le equazioni per α, β, γ sono

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \dot{\alpha}(t) &= \bar{\phi}(t) - \phi(t) \alpha^2 \\ \dot{\beta}(t) &= -2 \phi(t) \alpha \beta \\ \dot{\gamma}(t) &= -\bar{\phi}(t) (\beta^2 + \alpha) \end{aligned}$$

Consideriamo a questo punto il caso particolare corrispondente all'amplificatore parametrico degenere, (5.51):

$$\phi(t) = \frac{\chi}{2} \quad (5.58)$$

L'equazione per α diventa separabile. Prendiamo come condizione iniziale uno stato coerente:

$$\alpha(0) = 0 \quad \beta(0) = \beta_0 \quad \gamma(0) = -\frac{1}{2} |\beta_0|^2 \quad (5.59)$$

Pertanto

$$\frac{1}{2} \log \frac{1 + \alpha(t)}{1 - \alpha(t)} = \chi t \quad (5.60)$$

ovvero

$$\alpha(t) = \tanh \chi t \quad (5.61)$$

e

$$\begin{aligned} \beta(t) &= \frac{\beta_0}{\cosh \chi t} \\ \gamma(t) &= -\frac{1}{2} |\beta_0|^2 - \frac{1}{2} \log \cosh \chi t - \frac{\beta_0^2}{2} \tanh \chi t \end{aligned}$$

La funzione d'onda ad un tempo t è dunque

$$\psi(z, t) = \frac{1}{\sqrt{\cosh \chi t}} e^{-\frac{1}{2} |\beta_0|^2 - \frac{\beta_0^2}{2} \tanh \chi t + \frac{1}{2} z^2 \tanh \chi t + \frac{\beta_0}{\cosh \chi t} z} \quad (5.62)$$

che è uno stato squeezed con fattori di squeezing μ, ν e β dati da

$$\nu = e^{2i\phi} \sinh r = -\sinh \chi t \quad \mu = \cosh r = \cosh \chi t \quad \beta = \beta_0 \quad (5.63)$$

6 Le disuguaglianze di Bell

Si consideri un sistema di spin nullo che decade in due fotoni che, in virtù alla conservazione del momento e del momento angolare, hanno impulsi opposti e stessa polarizzazione. I due fotoni sono rilevati da due misuratori di polarizzazione posti a grande distanza uno d'altro. Siano $a_{\pm}, a_{\pm}^{\dagger}$ gli operatori di distruzione e creazione corrispondenti agli stati di polarizzazione e all'impulso di uno dei due fotoni, e $b_{\pm}, b_{\pm}^{\dagger}$ quelli corrispondenti al fotone che passa attraverso il secondo rivelatore. Lo stato dei fotoni prodotti nel decadimento è

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_{+}^{\dagger} b_{+}^{\dagger} + a_{-}^{\dagger} b_{-}^{\dagger})|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1, 0, 1, 0\rangle + |0, 1, 0, 1\rangle) \quad (6.1)$$

dove abbiamo indicato anche i numeri di occupazione degli stati. Supponiamo di poter ruotare i due polaroid di angoli θ_1 e θ_2 in modo che gli stati misurati dai due rivelatori ruotati siano, rispettivamente, quelli corrispondenti a

$$\begin{aligned} c_{+}(\theta_1) &= a_{+} \cos \theta_1 + a_{-} \sin \theta_1 \\ c_{-}(\theta_1) &= -a_{+} \sin \theta_1 + a_{-} \cos \theta_1 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} d_{+}(\theta_2) &= b_{+} \cos \theta_2 + b_{-} \sin \theta_2 \\ d_{-}(\theta_2) &= -b_{+} \sin \theta_2 + b_{-} \cos \theta_2 \end{aligned}$$

Siano

$$I_{\pm}^{\pm} = c_{\pm}^{\dagger}(\theta_1) c_{\pm}(\theta_1) \quad I_{\pm}^{\pm} = d_{\pm}^{\dagger}(\theta_2) d_{\pm}(\theta_2) \quad (6.2)$$

gli operatori che misurano le intensità fotoniche associate ai diversi stati dei due fotoni. Siamo interessati ad una misura di correlazione tra gli stati dei fotoni misurati dai due rivelatori. A questo scopo consideriamo il valor medio

$$E(\theta_1, \theta_2) = \frac{\langle \psi | (I_1^+ - I_1^-) (I_2^+ - I_2^-) | \psi \rangle}{\langle \psi | (I_1^+ + I_1^-) (I_2^+ + I_2^-) | \psi \rangle} \quad (6.3)$$

Abbiamo

$$\begin{aligned} I_1^+ &= (a_{+}^{\dagger} \cos \theta_1 + a_{-}^{\dagger} \sin \theta_1) (a_{+} \cos \theta_1 + a_{-} \sin \theta_1) = \\ &= N_a^+ \cos^2 \theta_1 + N_a^- \sin^2 \theta_1 + (a_{+}^{\dagger} a_{-} + a_{-}^{\dagger} a_{+}) \cos \theta_1 \sin \theta_1 \\ I_1^- &= (a_{-}^{\dagger} \cos \theta_1 - a_{+}^{\dagger} \sin \theta_1) (a_{-} \cos \theta_1 - a_{+} \sin \theta_1) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= N_a^- \cos^2 \theta_1 + N_a^+ \sin^2 \theta_1 - (a_+^\dagger a_- + a_-^\dagger a_+) \cos \theta_1 \sin \theta_1 \\
I_2^+ &= (b_+^\dagger \cos \theta_2 + b_-^\dagger \sin \theta_2) (b_+ \cos \theta_2 + b_- \sin \theta_2) = \\
&= N_b^+ \cos^2 \theta_2 + N_b^- \sin^2 \theta_2 + (b_+^\dagger b_- + b_-^\dagger b_+) \cos \theta_2 \sin \theta_2 \\
I_2^- &= (b_-^\dagger \cos \theta_2 - b_+^\dagger \sin \theta_2) (b_- \cos \theta_2 - b_+ \sin \theta_2) = \\
&= N_b^- \cos^2 \theta_2 + N_b^+ \sin^2 \theta_2 - (b_+^\dagger b_- + b_-^\dagger b_+) \cos \theta_2 \sin \theta_2
\end{aligned}$$

dove abbiamo denotato con $N_{a,b}^\pm$ il numero di fotoni negli stati di polarizzazione corrispondenti a $\theta_1 = \theta_2 = 0$. Abbiamo

$$\begin{aligned}
(I_1^+ - I_1^-)|\psi\rangle &= ((N_a^+ - N_a^-) \cos 2\theta_1 + (a_+^\dagger a_- + a_-^\dagger a_+) \sin 2\theta_1)|\psi\rangle = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos 2\theta_1 (|1, 0, 1, 0\rangle - |0, 1, 0, 1\rangle) + \\
&\quad + \sin 2\theta_1 (|0, 1, 1, 0\rangle + |1, 0, 0, 1\rangle)) \\
(I_2^+ - I_2^-)|\psi\rangle &= ((N_b^+ - N_b^-) \cos 2\theta_2 + (b_+^\dagger b_- + b_-^\dagger b_+) \sin 2\theta_2)|\psi\rangle = \\
&= \frac{1}{\sqrt{2}}(\cos 2\theta_2 (|1, 0, 1, 0\rangle - |0, 1, 0, 1\rangle) + \\
&\quad + \sin 2\theta_2 (|1, 0, 0, 1\rangle + |0, 1, 1, 0\rangle))
\end{aligned}$$

Deduciamo quindi

$$\begin{aligned}
E(\theta_1, \theta_2) &= \langle\psi|(I_2^+ - I_2^-)(I_1^+ - I_1^-)|\psi\rangle = \\
&= \cos 2\theta_1 \cos 2\theta_2 + \sin 2\theta_1 \sin 2\theta_2 = \cos 2(\theta_1 - \theta_2) \quad (6.4)
\end{aligned}$$

Consideriamo ora la seguente funzione dipendente da 4 angoli

$$B = E(\theta_1, \theta_2) - E(\theta_1, \theta'_2) + E(\theta'_1, \theta'_2) + E(\theta'_1, \theta_2) \quad (6.5)$$

Determiniamo il massimo di questa funzione. Le condizioni di estremalità di B rispetto agli angoli sono

$$\begin{aligned}
\sin 2(\theta_1 - \theta_2) &= \sin 2(\theta_1 - \theta'_2) \\
\sin 2(\theta_1 - \theta_2) &= -\sin 2(\theta'_1 - \theta_2) \\
\sin 2(\theta'_1 - \theta'_2) &= -\sin 2(\theta'_1 - \theta_2) \\
\sin 2(\theta_1 - \theta'_2) &= \sin 2(\theta'_1 - \theta'_2) \quad (6.6)
\end{aligned}$$

Queste equazioni sono invarianti per uno shift simultaneo di tutti gli angoli (che corrisponde all'invarianza del problema per rotazioni di tutto l'apparato intorno all'asse di propagazione dei fotoni). Solo tre delle equazioni

sono indipendenti . Senza perdita di generalità possiamo pertanto porre, per esempio,

$$\theta_2 = 0 \quad (6.7)$$

La prima delle equazioni (6.6) ha due soluzioni. Una soluzione è

$$\theta'_2 = 0 \quad (6.8)$$

Con questa scelta, le altre equazioni implicano $\sin 2\theta_1 = \sin 2\theta'_1 = 0$ e pertanto ai valori seguenti per il parametro di Bell

$$B = 2 \cos 2\theta'_1 = \pm 2 \quad (6.9)$$

La *seconda* soluzione della prima delle equazioni (6.6) è

$$2\theta_1 = \pi - 2\theta_1 + 2\theta'_2 \quad (6.10)$$

ovvero

$$2\theta'_2 = 4\theta_1 - \pi \quad (6.11)$$

Anche la seconda equazione ammette due soluzioni. Una soluzione è

$$2\theta_1 = \pi + 2\theta'_1 \quad (6.12)$$

Questa soluzione porta a $\sin 2\theta_1 = \sin 2\theta'_1 = \sin 2(\theta'_1 - \theta'_2) = \sin 2(\theta_1 - \theta'_2) = 0$ e, ancora una volta, al valore per il parametro di Bell

$$B = \cos 2\theta_1 - \cos(\pi - 2\theta_1) + \cos(-2\theta_1) = \cos(2\theta_1 - \pi) = 2 \cos 2\theta_1 = \pm 2 \quad (6.13)$$

La *seconda* soluzione della seconda equazione è invece

$$\theta'_1 = -\theta_1 \quad (6.14)$$

Dunque

$$\sin 2(\theta'_1 - \theta'_2) = \sin(\pi - 6\theta_1) = \sin 6\theta_1 \quad (6.15)$$

Ma la terza delle equazioni (6.6) impone

$$\sin 2(\theta'_1 - \theta'_2) = \sin 2\theta_1 = \sin 6\theta_1 \quad (6.16)$$

Per questi valori degli angoli il parametro B diventa

$$B = 3 \cos 2\theta_1 - \cos 6\theta_1 \quad (6.17)$$

Soluzione della (6.16) sono di due tipi. Il primo tipo

$$\theta_1 = k \frac{\pi}{2} \quad (6.18)$$

con k intero, ha valori di B che sono ancora ± 2 . Le altre soluzioni sono

$$\theta_1 = \frac{\pi}{8} + \frac{k\pi}{4} \quad (6.19)$$

con k intero. I valori di B in corrispondenza di questi estremi sono i massimi e minimi globali. Il massimo è

$$B = 3 \cos \frac{\pi}{4} - \cos \frac{3\pi}{4} = 2\sqrt{2} \quad (6.20)$$

ed il minimo $B = -2\sqrt{2}$.

Questo risultato viola una disuguaglianza detta di Bell derivabile nell'ambito delle cosiddette teorie (classiche) di variabile nascosta. In queste teorie si assume che esistano delle variabili nascoste λ classiche caratterizzate da una distribuzione positiva di probabilità $\rho(\lambda)$. Il correlatore (6.3) avrebbe pertanto la seguente forma

$$E(\theta_1, \theta_2) = \frac{\int d\lambda \rho(\lambda) (I_1^+(\lambda, \theta_1) - I_1^-(\lambda, \theta_1)) (I_2^+(\lambda, \theta_2) - I_2^-(\lambda, \theta_2))}{\int d\lambda \rho(\lambda) (I_1^+(\lambda, \theta_1) + I_1^-(\lambda, \theta_1)) (I_2^+(\lambda, \theta_2) + I_2^-(\lambda, \theta_2))} \quad (6.21)$$

dove si sono introdotte le densità di fotoni $I_{1,2}^\pm(\lambda, \theta_{1,2})$ ai due rivelatori, che si sono supposte dipendenti dalle variabili nascoste ma non dall'orientazione del polaroid "lontano" (ipotesi di località). Facendo uso delle disuguaglianze di Schwartz si dimostra agevolmente che il correlatore "classico" (6.21) soddisfa la disuguaglianza

$$|E(\theta_1, \theta_2) - E(\theta_1, \theta'_2)| \leq 2 \pm [E(\theta'_1, \theta'_2) + E(\theta'_1, \theta_2)] \quad (6.22)$$

Da questa relazione si deriva la disuguaglianza di Bell

$$|B| \leq 2 \quad (6.23)$$

che è dunque violata dal risultato quantistico (6.20) (che è direttamente verificato sperimentalmente).