1 Diffusione da un potenziale

Assumiamo di voler descrivere un fascio di particelle che incide su un bersaglio (il potenziale) e che viene poi diffuso in direzioni diverse da quella incidente.

Se definiamo I il numero di particelle per unita' di tempo ed unita' di area che interagisce con il bersaglio e con dn il numero di particelle per unita' di tempo rivelate da un rivelatore posto nell' angolo solido $d\Omega$, possiamo scrivere

$$dn = \sigma(\theta, \phi) I d\Omega$$

poiche' certamente il numero di particelle rilevate dipendera' linearmente dalla intensita' incidente e da $d\Omega$. La costante di proporzionalita' σ ha le dimensioni di una superficie e prende il nome di sezione d'urto differenziale (per scattering).

Quindi, il numero di particelle che arrivano al rilevatore e' uguale al numero di particelle incidenti che attraversano una superficie $\sigma(\theta, \phi)d\Omega$ ortogonale alla direzione di propagazione del fascio.

Integrando su tutte le direzioni si ottiene la sezione d'urto

$$\sigma = \int \sigma(\theta, \phi) d\Omega$$

che di nuovo indica la superficie sulla quale incidono le particelle del fascio che verranno deviate ad un angolo arbitrario.

2 Descrizione quantistica

Per studiare lo scattering, occorre studiare l'evoluzione di un pacchetto d'onde in presenza del potenziale (a corto range) $V(\mathbf{r})$. Occorre quindi studiare le autofunzioni nel caso in cui

$$H = \frac{\mathbf{P}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})$$

per poi combinarle in modo opportuno per descrivere il pacchetto incidente. Partiamo dunque da

$$\left[-\frac{1}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r})$$

Possiamo limitarci alle soluzioni con $E > 0$, visto che non siamo interessati alla formazione di stati legati, bensi alla diffusione. Definiamo

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

ed

$$U(\mathbf{r}) = \frac{\hbar^2}{2m} V(\mathbf{r})$$

per cui

$$\left[-\nabla^2 + U(\mathbf{r}) - k^2\right]\phi(\mathbf{r}) = 0$$

Per risolvere questa equazione differenziale, utilizziamo il metodo delle funzioni di Green. Riscriviamo la equazione come

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\phi(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$$

e supponiamo di sapere calcolare sia l' omogenea

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\phi_0(\mathbf{r}) = 0$$

che naturalmente ammette come soluzione $\phi_0(\mathbf{r}) = e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ che

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$$

(G prende il nome di funzione di Green dell' operatore $\nabla^2 + k^2$)

allora la soluzione e' scrivibile in modo ricorsivo come

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}')$$

Infatti, se applicchiamo a $\phi(\mathbf{r})$ cosi' definita l' operatore $\nabla^2 + k^2$ troviamo

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]\phi(\mathbf{r}) = \left[\nabla^2 + k^2\right]\phi_0(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' \left\{[\nabla^2 + k^2]G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\right\}U(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}') =$$

$$0 + \int d\mathbf{r}'\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}') = U(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})$$

Dobbiamo quindi prima trovare G e poi risolvere l'equazione per $\phi(\mathbf{r})$. Se scegliamo per $G(\mathbf{r})$ una funzione solo di r (modulo),

$$G(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}$$

questa funzione soddisfa

$$\left[\nabla^2 + k^2\right]G(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$$

2.0.1 Dimostrazione

Poiche' $G(\mathbf{r})$ e funzione solo di r, l' operatore differenziale ∇^2 e'

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)$$

per cui, per $r \neq 0$

$$\nabla^2 \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right] = -\frac{1}{4\pi} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) \frac{e^{ikr}}{r} \right)$$

Poiche'

$$r^2 \frac{\partial}{\partial r} \frac{e^{ikr}}{r} = r^2 \frac{1}{r^2} (ike^{ikr} r - e^{ikr}) = (ikr - 1) e^{ikr}$$

e

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (ikr - 1) e^{ikr} = \frac{1}{r^2} (ike^{ikr} + (ikr - 1) ike^{ikr}) = \frac{-k^2}{r} e^{ikr}$$

troviamo

$$\nabla^2 \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right] = -k^2 \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right]$$

che mostra che, per $r \neq 0$

$$\left[\nabla^2 + k^2 \right] \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right] = 0$$

In $r \to 0$,

$$\left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right] = -\frac{1}{4\pi} \frac{1 + ikr - k^2 r^2}{r} = \frac{1}{r} + \frac{ikr}{r} - \frac{k^2 r^2}{r}$$

e poiche'

$$\nabla^2 \frac{1}{r} = -4\pi \delta(\mathbf{r})$$

e

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} [-k^2 r] \right) = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (-r^2 k^2) = -\frac{k^2}{r}$$

concludiamo che in $r \to 0$

$$\nabla^2 \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right] = \delta(\mathbf{r}) + -\frac{1}{4\pi} (-\frac{k^2}{r}) = \delta(\mathbf{r}) - k^2 (-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r})$$

e quindi

$$[\nabla^2 + k^2] \left[-\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \right] = \delta(\mathbf{r})$$

3 Born approximation

L' idea della approssimazione di Born e' quella di risolvere iterativamente l'equazione per la $\phi(\mathbf{r})$. Infatti, se riscriviamo la soluzione per $\mathbf{r}'$

$$\phi(\mathbf{r}') = \phi_0(\mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}'' G(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') U(\mathbf{r}'') \phi(\mathbf{r}'')$$

e la inseriamo nella equazione per $\phi(\mathbf{r})$ troviamo

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi_0(\mathbf{r}') + \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}-\mathbf{r}')U(\mathbf{r}') \int d\mathbf{r}'' G(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')U(\mathbf{r}'')\phi(\mathbf{r}'')$$

in cui ora la incognita $\phi(\mathbf{r}'')$ dentro l'integrale compare solo nell' ultimo termine. Questa procedura puo' essere iterata ed ogni volta la funzione d'onda e' presente solo nell' ultimo integrale. Poiche' ogni termine successivo e' costituito da potenze di $U(\mathbf{r})$, se il potenziale e' debole, possiamo considerare la procedura iterativa come una espansione in potenze di $U(\mathbf{r})$ e fermarci all' ordine voluto. Se ci fermiamo al primo ordine abbiamo

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$$

3.1 Sezione d' urto corrispondente

Se ci mettiamo nell' $\mathbf{r}$ del rilevatore, cioe' abbastanza lontano dal potenziale allora per tutti i punti $\mathbf{r}'$ nella regione dove il potenziale e' non nullo possiamo scrivere

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| \approx= r - \mathbf{r}' \cdot \hat{\mathbf{r}}$$

cosi' che

$$\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx \frac{e^{ikr}}{r} e^{-i\mathbf{k}_\mathbf{r}\cdot\mathbf{r}'}$$

troviamo

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \int d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}_\mathbf{r}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')$$

In questa funzione d' onda, l' unica parte che dipende da θ e ϕ (la direzione del rilevatore e' l'integrale. L' integrale e' anche indipendente da r. Possiamo riscrivere, definendo

$$f(\theta,\phi) = -\frac{1}{4\pi} \int d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k}_\mathbf{r}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')$$

$$\phi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f(\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}$$

che ha la chiara interpretazione di somma di una onda incidente che si propaga lungo $\mathbf{k}$ e onda diffusa (la cui intensita' descresce per conservazione dell' energia con r^{-2}). Calcolando le correnti di probabilita' si mostra che

$$\sigma(\theta,\phi) = |f(\theta,\phi)|^2$$

4 Diffusione di neutroni

L' interazione tra i nuclei di un campione e un neutrone e' descritta dal potenziale

$$\mathcal{V} = \frac{2\pi h^2}{m} \sum_i b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i) \quad U = 4\pi \sum_i b_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$$

La sezione d'urto differenziale corrispondente, chiamando $\mathbf{K} = \mathbf{k_r} - \mathbf{k}$ il vettore d'onda scambiato e'

$$\sigma(\theta, \phi) = \left| \int d\mathbf{r}' e^{-i(\mathbf{k_r}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{r}'} \sum_i b_i \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_i) \right|^2 = \sum_i \sum_j b_i^* b_j e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r_i}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r_j}} = \sum_i \sum_j b_i^* b_j e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j})}$$

Questa espressione va mediata sui vari isotopi e stati di spin e poi su tutte le possibili realizzazioni del sistema.

$$\sigma(\theta, \phi) =< \sum_i \sum_j b_i^* b_j e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j})} >$$

Scrivendo $b_i =< b > +\Delta b_i$, la media del prodotto $b_i^* b_j$ da $< b >^2$ se $i \neq j$ (essendo i nuclei i e j scorrelati e dunque $< \Delta b_i \Delta b_j >= 0$) e $< b >^2 + < \Delta b^2 >=< b^2 >$ (ricordando che la varianza e' $\Delta b^2 =< b^2 > - < b >^2$. Mediando sui possibili stati di b troviamo cosi'

$$\sigma(\theta, \phi) =< b >^2 < \sum_i \sum_{j\neq i} e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j})} > + < b^2 > N$$

oppure, sommando e sottraendo $< b >^2 N$

$$\sigma(\theta, \phi) =< b >^2 < \sum_i \sum_j e^{i\mathbf{K}\cdot(\mathbf{r_i}-\mathbf{r_j})} > +(< b^2 > - < b >^2)N$$

che si solito si scrive come

$$\sigma(\theta, \phi) = N b^2_{incoherent} + N b^2_{coherent} \frac{1}{N} < |\sum_i e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r_i}}|^2 >= N b^2_{incoherent} + N b^2_{coherent} S(\mathbf{K})$$