

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

Scuola di Scienze
Dipartimento di Fisica e Astronomia
Corso di Laurea in Fisica

**TEORIA VARIAZIONALE
CON ALCUNE APPLICAZIONI
IN FISICA ATOMICA E NUCLEARE**

Relatore:
Prof. Roberto Zucchini

Presentata da:
Lorenzo Di Meco

Anno Accademico 2018/2019

Ai miei genitori

Sommario

Il metodo variazionale è uno schema computazionale che permette il calcolo approssimato dell'energia e della funzione d'onda dello stato fondamentale di una grande varietà di sistemi quantistici che compaiono in fisica molecolare, atomica e nucleare. In questa tesi vengono illustrati il metodo variazionale e le sue modalità di implementazione. Vengono poi descritte diverse applicazioni: lo studio di alcuni sistemi atomici, quali l'atomo di idrogeno, di elio e l'atomo muonico, e del deutone, per ricavarne un'approssimazione dell'autovalore di energia dello stato fondamentale; si studia infine l'interazione tra nucleoni per stimare il raggio d'azione del potenziale di Yukawa e le condizioni per l'esistenza di stati legati.

Indice

Introduzione	2
1 Teoria variazionale	3
2 Applicazioni del metodo variazionale	8
2.1 Energia media	8
2.2 Una verifica elementare: l'atomo di idrogeno	9
2.3 Atomo di elio	11
2.4 Atomo muonico	16
2.5 Modello a forza centrale del deutone	23
2.6 Stati legati di nucleoni	26
A Funzione Gamma di Eulero	30
B Espansione in armoniche sferiche	31
Bibliografia	32

Introduzione

Nello studio quanto – meccanico della maggior parte dei sistemi fisici è necessario l'utilizzo di metodi di approssimazione [9]. Storicamente fu di grande interesse la risoluzione del problema agli autovalori dell'Hamiltoniana dell'atomo di elio, per determinarne l'energia dello stato fondamentale. Al giorno d'oggi il valore di tale energia è uno dei più accurati tra i risultati ottenuti in meccanica quantistica tramite metodi di approssimazione [1].

La teoria perturbativa è applicabile quando l'Hamiltoniana del sistema in esame può essere espressa come somma di una Hamiltoniana imperturbata, di cui si conoscono le soluzioni del problema agli autovalori, e di una perturbazione che è piccola, in un senso appropriato, rispetto alla Hamiltoniana imperturbata. Quando questa condizione non è verificata, risulta molto più efficiente l'utilizzo del *metodo variazionale*, che restituisce valori approssimati molto affidabili dell'autovalore di energia dello stato fondamentale del sistema, ma risulta meno preciso nella trattazione degli stati eccitati [11].

Il metodo variazionale prevede la costruzione di un *funzionale di energia* determinato da una *funzione d'onda di prova* che dipende da un insieme di uno o più parametri e la cui struttura è ipotizzata sulla base di considerazioni di natura fisica sul sistema, come ad esempio il comportamento asintotico. Dalla scelta del ket di prova deriva il grado di efficacia del metodo.

In questo lavoro di tesi è stata dapprima verificata l'affidabilità del metodo variazionale applicandolo a un sistema di cui si conosca la soluzione esatta del problema agli autovalori: l'atomo di idrogeno. Sono state successivamente presentate importanti applicazioni in fisica atomica, quali lo studio dell'atomo di elio e dell'atomo muonico, e in fisica nucleare, attraverso lo studio del deutone e degli stati legati tra nucleoni interagenti tramite un potenziale di Yukawa.

Capitolo 1

Teoria variazionale

L'idea di partenza del *metodo variazionale* è costruire un funzionale definito sullo spazio di Hilbert dei ket del sistema preso in esame, i cui ket critici siano soluzioni del problema agli autovalori dell'Hamiltoniana del sistema stesso [11].

Si definisce quindi il funzionale di energia

$$\mathcal{E}[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}, \quad (1.0.1)$$

definito per ogni ket non nullo, non necessariamente normalizzato; fisicamente tale funzionale corrisponde all'energia media di un sistema il cui stato è descritto dal ket $|\psi\rangle / \sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}$.

Un ket non nullo $|\bar{\psi}\rangle$ è detto *ket critico* di $\mathcal{E}[\psi]$ se la variazione prima di $\mathcal{E}[\psi]$ si annulla in $|\bar{\psi}\rangle$, ossia se vale

$$\delta\mathcal{E}[\bar{\psi}] = 0. \quad (1.0.2)$$

Si dice quindi che il funzionale di energia $\mathcal{E}[\psi]$ è stazionario in $|\bar{\psi}\rangle$.

Questo accade precisamente quando $|\bar{\psi}\rangle$ è soluzione dell'equazione non lineare

$$\hat{H}|\bar{\psi}\rangle - |\bar{\psi}\rangle \mathcal{E}[\bar{\psi}] = 0. \quad (1.0.3)$$

Dimostrazione. La variazione prima di $\mathcal{E}[\psi]$ per una variazione infinitesima $|\delta\psi\rangle$ di $|\psi\rangle$ risulta essere

$$\delta\mathcal{E}[\psi] = \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \left(\langle \delta\psi | \hat{H} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle \right) - \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} (\langle \delta\psi | \psi \rangle + \langle \psi | \delta\psi \rangle) \quad (1.0.4)$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \left[\langle \delta\psi | \left(\hat{H} | \psi \rangle - | \psi \rangle \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right) + \left(\langle \psi | \hat{H} - \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \langle \psi | \right) | \delta\psi \rangle \right] \\
&= \frac{1}{\langle \psi | \psi \rangle} \left[\langle \delta\psi | \left(\hat{H} | \psi \rangle - | \psi \rangle \mathcal{E}[\psi] \right) + \left(\langle \psi | \hat{H} - \mathcal{E}[\psi] \langle \psi | \right) | \delta\psi \rangle \right] \\
&= \frac{2}{\langle \psi | \psi \rangle} \operatorname{Re} \left[\langle \delta\psi | \left(\hat{H} | \psi \rangle - | \psi \rangle \mathcal{E}[\psi] \right) \right].
\end{aligned}$$

L'annullamento di $\delta\mathcal{E}[\psi]$ è imposto per un ket $|\delta\psi\rangle$ arbitrario; da (1.0.4) risulta quindi

$$\operatorname{Re} \left[\langle \delta\psi | \left(\hat{H} | \psi \rangle - | \psi \rangle \mathcal{E}[\psi] \right) \right] = 0. \quad (1.0.5)$$

Dato che il ket $|\delta\psi\rangle$ è arbitrario, si può sostituire nel calcolo con $|\delta\psi\rangle i$, ottenendo

$$\operatorname{Im} \left[\langle \delta\psi | \left(\hat{H} | \psi \rangle - | \psi \rangle \mathcal{E}[\psi] \right) \right] = 0. \quad (1.0.6)$$

Combinando (1.0.5) e (1.0.6) si ha

$$\langle \delta\psi | \left(\hat{H} | \psi \rangle - | \psi \rangle \mathcal{E}[\psi] \right) = 0. \quad (1.0.7)$$

Data l'arbitrarietà di $|\delta\psi\rangle$ si dimostra (1.0.3). \square

Dall'equazione (1.0.3), un ket $|\psi\rangle$ è un autoket di \hat{H} se e solo se è un ket critico di $\mathcal{E}[\psi]$. L'autovalore di energia corrispondente coincide con il valore stazionario del funzionale $\mathcal{E}[\psi]$.

Dimostrazione. Si dimostra la prima implicazione, assumendo che $|\bar{\psi}\rangle$ sia un autoket di \hat{H} relativo all'autovalore w . Allora vale

$$\hat{H} |\bar{\psi}\rangle - |\bar{\psi}\rangle w = 0. \quad (1.0.8)$$

Deriva quindi che

$$w = \frac{\langle \bar{\psi} | \hat{H} | \bar{\psi} \rangle}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} = \mathcal{E}[\bar{\psi}]. \quad (1.0.9)$$

Inserendo (1.0.9) in (1.0.8) si trova che $|\bar{\psi}\rangle$ risolve (1.0.3) ed è quindi un ket critico di $\mathcal{E}[\psi]$.

Per l'implicazione inversa, si assume che $|\bar{\psi}\rangle$ sia un ket critico di $\mathcal{E}[\psi]$, e risolva quindi (1.0.3). Ponendo

$$w = \mathcal{E}[\bar{\psi}], \quad (1.0.10)$$

l'equazione (1.0.3) assume la forma

$$\hat{H}|\bar{\psi}\rangle - |\bar{\psi}\rangle w = 0. \quad (1.0.11)$$

Il ket $|\bar{\psi}\rangle$ è dunque un autoket di \hat{H} relativo all'autovalore w . \square

In generale i ket critici di $\mathcal{E}[\psi]$ corrispondono a minimi o massimi o punti di sella di $\mathcal{E}[\psi]$ nello spazio dei ket. Un ket critico $|\bar{\psi}\rangle$ minimizza $\mathcal{E}[\psi]$ se la variazione seconda di $\mathcal{E}[\psi]$ in $|\bar{\psi}\rangle$ è definita non negativa, ossia se

$$\delta^2 \mathcal{E}[\bar{\psi}] \geq 0. \quad (1.0.12)$$

La condizione è soddisfatta quando $|\bar{\psi}\rangle$ è un autoket di \hat{H} relativo al più piccolo autovalore di energia w_0 .

Dimostrazione. Dall'equazione (1.0.4) si calcola la variazione seconda di $\mathcal{E}[\psi]$ per una variazione infinitesima $|\delta\psi\rangle$ di $|\psi\rangle$:

$$\begin{aligned} \delta^2 \mathcal{E}[\psi] &= -2 \frac{\langle \delta\psi | \psi \rangle + \langle \psi | \delta\psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle^2} \operatorname{Re} \left[\langle \delta\psi | (\hat{H} |\psi\rangle - |\psi\rangle \mathcal{E}[\psi]) \right] \\ &\quad + \frac{2}{\langle \psi | \psi \rangle} \operatorname{Re} \left[\langle \delta\psi | (\hat{H} |\delta\psi\rangle - |\delta\psi\rangle \mathcal{E}[\psi] - |\psi\rangle \delta \mathcal{E}[\psi]) \right] \\ &= -2 \frac{\operatorname{Re}(\langle \delta\psi | \psi \rangle)}{\langle \psi | \psi \rangle} \frac{2}{\langle \psi | \psi \rangle} \operatorname{Re} \left[\langle \delta\psi | (\hat{H} |\psi\rangle - |\psi\rangle \mathcal{E}[\psi]) \right] \\ &\quad + \frac{2}{\langle \psi | \psi \rangle} \operatorname{Re} \left[\langle \delta\psi | (\hat{H} |\delta\psi\rangle - |\delta\psi\rangle \mathcal{E}[\psi]) \right] - 2 \frac{\operatorname{Re}(\langle \delta\psi | \psi \rangle)}{\langle \psi | \psi \rangle} \delta \mathcal{E}[\psi] \\ &= -4 \frac{\operatorname{Re}(\langle \delta\psi | \psi \rangle)}{\langle \psi | \psi \rangle} \delta \mathcal{E}[\psi] + \frac{2}{\langle \psi | \psi \rangle} \left(\langle \delta\psi | \hat{H} |\delta\psi\rangle - \langle \delta\psi | \delta\psi \rangle \mathcal{E}[\psi] \right), \end{aligned} \quad (1.0.13)$$

dove si è usato il fatto che, essendo \hat{H} un operatore autoaggiunto, è anche hermitiano.

Calcolando la variazione in $|\bar{\psi}\rangle$, ket critico di $\mathcal{E}[\psi]$, vale (1.0.2), perciò

$$\delta^2 \mathbf{\epsilon}[\bar{\psi}] = \frac{2}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \left(\langle \delta\psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle - \langle \delta\psi | \delta\psi \rangle \mathbf{\epsilon}[\bar{\psi}] \right). \quad (1.0.14)$$

Si assuma che $|\bar{\psi}\rangle$ sia autoket di \hat{H} relativo al più piccolo autovalore di energia w_0 di \hat{H} . Siccome $\mathbf{\epsilon}[\bar{\psi}] = w_0$ da (1.0.9), si ha che

$$\delta^2 \mathbf{\epsilon}[\bar{\psi}] = \frac{2}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \left(\langle \delta\psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle - \langle \delta\psi | \delta\psi \rangle w_0 \right). \quad (1.0.15)$$

Sia $|n\rangle$ una base ortonormale parametrizzata da un insieme discreto di numeri quantici n e costituita da autoket di \hat{H} relativi ad autovalori w_n ; si ha quindi

$$\hat{H} |n\rangle = |n\rangle w_n, \quad (1.0.16)$$

$$\langle n' | n \rangle = \delta_{n'n}, \quad (1.0.17)$$

e la relazione di completezza

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{1}. \quad (1.0.18)$$

Essendo \hat{H} autoaggiunto, il teorema spettrale dice che

$$\hat{H} = \sum_n |n\rangle w_n \langle n|. \quad (1.0.19)$$

La variazione seconda di $\mathbf{\epsilon}[\psi]$ calcolata in $|\bar{\psi}\rangle$ si può quindi riscrivere nel modo seguente:

$$\begin{aligned} \delta^2 \mathbf{\epsilon}[\bar{\psi}] &= \frac{2}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \left(\langle \delta\psi | \hat{H} | \delta\psi \rangle - \langle \delta\psi | \delta\psi \rangle w_0 \right) \\ &= \frac{2}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \left(\langle \delta\psi | \sum_n |n\rangle w_n \langle n| | \delta\psi \rangle - \langle \delta\psi | \sum_n |n\rangle \langle n| | \delta\psi \rangle w_0 \right) \\ &= \frac{2}{\langle \bar{\psi} | \bar{\psi} \rangle} \sum_n | \langle \delta\psi | n \rangle |^2 (w_n - w_0) \geq 0, \end{aligned} \quad (1.0.20)$$

dato che w_0 è il più piccolo autovalore di energia; è quindi dimostrata la (1.0.12). \square

Si è visto che la ricerca di ket che risolvano l'equazione agli autovalori di un Hamiltoniana \hat{H} è un problema equivalente a quello di trovare dei ket critici di $\mathbf{\epsilon}[\psi]$. Questa

seconda procedura è tuttavia complicata quanto il problema agli autovalori stesso. Si ricorre quindi all'utilizzo di *ket di prova* che approssimino adeguatamente, in base alle proprietà fisiche del sistema in esame, i ket critici, e per i quali il valore del funzionale di energia $\mathcal{E}[\psi]$ approssimi bene l'autovalore di energia di \hat{H} [11].

Il risultato appena ottenuto suggerisce un metodo per determinare approssimativamente il più piccolo autovalore di energia di \hat{H} e il corrispondente autoket: si prende un ket di prova $|\psi(\lambda)\rangle$ dipendente da un insieme di uno o più parametri λ_i , considerando il funzionale di energia $\mathcal{E}[\psi]$ come una funzione nelle variabili λ_i , cioè

$$\mathcal{E}[\psi(\lambda)] = f(\lambda). \quad (1.0.21)$$

Si minimizza quindi il funzionale, cercando i valori $\bar{\lambda}$ dei parametri che risolvono

$$\frac{\partial f(\lambda)}{\partial \lambda_i} = 0, \quad (1.0.22)$$

ottenendo un insieme di soluzioni $\bar{\lambda}$, di cui si considerano quelle che forniscono il minimo valore di $f(\lambda)$, che formano un sottoinsieme di soluzioni $\bar{\lambda}_0$. Allora $f(\bar{\lambda}_0)$ è un'approssimazione per il più piccolo autovalore di energia w_0 , mentre i ket $|\psi(\bar{\lambda}_0)\rangle$ sono gli autoket di energia approssimati relativi a w_0 . L'esistenza di differenti soluzioni $\bar{\lambda}_0$ e l'indipendenza lineare dei ket corrispondenti $|\psi(\bar{\lambda}_0)\rangle$ determinano la degenerazione di w_0 [11].

L'efficacia del metodo è legata in gran parte dalla scelta del ket di prova $|\psi(\lambda)\rangle$; tale scelta dipende dal problema in esame e da considerazioni qualitative sulle proprietà fisiche del sistema, come ad esempio il comportamento asintotico.

Capitolo 2

Applicazioni del metodo variazionale

2.1 Energia media

Nella risoluzione del problema agli autovalori dei sistemi soggetti a un campo di forza centrale $U(r)$, tramite il metodo variazionale, risulta necessario il calcolo della loro energia media.

Si scrive la funzione d'onda del sistema $\psi(\mathbf{x})$ nella rappresentazione di Schrödinger:

$$\langle \mathbf{x} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{x}) = \psi(r) = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi(r)}{r} \quad (2.1.1)$$

dove il termine $1/\sqrt{4\pi}$ è l'armonica sferica $Y_{0,0}$, nel caso in cui $l = 0$.

Dunque la formula generale dell'energia media, sotto le citate condizioni, risulta essere

$$\langle H \rangle = E_{cin} + E_{pot} \quad (2.1.2)$$

dove

$$E_{cin} = \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty dr \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2, \quad (2.1.3)$$

$$E_{pot} = \int_0^\infty dr U(r) \chi^2(r). \quad (2.1.4)$$

Dimostrazione. Per definizione, l'energia media di un sistema con autofunzione $\psi(r)$ è

$$\begin{aligned}
\langle H \rangle &= \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle & (2.1.5) \\
&= \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \int_0^\infty d\vartheta d\varphi dr \sin \vartheta r^2 \psi^*(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right) \psi(r) \\
&= 4\pi \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{\chi(r)}{r} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{dr^2} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) \right. \right. \\
&\qquad \qquad \qquad \left. \left. + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{\chi(r)}{r} \right) \right] + \frac{U(r) \chi(r)}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{r} \right) \\
&= \int_0^\infty dr r^2 \frac{\chi(r)}{r} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{2\chi(r)}{r^3} - \frac{2}{r^2} \frac{d\chi(r)}{dr} + \frac{1}{r} \frac{d^2\chi(r)}{dr^2} \right. \right. \\
&\qquad \qquad \qquad \left. \left. - \frac{2\chi(r)}{r^3} + \frac{2}{r^2} \frac{d\chi}{dr} \right] + U(r) \frac{\chi(r)}{r} \right) \\
&= \int_0^\infty dr \chi(r) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi(r)}{dr^2} + U(r) \chi(r) \right) \\
&= \underbrace{-\frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty dr \chi(r) \frac{d^2\chi(r)}{dr^2}}_{E_{cin}} + \underbrace{\int_0^\infty dr U(r) \chi^2(r)}_{E_{pot}},
\end{aligned}$$

dove si è usato l'operatore laplaciano in coordinate sferiche, tenendo conto del fatto che la funzione d'onda dipende solo dalla coordinata r .

Si prova così (2.1.4). La dimostrazione per (2.1.3) si conclude integrando per parti il risultato appena ottenuto e considerando che la funzione $\chi(r)$ deve annullarsi in $r = 0$ e per $r \rightarrow \infty$, per garantire che la funzione d'onda $\psi(r)$ sia normalizzabile. \square

2.2 Una verifica elementare: l'atomo di idrogeno

Se la funzione d'onda di prova è scelta opportunamente, allora il metodo variazionale può fornire la soluzione esatta del problema agli autovalori del sistema allo stato fondamentale [10].

Si prenda come esempio il caso di un atomo idrogenoide, supponendo di non conoscere l'energia e la funzione d'onda dello stato fondamentale; da considerazioni di natura fisica si sceglie il ket di prova dipendente da un solo parametro, $|\psi(l)\rangle$, in modo tale che l'autofunzione abbia simmetria sferica e un decadimento esponenziale al crescere della distanza dal nucleo r . Tale ket avrà dunque la forma seguente:

$$\langle \mathbf{x} | \psi(l) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi l^3}} e^{-r/l}, \quad (2.2.1)$$

La funzione risulta normalizzata, infatti

$$\begin{aligned} \langle \psi(l) | \psi(l) \rangle &= \int d^3x |\langle \mathbf{x} | \psi(l) \rangle|^2 = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi d\vartheta \sin \vartheta \int_0^\infty dr r^2 \frac{1}{\pi l^3} e^{-2r/l} \\ &= \frac{4\pi}{\pi l^3} \left(\frac{l}{2}\right)^3 \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = \frac{\Gamma(3)}{2} = \frac{2!}{2} = 1, \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

dove si è usata la Funzione Gamma di Eulero (A.0.3) descritta in Appendice A.

Il funzionale di energia $\mathcal{E}[\psi]$, corrispondente all'energia media del sistema, può essere calcolato facendo uso di (2.1.2). Si utilizzino (2.1.3) e (2.1.4), dove in questo caso il potenziale centrale $U(r)$ è quello coulombiano generato dalla carica elettrica nucleare:

$$U(r) = -\frac{Ze^2}{r} \quad (2.2.3)$$

e la funzione $\chi(r)$ è definita come

$$\chi(r) = \frac{2}{\sqrt{l^3}} r e^{-r/l}. \quad (2.2.4)$$

Si ha dunque, da (A.0.3):

$$\begin{aligned} E_{cin} &= \frac{\hbar^2}{2m} \int_0^\infty dr \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2 = \frac{2\hbar^2}{ml^3} \int_0^\infty dr \left(e^{-r/l} - \frac{r}{l} e^{-r/l} \right)^2 \\ &= \frac{2\hbar^2}{ml^3} \int_0^\infty dr e^{-2r/l} \left(1 - \frac{2r}{l} + \frac{r^2}{l^2} \right) \\ &= \frac{2\hbar^2}{ml^3} \frac{l}{2} \int_0^\infty dx e^{-x} \left(1 - x + \frac{x^2}{4} \right) = \frac{\hbar^2}{ml^2} \left(\Gamma(1) - \Gamma(2) + \frac{\Gamma(3)}{4} \right) \\ &= \frac{\hbar^2}{ml^2} \left(0! - 1! + \frac{2!}{4} \right) = \frac{\hbar^2}{2ml^2}, \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

$$\begin{aligned} E_{pot} &= \int_0^\infty dr U(r) \chi^2(r) = -\frac{4Ze^2}{l^3} \int_0^\infty dr e^{-2r/l} r \\ &= -\frac{Ze^2}{l} \int_0^\infty dx e^{-x} x = -\frac{Ze^2}{l} \Gamma(2) = -\frac{Ze^2}{l}. \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

L'energia media del sistema ha quindi la seguente forma:

$$\langle H \rangle = E_{cin} + E_{pot} = \mathcal{E}[\psi] = \frac{\hbar^2}{2ml^2} - \frac{Ze^2}{l}; \quad (2.2.7)$$

si applica il metodo variazionale:

$$\frac{d\mathcal{E}[\psi(l)]}{dl} = -\frac{\hbar^2}{ml^3} + \frac{Ze^2}{l^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad \bar{l} = \frac{\hbar^2}{mZe^2} = \frac{r_B}{Z}. \quad (2.2.8)$$

dove r_B è il raggio di Bohr.

Si noti che, in questo caso particolare, la stima ottenuta coincide con la soluzione esatta del problema agli autovalori, infatti, inserendo (2.2.8) in (2.2.7) e in (2.2.1), si ottiene

$$\mathcal{E}[\psi(\bar{l})] = \frac{\hbar^2 Z^2}{2mr_B^2} - \frac{Z^2 e^2}{r_B} = -\frac{Z^2 e^2}{2r_B} = w_0, \quad (2.2.9)$$

$$\langle \mathbf{x} | \psi(\bar{l}) \rangle = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{r_B} \right)^{3/2} e^{-Zr/r_B} = \langle \mathbf{x} | 1, 0, 0 \rangle. \quad (2.2.10)$$

2.3 Atomo di elio

Usando il metodo variazionale, è possibile ottenere una stima dell'autovalore e dell'autofunzione di energia dello stato fondamentale dell'atomo di elio. Questa è una delle più importanti applicazioni della teoria variazionale.

L'atomo di elio è composto da due elettroni che si muovono nel campo elettrostatico di un nucleo di carica Ze , con $Z = 2$. La soluzione esatta di tale problema non è nota, a causa della complessità del sistema, che prevede un'interazione elettrostatica tra i due elettroni.

L'Hamiltoniana nel sistema del centro di massa risulta

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2\mu} + \frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r_1} - \frac{Ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{r_{12}}, \quad (2.3.1)$$

dove μ è la massa ridotta dei due elettroni, r_i è la distanza dal nucleo dell'elettrone i -esimo ($i = 1, 2$) e r_{12} è la distanza tra gli elettroni.

Si sceglie come funzione d'onda di prova dello stato fondamentale il prodotto di due autofunzioni idrogenoidi, che descrivono separatamente due elettroni nel campo di un nucleo di carica efficace $\xi e = (Z - \sigma)e$; nella rappresentazione di Schrödinger si ha

$$\langle \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 | \psi \rangle = \psi(r_1, r_2) = \frac{1}{\pi} \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^3 e^{-\frac{\xi}{r_B}(r_1+r_2)}, \quad (2.3.2)$$

dove il parametro σ descrive l'effetto di schermaggio della carica nucleare Ze prodotto dagli elettroni, e funge da parametro variazionale.

Il calcolo del funzionale (1.0.1), porta alla seguente formula:

$$\mathcal{E}[\psi(\sigma)] = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(Z^2 - \frac{5}{8}Z - \sigma^2 + \frac{5}{8}\sigma \right). \quad (2.3.3)$$

Dimostrazione. La scelta della costante di normalizzazione, ricordando la (2.2.10), assicura che la funzione d'onda scelta (2.3.2) risulti normalizzata.

Riarrangiando opportunamente la forma dell'Hamiltoniana (2.3.1), si ottiene:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\psi(\sigma)] = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle &= \left\langle \psi \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_1^2}{2\mu} - \frac{\xi e^2}{r_1} \right) \right| \psi \right\rangle + \left\langle \psi \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_2^2}{2\mu} - \frac{\xi e^2}{r_2} \right) \right| \psi \right\rangle \\ &\quad - \sigma e^2 \left\langle \psi \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi \right\rangle - \sigma e^2 \left\langle \psi \left| \frac{1}{r_2} \right| \psi \right\rangle + e^2 \left\langle \psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi \right\rangle. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Si noti che ciascuno dei primi due termini può essere calcolato tramite il problema agli autovalori di uno atomo idrogenoide allo stato fondamentale, con numero atomico efficace ξ , ed è quindi dato da

$$\left\langle \psi(\xi) \left| \left(\frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2\mu} - \frac{\xi e^2}{r_i} \right) \right| \psi(\xi) \right\rangle = w_0(\xi) = -\frac{\xi^2 e^2}{2r_B} = -\frac{\mu \xi^2 e^4}{2\hbar^2}. \quad (2.3.5)$$

Il terzo e quarto termine della (2.3.4) forniscono un contributo identico che, utilizzando la Funzione Gamma di Eulero (A.0.3), risulta

$$\begin{aligned} -\sigma e^2 \left\langle \psi \left| \frac{1}{r_1} \right| \psi \right\rangle &= -\sigma e^2 \int d^3x_1 \int d^3x_2 \frac{|\psi(r_1, r_2)|^2}{r_1} \\ &= -\sigma e^2 4\pi \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \frac{1}{r_1} 4\pi \int_0^\infty dr_2 r_2^2 \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^6 e^{-\frac{2\xi}{r_B}(r_1+r_2)} \\ &= -16\sigma e^2 \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1 e^{-\frac{2\xi}{r_B}r_1} \int_0^\infty dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B}r_2} \\ &= -16\sigma e^2 \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dx_1 \left(\frac{r_B}{2\xi} \right)^2 x_1 e^{-x_1} \int_0^\infty dx_2 \left(\frac{r_B}{2\xi} \right)^3 x_2^2 e^{-x_2} \\ &= -\sigma e^2 \frac{\xi}{2r_B} \Gamma(2) \Gamma(3) = -\frac{\sigma e^2 \xi}{r_B} = -\sigma \frac{\mu \xi e^4}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

Per il calcolo dell'ultimo termine si richiamano i risultati in Appendice B: utilizzando l'espansione (B.0.4) di $1/r_{12}$ in polinomi di Legendre,

$$\begin{aligned}
\left\langle \psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi \right\rangle &= \int d^3x_1 \int d^3x_2 \frac{|\psi(r_1, r_2)|^2}{r_{12}} & (2.3.7) \\
&= \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \oint d\Omega_1 \\
&\quad \left[\int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 |\psi(r_1, r_2)|^2 \oint d\Omega_2 \frac{1}{r_{12}} \right. \\
&\quad \left. + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 |\psi(r_1, r_2)|^2 \oint d\Omega_2 \frac{1}{r_{12}} \right] \\
&= \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 \oint d\Omega_1 \\
&\quad \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B}(r_1+r_2)} \right. \\
&\quad \left. \oint d\Omega_2 \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \left(\frac{r_2}{r_1} \right)^l Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2) \right. \\
&\quad \left. + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B}(r_1+r_2)} \right. \\
&\quad \left. \oint d\Omega_2 \sum_{l=0}^\infty \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \left(\frac{r_1}{r_2} \right)^l Y_{lm}^*(\Omega_1) Y_{lm}(\Omega_2) \right].
\end{aligned}$$

Si noti che l'armonica sferica $Y_{00}(\Omega) = 1/\sqrt{4\pi}$ è una costante reale. Inserendo quindi nell'integrale il termine $\sqrt{4\pi} Y_{00}(\Omega_2) = 1$, e sfruttando (B.0.1), che esprime la relazione di ortonormalità delle armoniche sferiche sull'angolo solido, si noti che l'unico contributo della sommatoria non nullo per il calcolo dell'integrale è quello corrispondente agli indici $l = 0$ e $m = 0$; si ha perciò

$$\begin{aligned}
\left\langle \psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi \right\rangle &= \frac{1}{\pi^2} \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B}r_1} \oint d\Omega_1 & (2.3.8) \\
&\quad \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 4\pi \sqrt{4\pi} Y_{00}(\Omega_1) e^{-\frac{2\xi}{r_B}r_2} \right. \\
&\quad \left. + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2^2 4\pi \sqrt{4\pi} Y_{00}(\Omega_1) e^{-\frac{2\xi}{r_B}r_2} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{4}{\pi} \left(\frac{\xi}{r_B} \right)^6 4\pi \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B} r_1} \\
&\quad \left[\frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} dr_2 r_2^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B} r_2} + \int_{r_1}^\infty dr_2 r_2 e^{-\frac{2\xi}{r_B} r_2} \right] \\
&= \frac{1}{4} \left(\frac{2\xi}{r_B} \right)^6 \int_0^\infty dr_1 r_1^2 e^{-\frac{2\xi}{r_B} r_1} \\
&\quad \left[\frac{1}{r_1} \left(\frac{r_B}{2\xi} \right)^3 \int_0^{\frac{2\xi}{r_B} r_1} dx x^2 e^{-x} + \left(\frac{r_B}{2\xi} \right)^2 \int_{\frac{2\xi}{r_B} r_1}^\infty dx x e^{-x} \right] \\
&= \frac{\xi}{2r_B} \int_0^\infty dy y^2 e^{-y} \left[\frac{1}{y} \int_0^y dx x^2 e^{-x} + \int_y^\infty dx x e^{-x} \right].
\end{aligned}$$

I due integrali nella variabile x si possono risolvere tramite le funzioni di Eulero incomplete (A.0.7) e (A.0.6) descritte in Appendice A, da cui

$$\begin{aligned}
\left\langle \psi \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \psi \right\rangle &= \frac{\xi}{2r_B} \int_0^\infty dy y^2 e^{-y} \left[\frac{1}{y} \gamma(3, y) + \Gamma(2, y) \right] \tag{2.3.9} \\
&= \frac{\xi}{2r_B} \int_0^\infty dy y^2 e^{-y} \left[\frac{2}{y} - \frac{2}{y} e^{-y} \left(1 + y + \frac{y^2}{2} \right) + e^{-y} (1 + y) \right] \\
&= \frac{\xi}{2r_B} \left[2 \int_0^\infty dy y e^{-y} - 2 \int_0^\infty dy y e^{-2y} \left(1 + y + \frac{y^2}{2} \right) + \int_0^\infty dy y^2 e^{-2y} (1 + y) \right] \\
&= \frac{\xi}{2r_B} \left[2 \int_0^\infty dy y e^{-y} - \frac{1}{2} \int_0^\infty dz z e^{-z} \left(1 + \frac{z}{2} + \frac{z^2}{8} \right) + \frac{1}{8} \int_0^\infty dz z^2 e^{-z} \left(1 + \frac{z}{2} \right) \right] \\
&= \frac{\xi}{2r_B} \left[2\Gamma(2) - \frac{1}{2} \left(\Gamma(2) + \frac{\Gamma(3)}{2} + \frac{\Gamma(4)}{8} \right) + \frac{1}{8} \left(\Gamma(3) + \frac{\Gamma(4)}{2} \right) \right] \\
&= \frac{\xi}{2r_B} \frac{10}{8} = \frac{5}{8} \frac{\xi}{r_B} = \frac{5}{8} \frac{\mu\xi e^2}{\hbar^2},
\end{aligned}$$

dove si è fatto uso della Funzione Gamma di Eulero (A.0.3).

Si conclude la dimostrazione sommando tutti i contributi:

$$\begin{aligned}
\mathbf{\epsilon}[\psi(\sigma)] &= -\frac{\mu\xi^2 e^4}{\hbar^2} - 2\sigma \frac{\mu\xi e^4}{\hbar^2} + \frac{5}{8} \frac{\mu\xi e^4}{\hbar^2} \tag{2.3.10} \\
&= -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left[(Z - \sigma)^2 + 2\sigma(Z - \sigma) - \frac{5}{8}(Z - \sigma) \right] \\
&= -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(Z^2 - \frac{5}{8}Z - \sigma^2 + \frac{5}{8}\sigma \right),
\end{aligned}$$

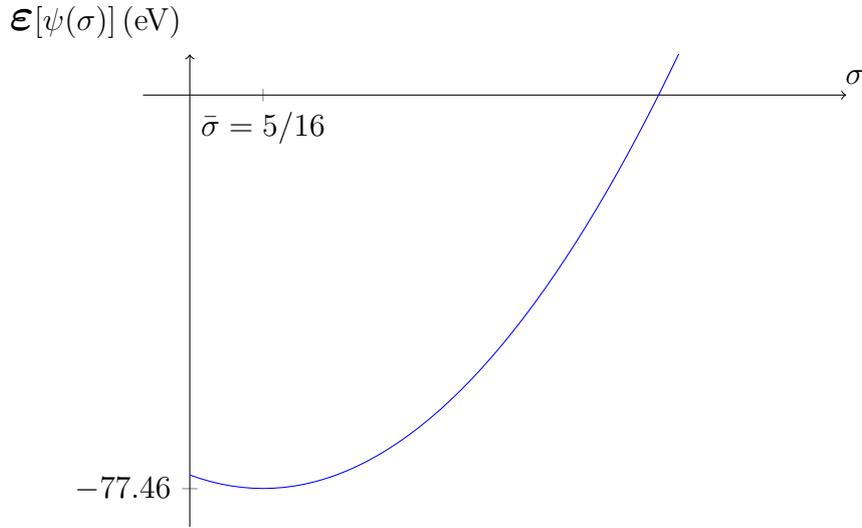


Figura 2.1: Energia media dell'atomo di elio al variare del parametro σ . Si noti il punto stazionario di minimo.

che risulta coincidente con (2.3.3). □

Si risolve quindi l'equazione $d\mathbf{E}[\psi(\sigma)]/d\sigma = 0$ che, da (2.3.10), porta a

$$\frac{d}{d\sigma}\mathbf{E}[\psi(\sigma)] = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(-2\sigma + \frac{5}{8}\right) = 0. \quad (2.3.11)$$

L'unica soluzione è

$$\bar{\sigma} = \frac{5}{16}. \quad (2.3.12)$$

La carica efficace risulta dunque $\xi e = (27/16)e$.

Andando a sostituire il valore ottenuto in $\mathbf{E}[\psi(\sigma)]$, si ottiene la predizione dell'energia del livello fondamentale dell'elio secondo la teoria variazionale:

$$w_1 \simeq \mathbf{E}[\psi(\bar{\sigma})] = -\frac{\mu e^4}{\hbar^2} \left(\frac{27}{16}\right)^2 \simeq -77.46 \text{ eV}, \quad (2.3.13)$$

mostrata in Figura (2.1).

Il risultato deve essere comparato con il valore sperimentale $w_{exp} \simeq -79.0 \text{ eV}$, di valore minore come previsto dalla teoria.

Aumentando la "flessibilità" della funzione d'onda di prova si ottengono valori di $\mathbf{E}[\psi]$ sempre più vicini all'autovalore esatto di energia. In particolare, avendo la funzione di

prova ψ_σ dipendente da un solo parametro variazionale σ , si esegue il prodotto con un polinomio di un certo grado nelle variabili r_1 , r_2 e r_{12} , i cui coefficienti sono anch'essi trattati come parametri variazionali; il valore del funzionale di energia in tal modo diminuisce e si avvicina a quello esatto, a mano a mano che la complessità del polinomio aumenta [8].

2.4 Atomo muonico

Il muone è un leptone, particella fondamentale dotata della stessa carica elettrica dell'elettrone, ma con massa μ circa 207 volte maggiore di quella elettronica m . Questo comporta una differente trattazione nello studio dello ione idrogenoide muonico, costituito da un nucleo con attorno un muone al posto dell'elettrone.

Invece delle unità atomiche elettroniche di lunghezza ed energia

$$r_B = \frac{\hbar^2}{m e^2} \simeq 5.29 \cdot 10^{-9} \text{ cm}, \quad w_e = \frac{m e^4}{\hbar^2} \simeq 27.2 \text{ eV}, \quad (2.4.1)$$

si usano quindi apposite *unità muoniche* [4]:

$$r_\mu = \frac{m}{\mu} r_B \simeq 2.56 \cdot 10^{-11} \text{ cm}, \quad w_\mu = \frac{\mu}{m} w_e \simeq 5.63 \text{ keV}. \quad (2.4.2)$$

Nello stato fondamentale $1s$ il raggio medio dell'orbitale di un atomo con numero atomico Z è proporzionale a r_B/Z per l'elettrone, a r_μ/Z per il muone. Si prenda in considerazione un nucleo con $Z = 81$, di raggio $R \simeq 7.05 \cdot 10^{-13} \text{ cm}$; il rapporto tra il raggio nucleare e i raggi medi degli orbitali, elettronico e muonico rispettivamente, sono dunque

$$\frac{R}{r_B/Z} \simeq 1.08 \cdot 10^{-2}, \quad (2.4.3)$$

$$\frac{R}{r_\mu/Z} \simeq 2.23. \quad (2.4.4)$$

Si vede perciò che, come conseguenza della grande differenza di massa tra elettrone e muone, il primo ha un raggio orbitale medio circa 100 volte più grande di quello nucleare e la sua funzione d'onda sarà determinata dal potenziale Coulombiano esterno al nucleo, mentre il secondo ha un raggio orbitale medio dello stesso ordine di grandezza del raggio

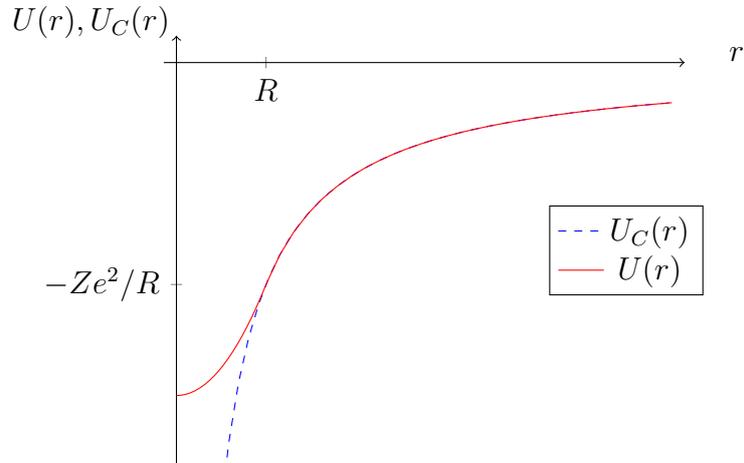


Figura 2.2: Rappresentazione del potenziale $U(r)$ sentito dal muone, confrontato con il potenziale Coulombiano $U_C(r)$.

nucleare. Vi è perciò una probabilità considerevole che il muone si trovi all'interno del nucleo, e la sua funzione d'onda corrisponderà quindi non più a un potenziale centrale Coulombiano generato da una carica idealmente puntiforme, bensì a un potenziale generato da una distribuzione di carica spaziale a simmetria sferica di raggio finito.

È possibile modellizzare il nucleo come una sfera solida uniformemente carica di raggio R con carica totale Ze . La densità di carica del nucleo ha quindi la forma radiale

$$\rho_N(\mathbf{x}) = \rho_N(r) = \frac{3Ze}{4\pi R^3} \theta(R - r), \quad (2.4.5)$$

dove $\theta(x)$ è la funzione a gradino di Heaviside, definita nel modo seguente:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x < 0 \\ 1, & \text{se } x \geq 0 \end{cases}. \quad (2.4.6)$$

L'energia potenziale elettrostatica dell'elettrone nel campo elettrostatico generato dal nucleo non ha più quindi l'usuale espressione Coulombiana

$$U_C(r) = -\frac{Ze^2}{r}, \quad (2.4.7)$$

bensì assume due diversi andamenti nelle due regioni spaziali [11], all'interno e all'esterno del nucleo, mostrati in Figura (2.2):

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{Ze^2}{2R^3} (3R^2 - r^2), & \text{se } r < R \\ -\frac{Ze^2}{r}, & \text{se } r \geq R \end{cases}. \quad (2.4.8)$$

Dimostrazione. Si consideri una generica sfera solida $B_{r'}$ di raggio r' contenente una quantità di carica $q(r')$; essa genera quindi, per via della legge di Gauss, un campo elettrico radiale di intensità

$$E_q(r') = \frac{q(r')}{r'^2}. \quad (2.4.9)$$

La carica $q(r')$ può essere ricavata integrando la densità di carica nucleare (2.4.5) all'interno della sfera solida di raggio r' :

$$\begin{aligned} q(r') &= \int_{B_{r'}} d^3x \rho_N(\mathbf{x}) = 4\pi \int_0^{r'} du u^2 \rho_N(u) & (2.4.10) \\ &= 4\pi \frac{3Ze}{4\pi R^3} \int_0^{r'} du u^2 \theta(R - u) = \frac{3Ze}{R^3} \left[\frac{u^3}{3} \right]_0^{\min(r', R)} \\ &= Ze \min \left(1, \left(\frac{r'}{R} \right)^3 \right). \end{aligned}$$

Il potenziale del campo elettrostatico nucleare in r è definito come il lavoro compiuto sul muone dalla forza elettrostatica da r all'infinito, ossia

$$U(r) = \int_r^\infty dr' (-e) E_q(r') = \int_r^\infty dr' \frac{-e q(r')}{r'^2} = -Ze^2 \int_r^\infty dr' \min \left(\frac{1}{r'^2}, \frac{r'}{R^3} \right) \quad (2.4.11)$$

Si distinguono quindi i due seguenti casi:

- se $r < R$, allora

$$\begin{aligned} U(r) &= -Ze^2 \left(\int_r^R dr' \frac{r'}{R^3} + \int_R^\infty dr' \frac{1}{r'^2} \right) = -Ze^2 \left(\frac{1}{2R^3} [r'^2]_r^R - \left[\frac{1}{r'} \right]_R^\infty \right) & (2.4.12) \\ &= -Ze^2 \left(\frac{1}{2R} - \frac{r^2}{2R^3} + \frac{1}{R} \right) = -\frac{Ze^2}{2R} \left(3 - \frac{r^2}{R^2} \right) = -\frac{Ze^2}{2R^3} (3R^2 - r^2); \end{aligned}$$

- se $r \geq R$, allora

$$U(r) = -Ze^2 \int_r^\infty dr' \frac{1}{r'^2} = Ze^2 \left[\frac{1}{r'} \right]_r^\infty = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (2.4.13)$$

Combinando i due casi, risulta quindi provata (2.4.8). \square

La funzione d'onda di prova utilizzata per lo studio del muone nell'orbitale 1s – per cui si ha momento angolare orbitale $l = 0$ – presenta la forma

$$\langle \mathbf{x} | \psi(l) \rangle = \psi_l(r) = \frac{A}{\sqrt{4\pi}} (1 + r/l) e^{-r/l}. \quad (2.4.14)$$

Prima di applicare il metodo variazionale, imponiamo la normalizzazione della funzione d'onda, scegliendo appropriamente la costante A :

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi(l) | \psi(l) \rangle &= \int d^3x |\psi_l(r)|^2 = A^2 \int_0^\infty dr r^2 (1 + r/l)^2 e^{-2r/l} \\ &= A^2 \int_0^\infty dr (r^2 + 2r^3/l + r^4/l^2) e^{-2r/l} \\ &= \frac{A^2 l}{2} \int_0^\infty dx \left(\frac{l^2 x^2}{4} + \frac{l^2 x^3}{4} + \frac{l^2 x^4}{16} \right) e^{-x} \\ &= \frac{A^2 l}{2} \left(\frac{l^2 \Gamma(3)}{4} + \frac{l^2 \Gamma(4)}{4} + \frac{l^2 \Gamma(5)}{16} \right) = \frac{A^2 l^3}{8} 14 = \frac{7A^2 l^3}{4}, \end{aligned} \quad (2.4.15)$$

da cui si ha

$$A = \left(\frac{4}{7l^3} \right)^{1/2}. \quad (2.4.16)$$

Una volta ridefinito il parametro variazionale tramite il parametro adimensionale $\lambda = 2R/l$, il funzionale di energia (1.0.1) risulta

$$\begin{aligned} \mathcal{E}[\psi(\lambda)] &= \frac{3e^2}{56R^2} \left(r_\mu \lambda^2 + ZR \left[\frac{216}{\lambda^2} - 28 \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - e^{-\lambda} \left(\frac{216}{\lambda^2} + \frac{216}{\lambda} + 80 + 14\lambda + \lambda^2 \right) \right] \right). \end{aligned} \quad (2.4.17)$$

Dimostrazione. La funzione d'onda di prova è normalizzata per costruzione; il funzionale di energia $\mathcal{E}[\psi]$ è uguale all'energia media (2.1.2).

Da (2.1.1) e da (2.4.14) segue che

$$\chi(r) = A r (1 + r/l) e^{-r/l}. \quad (2.4.18)$$

Notando che la derivata prima di $\chi(r)$ è $d\chi(r)/dr = A[1 + 2r/l - r/l(1 + r/l)]e^{-r/l}$ e inserendo (2.4.18) in (2.1.3) si ottiene

$$\begin{aligned}
E_{cin} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty dr \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \int_0^\infty dr \left(\left[1 + \frac{2r}{l} - \frac{r}{l} \left(1 + \frac{r}{l} \right) \right] e^{-r/l} \right)^2 \quad (2.4.19) \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \int_0^\infty dr \left(1 + \frac{r}{l} - \frac{r^2}{l^2} \right)^2 e^{-2r/l} \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \int_0^\infty dr \left(1 + \frac{r^2}{l^2} + \frac{r^4}{l^4} + \frac{2r}{l} - \frac{2r^2}{l^2} - \frac{2r^3}{l^3} \right) e^{-2r/l} \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \int_0^\infty dr \left(1 + \frac{2r}{l} - \frac{r^2}{l^2} - \frac{2r^3}{l^3} + \frac{r^4}{l^4} \right) e^{-2r/l} \\
&= \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \frac{l}{2} \int_0^\infty dx \left(1 + x - \frac{x^2}{4} - \frac{x^3}{4} + \frac{x^4}{16} \right) e^{-x} \\
&= \frac{\hbar^2 l A^2}{4\mu} \left(\Gamma(1) + \Gamma(2) - \frac{\Gamma(3)}{4} - \frac{\Gamma(4)}{4} + \frac{\Gamma(5)}{16} \right) = \frac{\hbar^2 l}{4\mu} \frac{4}{7} \frac{3}{2} \\
&= \frac{3\hbar^2}{14\mu l^2} = \frac{3\hbar^2}{56\mu R^2} \lambda^2 = \frac{3e^2}{56R^2} r_\mu \lambda^2,
\end{aligned}$$

dove si è fatto uso della Funzione Gamma di Eulero (A.0.3).

Inserendo (2.4.18) in (2.1.4) risulta

$$\begin{aligned}
E_{pot} &= \int_0^R dr U(r) \chi^2(r) + \int_R^\infty dr U(r) \chi^2(r) \quad (2.4.20) \\
&= -\frac{Ze^2}{2R^3} A^2 \int_0^R dr (3R^2 - r^2) r^2 \left(1 + \frac{r}{l} \right)^2 e^{-2r/l} - Ze^2 A^2 \int_R^\infty dr r \left(1 + \frac{r}{l} \right)^2 e^{-2r/l} \\
&= -Ze^2 A^2 \left(\underbrace{\frac{1}{2R^3} \int_0^R dr (3R^2 - r^2) r^2 \left(1 + \frac{r}{l} \right)^2 e^{-2r/l}}_{I_1} + \underbrace{\int_R^\infty dr r \left(1 + \frac{r}{l} \right)^2 e^{-2r/l}}_{I_2} \right).
\end{aligned}$$

Si esegue allora il calcolo dei due termini I_1 e I_2 , tramite le funzioni Gamma incomplete (A.0.7) e (A.0.6).

$$\begin{aligned}
I_1 &= \int_0^R dr (3R^2 - r^2) r^2 \left(1 + \frac{r}{l} \right)^2 e^{-2r/l} \quad (2.4.21) \\
&= \int_0^R dr (3R^2 r^2 - r^4) \left(1 + \frac{2r}{l} + \frac{r^2}{l^2} \right) e^{-2r/l} \\
&= 3R^2 \int_0^R dr \left(r^2 + \frac{2r^3}{l} + \frac{r^4}{l^2} \right) e^{-2r/l} - \int_0^R dr \left(r^4 + \frac{2r^5}{l} + \frac{r^6}{l^2} \right) e^{-2r/l} \\
&= \frac{3R^2 l}{2} \int_0^\lambda dx \frac{l^2}{4} \left(x^2 + x^3 + \frac{x^4}{4} \right) e^{-x} - \frac{l}{2} \int_0^\lambda dx \frac{l^4}{16} \left(x^4 + x^5 + \frac{x^6}{4} \right) e^{-x}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{3R^2 l^3}{8} \left(\gamma(3, \lambda) + \gamma(4, \lambda) + \frac{\gamma(5, \lambda)}{4} \right) - \frac{l^5}{32} \left(\gamma(5, \lambda) + \gamma(6, \lambda) + \frac{\gamma(7, \lambda)}{4} \right) \\
&= \frac{R^5}{\lambda^5} 3\lambda^2 \left(2! \left[1 - e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \right) \right] + 3! \left[1 - e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^3}{6} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + 3! \left[1 - e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^3}{6} + \frac{\lambda^4}{24} \right) \right] \right) \\
&\quad - \frac{R^5}{\lambda^5} \left(4! \left[1 - e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^3}{6} + \frac{\lambda^4}{24} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + 5! \left[1 - e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^3}{6} + \frac{\lambda^4}{24} + \frac{\lambda^5}{120} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + 180 \left[1 - e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^3}{6} + \frac{\lambda^4}{24} + \frac{\lambda^5}{120} + \frac{\lambda^6}{720} \right) \right] \right) \\
&= \frac{R^5}{\lambda^5} \left[-324 + 42\lambda^2 + e^{-\lambda} \left(324 + 324\lambda + 120\lambda^2 + 12\lambda^3 - \frac{15}{2}\lambda^4 - \frac{7}{2}\lambda^5 - \frac{\lambda^6}{2} \right) \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int_R^\infty dr r \left(1 + \frac{r}{l} \right)^2 e^{-2r/l} = \int_R^\infty dr \left(r + \frac{2r^2}{l} + \frac{r^3}{l^2} \right) e^{-2r/l} \quad (2.4.22) \\
&= \frac{l}{2} \int_\lambda^\infty dx \frac{l}{2} \left(x + x^2 + \frac{x^3}{4} \right) e^{-x} = \frac{l^2}{4} \left[\Gamma(2, \lambda) + \Gamma(3, \lambda) + \frac{\Gamma(4, \lambda)}{4} \right] \\
&= \frac{l^2}{4} \left[e^{-\lambda} (1 + \lambda) + 2e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} \right) + \frac{3}{2} e^{-\lambda} \left(1 + \lambda + \frac{\lambda^2}{2} + \frac{\lambda^3}{6} \right) \right] \\
&= \frac{R^2}{\lambda^2} e^{-\lambda} \left(\frac{9}{2} + \frac{9}{2}\lambda + \frac{7}{4}\lambda^2 + \frac{\lambda^3}{4} \right)
\end{aligned}$$

Inserendo i due risultati (2.4.21) e (2.4.22) in (2.4.20) si ottiene

$$\begin{aligned}
E_{pot} &= -Ze^2 A^2 \left(\frac{1}{2R^3} I_1 + I_2 \right) \quad (2.4.23) \\
&= -\frac{Ze^2 \lambda^3}{14R^3} \left(\frac{R^2}{2\lambda^5} \left[-324 + 42\lambda^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + e^{-\lambda} \left(324 + 324\lambda + 120\lambda^2 + 12\lambda^3 - \frac{15\lambda^4}{2} - \frac{7\lambda^5}{2} - \frac{\lambda^6}{2} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. + \frac{R^2}{\lambda^2} e^{-\lambda} \left(\frac{9}{2} + \frac{9\lambda}{2} + \frac{7\lambda^2}{4} + \frac{\lambda^3}{4} \right) \right)
\end{aligned}$$

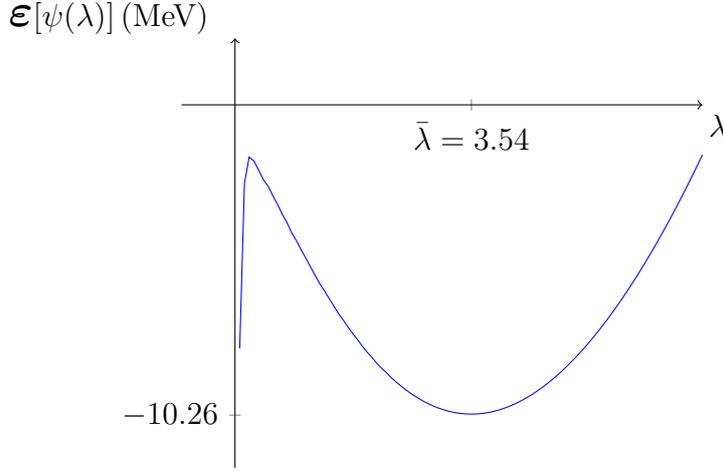


Figura 2.3: Energia media del muone al variare del parametro λ .
Si noti il punto stazionario di minimo.

$$\begin{aligned}
&= \frac{Ze^2}{14R^2} R \left(\frac{1}{2\lambda^3} \left[324 - 42\lambda^2 - e^{-\lambda} \left(324 + 324\lambda + 120\lambda^2 + 12\lambda^3 - \frac{15\lambda^4}{2} - \frac{7\lambda^5}{2} - \frac{\lambda^6}{2} \right) \right] \right. \\
&\quad \left. - \lambda e^{-\lambda} \left(\frac{9}{2} + \frac{9\lambda}{2} + \frac{7\lambda^2}{4} + \frac{\lambda^3}{4} \right) \right) \\
&= \frac{3e^2 Z}{56R^2} R \left[\frac{216}{\lambda^2} - 28 - e^{-\lambda} \left(\frac{216}{\lambda^2} + \frac{216}{\lambda} + 80 + 14\lambda + \lambda^2 \right) \right].
\end{aligned}$$

Sommando i risultati (2.4.19) e (2.4.23) si dimostra (2.4.17). \square

Si applica quindi il metodo variazionale per trovare il valore minimo del funzionale di energia (2.4.17):

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{d\mathcal{E}[\psi(\lambda)]}{d\lambda} & (2.4.24) \\
&= \frac{3e^2}{56R^2} \left(2r_\mu \lambda + ZR \left[-2\frac{216}{\lambda^3} - e^{-\lambda} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. \left(-2\frac{216}{\lambda^3} - \frac{216}{\lambda^2} + 14 + 2\lambda - \frac{216}{\lambda^2} - \frac{216}{\lambda} - 80 - 14\lambda - \lambda^2 \right) \right] \right) \\
&= \frac{3e^2}{56R^2} \left(2r_\mu \lambda + ZR \left[\frac{432}{\lambda^3} - e^{-\lambda} \left(-\frac{432}{\lambda^3} - \frac{432}{\lambda^2} - \frac{216}{\lambda} - 66 - 12\lambda - \lambda^2 \right) \right] \right),
\end{aligned}$$

da cui si ricava la seguente equazione trascendentale per il parametro λ :

$$\implies \frac{e^{-\lambda}}{\lambda^4} \left[432e^\lambda - (432 + 432\lambda + 216\lambda^2 + 66\lambda^3 + 12\lambda^4 + \lambda^5) \right] = \frac{2r_\mu}{ZR} \simeq 1.102. \quad (2.4.25)$$

L'equazione (2.4.25) è risolta tramite l'utilizzo di WolframAlpha, e fornisce il valore ottimale del parametro variazionale:

$$\bar{\lambda} = 3.54, \quad (2.4.26)$$

tale per cui il funzionale di energia assume il valore stazionario di minimo

$$\mathcal{E}[\psi(\bar{\lambda})] = -10.26 \text{ MeV}. \quad (2.4.27)$$

I risultati sono mostrati in Figura (2.3).

2.5 Modello a forza centrale del deutone

Si applica ora la teoria variazionale allo studio del deutone, nucleo del deuterio, isotopo stabile dell'idrogeno costituito da un neutrone e un protone. La sua energia di legame, misurata sperimentalmente, risulta

$$E_{\text{exp}} = -2.225 \text{ MeV}, \quad (2.5.1)$$

ed è così bassa da permettere l'esistenza di un solo stato legato, quello fondamentale $1s$.

Il neutrone libero è instabile per via del decadimento β^- . Con un tempo di vita medio di circa quindici minuti decade in protone, elettrone e neutrino. Se questo decadimento si verificasse all'interno del deutone, la somma risultante sarebbe $M \approx 1877.055 \text{ MeV}$, maggiore della massa del deutone $m_D \approx 1875.613 \text{ MeV}$; questo implica che il deutone nello stato $1s$ è stabile e non subisce il decadimento β^- [6].

L'interazione tra i due nucleoni del deutone è descritta tramite il potenziale centrale

$$U(r) = -U_0 e^{-r/r_0}, \quad (2.5.2)$$

dove $U_0 > 0$ è una scala energetica, ed r_0 è il raggio efficace dell'interazione nucleare.

Si utilizza la funzione d'onda di prova, dipendente dal parametro variazionale α , scritta come

$$\langle \mathbf{x} | \psi(\alpha) \rangle = \psi_\alpha(r) = \frac{A}{\sqrt{4\pi}} e^{-\alpha r / (2r_0)}, \quad (2.5.3)$$

dove si sceglie la costante A in modo da avere la funzione d'onda normalizzata.

Si impone quindi

$$\begin{aligned} 1 &= \langle \psi(\alpha) | \psi(\alpha) \rangle = \int d^3x |\psi_\alpha(r)|^2 = A^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{-\alpha r/r_0} \\ &= A^2 \frac{r_0^3}{\alpha^3} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = A^2 \frac{r_0^3}{\alpha^3} \Gamma(3) = A^2 \frac{2r_0^3}{\alpha^3}, \end{aligned} \quad (2.5.4)$$

da cui si ha

$$A = \left(\frac{\alpha^3}{2r_0^3} \right)^{1/2}. \quad (2.5.5)$$

Si calcola il funzionale di energia, corrispondente all'energia media (2.1.2) del sistema:

$$\mathcal{E}[\psi(\alpha)] = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu r_0^2} - U_0 \frac{\alpha^3}{(1+\alpha)^3}, \quad (2.5.6)$$

dove μ è la massa ridotta dei nucleoni.

Dimostrazione. Da (2.1.1) e da (2.5.3) si ha, per definizione,

$$\chi(r) = A r e^{-\alpha r/(2r_0)}. \quad (2.5.7)$$

Notando che la derivata prima di $\chi(r)$ è $d\chi(r)/dr = A[1 - \alpha r/(2r_0)]e^{-\alpha r/(2r_0)}$ e inserendo (2.5.7) in (2.1.3) e in (2.1.4), ricordando il valore della Funzione Gamma di Eulero (A.0.3) dall'Appendice A, si trova

$$\begin{aligned} E_{cin} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty dr \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2 = \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \int_0^\infty dr \left(1 - \frac{\alpha r}{2r_0} \right)^2 e^{-\alpha r/r_0} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \int_0^\infty dr \left(1 - \frac{\alpha r}{r_0} + \frac{\alpha^2 r^2}{4r_0^2} \right) e^{-\alpha r/r_0} \\ &= \frac{\hbar^2}{2\mu} A^2 \frac{r_0}{\alpha} \int_0^\infty dx \left(1 - x + \frac{x^2}{4} \right) e^{-x} \\ &= \frac{\hbar^2 \alpha^2}{4\mu r_0^2} \left(\Gamma(1) - \Gamma(2) + \frac{\Gamma(3)}{4} \right) = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{8\mu r_0^2}, \end{aligned} \quad (2.5.8)$$

$$\begin{aligned} E_{pot} &= \int_0^\infty dr U(r) \chi^2(r) = -U_0 A^2 \int_0^\infty dr r^2 e^{-r(1+\alpha)/r_0} \\ &= -U_0 A^2 \frac{r_0^3}{(1+\alpha)^3} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = -\frac{U_0 \alpha^3}{2(1+\alpha)^3} \Gamma(3) \end{aligned} \quad (2.5.9)$$

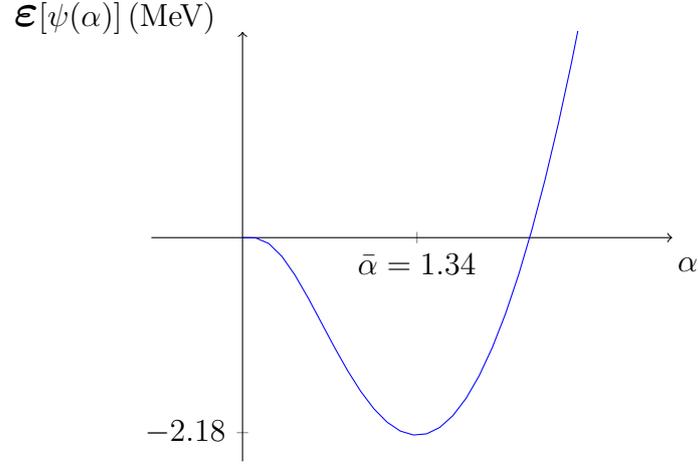


Figura 2.4: Energia media del deutone al variare del parametro α . Si noti il punto stazionario di minimo.

$$= -\frac{U_0 \alpha^3}{(1 + \alpha)^3}.$$

Sommando i risultati (2.5.8) e (2.5.9) si dimostra (2.5.6). \square

Si applica il metodo variazionale, derivando il funzionale di energia (2.5.6) e ponendo nulla la derivata, per trovarne il valore minimo dell'energia:

$$\frac{d\mathcal{E}[\psi(\alpha)]}{d\alpha} = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu r_0^2} - U_0 \left(\frac{3\alpha^2}{(1 + \alpha)^3} - \frac{3\alpha^3}{(1 + \alpha)^4} \right) = \frac{\hbar^2 \alpha}{4\mu r_0^2} - \frac{3U_0 \alpha^2}{(1 + \alpha)^4} = 0 \quad (2.5.10)$$

$$\implies \frac{(1 + \alpha)^4}{\alpha} = 12 \frac{U_0 \mu r_0^2}{\hbar^2} \approx 22.43, \quad (2.5.11)$$

dove si sono sostituiti in (2.5.11) i valori noti sperimentalmente $U_0 \simeq 32.7 \text{ MeV}$, $r_0 \simeq 2.18 \text{ fm}$, $\mu \approx 1.67/2 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$, essendo le masse dei nucleoni state approssimate allo stesso valore. Le due soluzioni reali, ottenute tramite WolframAlpha, sono

$$\alpha_1 \simeq 0.055, \quad \alpha_2 \simeq 1.34. \quad (2.5.12)$$

Come si vede dalla Figura 2.4, il valore ottimale del parametro $\bar{\alpha}$ che minimizza il funzionale di energia è

$$\bar{\alpha} = 1.34, \quad (2.5.13)$$

tale per cui l'energia assume il valore

$$\mathcal{E}[\psi(\bar{\alpha})] = (3.93 - 6.14) \text{ MeV} = -2.18 \text{ MeV}, \quad (2.5.14)$$

riportato in Figura (2.4) insieme all'andamento dell'energia. Il risultato ottenuto è da confrontare con la misura sperimentale (2.5.1).

2.6 Stati legati di nucleoni

La teoria variazionale può essere applicata anche allo studio dell'interazione attrattiva tra due particelle, ad esempio tra due nucleoni.

Sia dato un potenziale di Yukawa agente tra di essi:

$$U(r) = -U_0 \frac{e^{-r/r_0}}{r/r_0}, \quad (2.6.1)$$

dove $U_0 > 0$ è una scala energetica ed r_0 è la portata dell'interazione, ovvero fornisce l'ordine di grandezza del raggio d'azione del potenziale. Si vuole per l'appunto stimare il raggio minimo r_0 affinché esistano stati legati, nel caso di momento angolare orbitale $l = 0$.

Si sceglie la funzione d'onda di prova con la seguente forma:

$$\langle \mathbf{x} | \psi(\rho) \rangle = \psi_\rho(r) = \frac{A}{\sqrt{4\pi}} e^{-r/\rho}, \quad (2.6.2)$$

dove ρ è il parametro variazionale e A è una costante da trovare per garantire la normalizzazione della funzione d'onda. Si impone quindi

$$\begin{aligned} 1 = \langle \psi(\rho) | \psi(\rho) \rangle &= \int d^3x |\psi_\rho(r)|^2 = 4\pi \frac{A^2}{4\pi} \int_0^\infty dr r^2 e^{-2r/\rho} \\ &= \frac{A^2 \rho^3}{8} \int_0^\infty dx x^2 e^{-x} = \frac{A^2 \rho^3}{8} \Gamma(3) = \frac{A^2 \rho^3}{4}, \end{aligned} \quad (2.6.3)$$

ottendendo

$$A = \left(\frac{4}{\rho^3} \right)^{1/2}. \quad (2.6.4)$$

Il funzionale di energia (1.0.1), che è dato dall'energia media (2.1.2), risulta essere

$$\mathcal{E}[\psi(\rho)] = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2} - U_0 \frac{4r_0^3}{\rho^3 (1 + 2r_0/\rho)^2}, \quad (2.6.5)$$

dove μ è la massa ridotta dei nucleoni.

Dimostrazione. Da (2.1.1) e da (2.6.2) si ha che

$$\chi(r) = A r e^{-r/\rho}. \quad (2.6.6)$$

Notando che la derivata prima di $\chi(r)$ è $d\chi(r)/dr = A(1 - r/\rho)e^{-r/\rho}$ e inserendo (2.6.6) in (2.1.3) e in (2.1.4), usando la Funzione Gamma di Eulero (A.0.3) si trova

$$\begin{aligned} E_{cin} &= \frac{\hbar^2}{2\mu} \int_0^\infty dr \left(\frac{d\chi(r)}{dr} \right)^2 = \frac{\hbar^2 A^2}{2\mu} \int_0^\infty dr \left(1 - \frac{r}{\rho} \right)^2 e^{-2r/\rho} \\ &= \frac{\hbar^2 A^2}{2\mu} \int_0^\infty dr \left(1 - \frac{2r}{\rho} + \frac{r^2}{\rho^2} \right) e^{-2r/\rho} \\ &= \frac{\hbar^2 A^2 \rho}{2\mu} \int_0^\infty dx \left(1 - x + \frac{x^2}{4} \right) e^{-x} \\ &= \frac{\hbar^2}{\mu\rho^2} \left(\Gamma(1) - \Gamma(2) + \frac{\Gamma(3)}{4} \right) = \frac{\hbar^2}{2\mu\rho^2}; \end{aligned} \quad (2.6.7)$$

$$\begin{aligned} E_{pot} &= \int_0^\infty dr U(r) \chi^2(r) = -U_0 r_0 A^2 \int_0^\infty dr r^2 \frac{e^{-r/r_0}}{r} e^{-2r/\rho} \\ &= -\frac{U_0 r_0 A^2}{(1/r_0 + 2/\rho)^2} \int_0^\infty dx x e^{-x} = -\frac{4U_0 r_0}{\rho^3 (1/r_0 + 2/\rho)^2} \Gamma(2) \\ &= -\frac{4U_0 r_0}{\rho^3 (1/r_0 + 2/\rho)^2} = -U_0 \frac{4r_0^3}{\rho^3 (1 + 2r_0/\rho)^2}. \end{aligned} \quad (2.6.8)$$

Inserendo (2.6.7) e (2.6.8) in (2.1.2), si dimostra la (2.6.5). □

Si definiscono i seguenti parametri adimensionali:

$$p = 2 \frac{r_0}{\rho}, \quad (2.6.9)$$

$$K = U_0 \frac{2\mu r_0^2}{\hbar^2}, \quad (2.6.10)$$

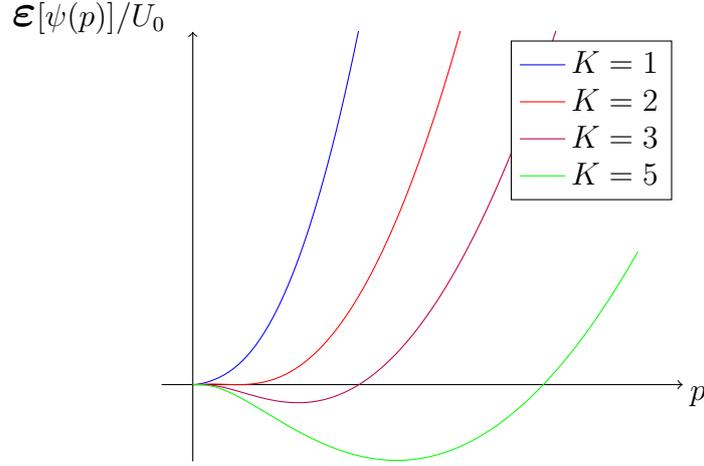


Figura 2.5: Energia media del sistema al variare del parametro p , per diversi valori del parametro K . Si noti l'assenza di stati legati per $K = 1$ e $K = 2$.

corrispondenti, rispettivamente, all'ordine di grandezza del rapporto tra il raggio dell'interazione e il raggio di decadimento della funzione d'onda [4], e alla profondità del potenziale.

Si utilizza ora p come parametro variazionale e si sostituiscono (2.6.9) e (2.6.10) in (2.6.5), ottenendo

$$\mathcal{E}[\psi(p)] = U_0 \left(\frac{p^2}{4K} - \frac{p^3}{2(1+p)^2} \right). \quad (2.6.11)$$

Si applica il metodo variazionale come nei casi precedenti, imponendo l'annullarsi della derivata prima di (2.6.11):

$$\frac{d\mathcal{E}[\psi(p)]}{dp} = U_0 \left(\frac{p}{2K} - \frac{3}{2} \frac{p^2}{(1+p)^2} + \frac{p^3}{(1+p)^3} \right) = U_0 \left(\frac{p}{2K} - \frac{p^2(3+p)}{2(1+p)^3} \right) = 0; \quad (2.6.12)$$

tale condizione è soddisfatta per

$$K = \frac{(1+p)^3}{p(3+p)}. \quad (2.6.13)$$

Inserendo (2.6.13) in (2.6.11) si ottiene

$$\mathcal{E}[\psi(p)] = U_0 \left(\frac{p^3(3+p)}{4(1+p)^3} - \frac{p^3}{2(1+p)^2} \right) = -U_0 \frac{p^3(p-1)}{4(1+p)^3}. \quad (2.6.14)$$

Il parametro p è definito positivo, perciò l'energia media del sistema può assumere valori negativi solo per $p > 1$; questa è la condizione necessaria che permette l'esistenza di stati legati.

Da (2.6.13) si deduce che $K > 2$; tale restrizione è mostrata in Figura (2.5). Da (2.6.9) si trova la relazione tra i due parametri iniziali che esprimono la portata dell'interazione e il raggio di decadimento della funzione d'onda:

$$2r_0 > \rho. \tag{2.6.15}$$

Appendice A

Funzione Gamma di Eulero

La *Funzione Gamma di Eulero* estende il concetto di fattoriale ai numeri complessi; è definita sul campo complesso, ad eccezione dei numeri interi non positivi, tramite l'integrale

$$\Gamma(z) = \int_0^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t}. \quad (\text{A.0.1})$$

Integrando per parti, si dimostra la seguente proprietà:

$$\Gamma(z+1) = z \Gamma(z), \quad (\text{A.0.2})$$

che si riconduce proprio alla definizione di fattoriale nel caso in cui $z = n \in \mathbb{N}$:

$$\Gamma(n+1) = n \Gamma(n) = \int_0^{\infty} dt t^n e^{-t} = n! \quad (\text{A.0.3})$$

In molti contesti si ha a che fare con le *funzioni Gamma incomplete*:

$$\Gamma(z, \alpha) = \int_{\alpha}^{\infty} dt t^{z-1} e^{-t}, \quad (\text{A.0.4})$$

$$\gamma(z, \alpha) = \int_0^{\alpha} dt t^{z-1} e^{-t}, \quad (\text{A.0.5})$$

per cui si ha $\Gamma(z, \alpha) + \gamma(z, \alpha) = \Gamma(z)$.

Nel caso in cui $z = n \in \mathbb{N}$, valgono

$$\Gamma(n, \alpha) = (n-1)! e^{-\alpha} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\alpha^k}{k!} \quad (\text{A.0.6})$$

$$\gamma(n, \alpha) = \Gamma(n) - \Gamma(n, \alpha) = (n-1)! \left(1 - e^{-\alpha} \sum_{k=0}^{n-1} \frac{\alpha^k}{k!} \right) \quad (\text{A.0.7})$$

Appendice B

Espansione in armoniche sferiche

Si considerino le armoniche sferiche $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, autofunzioni simultanee degli operatori di momento angolare orbitale \hat{L} e \hat{L}_z . Esse soddisfano la relazione di ortonormalità

$$\oint d\Omega Y_{l'm'}(\Omega) Y_{lm}^*(\Omega) = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (\text{B.0.1})$$

dove $\oint d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi d\varphi d\vartheta \sin \vartheta$.

Siano dati \mathbf{x}_1 e \mathbf{x}_2 due vettori caratterizzati rispettivamente dagli angoli polari (ϑ_1, φ_1) e (ϑ_2, φ_2) e sia ϑ l'angolo tra loro. Vale allora il teorema di addizione per le armoniche sferiche [2]:

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^{+l} Y_{lm}^*(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\vartheta_2, \varphi_2). \quad (\text{B.0.2})$$

Si possono usare i polinomi di Legendre per scrivere la seguente espansione [2]:

$$\frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} P_l(\cos \vartheta), \quad (\text{B.0.3})$$

dove $r_< = \min(|\mathbf{x}_1|, |\mathbf{x}_2|)$, $r_> = \max(|\mathbf{x}_1|, |\mathbf{x}_2|)$.

L'espressione si può porre, usando (B.0.2), nella forma

$$\frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{+l} \frac{4\pi}{2l+1} \frac{(r_<)^l}{(r_>)^{l+1}} Y_{lm}^*(\vartheta_1, \varphi_1) Y_{lm}(\vartheta_2, \varphi_2). \quad (\text{B.0.4})$$

Bibliografia

- [1] Bethe H. A., Salpeter E. E. (1957), *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron*, "Springer", Berlin.
- [2] Bransden B. H., Joachain C. J. (1983), *Physics of Atoms and Molecules*, "Longman Scientific and Technical", New York.
- [3] Bransden B. H., Joachain C. J. (2000), *Quantum Mechanics Second Edition*, "Upper Saddle River", New Jersey.
- [4] Flügge S., (1994), *Practical Quantum Mechanics*, "Springer", Berlin.
- [5] Griffiths David J. (2004), *Introduction to Quantum Mechanics Second Edition*, "Upper Saddle River", New Jersey.
- [6] HyperPhysics – Georgia State University, *The Deuteron*. <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/Particles/deuteron.html>
- [7] Landau L. D., Lifshitz E. M. (1981), *Quantum Mechanics (Non relativistic theory)*, "Butterworth-Heinemann", Oxford.
- [8] Messiah A. (1968), *Quantum Mechanics Volume II*, "North-Holland", Amsterdam.
- [9] Merzbacher E. (2011), *Quantum Mechanics Third Edition*, "John Wiley & Sons", Hoboken.
- [10] Sakurai Jun John (1994), *Modern Quantum Mechanics Revised Edition*, "Addison-Wesley", Boston.
- [11] Zucchini Roberto (2019), *Quantum Mechanics: Lecture Notes*

Ringraziamenti

Ringrazio il prof. Roberto Zucchini per la disponibilità e l'attenzione mostrata durante la stesura di questa tesi.

Un ringraziamento sincero va a tutti i miei amici e a Chiara per avermi dato il supporto e la forza necessari per superare il periodo di dubbi e timori circa il mio percorso di studi.

La gratitudine più grande va alla mia famiglia, che ha sempre creduto in me, indipendentemente dalle mie scelte e dai miei fallimenti.