Università degli Studi di Napoli “Federico II”

Scuola Politecnica e delle Scienze di Base
Area Didattica di Scienze Matematiche Fisiche e Naturali

Dipartimento di Fisica “Ettore Pancini”

Laurea triennale in Fisica

Processi di ionizzazione in atomi

Relatori:
Prof. Vittorio Cataudella
Dott. Carmine Antonio Perroni

Candidato:
Giuseppe Serpico
N85000912

A.A. 2017/2018

Indice

1 SCATTERING DA POTENZIALE **5**

1.1 Problema generale e condizioni al contorno 5

1.2 Relazione tra sezione d'urto differenziale e ampiezza di scattering 7

1.3 Equazione integrale del potenziale di scattering 8

1.4 Serie e approssimazione di Born 12

1.5 Scattering Coulombiano 15

2 COLLISIONI TRA ELETTRONI E ATOMI **18**

2.1 Sezione d'urto differenziale generica e condizioni al contorno 18

2.2 Calcolo sezione d'urto differenziale per scattering elastico con il metodo "static exchange" 21

2.3 Impostazione del metodo "close coupling" 24

2.4 Sezione d'urto per scattering anelastico . . 25

3 IONIZZAZIONE **27**

3.1 Ionizzazioni ad energie molto maggiori della soglia di ionizzazione 27

3.2 Processi di ionizzazione con interazioni coulombiane tra particelle 29

Introduzione

Lo studio dei fenomeni di collisione è di fondamentale importanza per la comprensione della fisica molecolare e atomica. Questi fenomeni sono utilizzati soprattutto per sondare la struttura degli atomi e degli ioni, ma anche nello studio di plasma, nella fisica dei laser e nei rivelatori in fisica subnucleare. Serve quindi una teoria che riesca a descriverli a livello quantistico ed un apparato sperimentale che permetta di riprodurre un fenomeno d'urto. I tipici esperimenti di collisione consistono nel far scontrare un fascio ben collimato di particelle A ad una stessa energia su un bersaglio B e posizionare dei rivelatori che registrino le particelle uscenti in seguito al fenomeno di collisine.

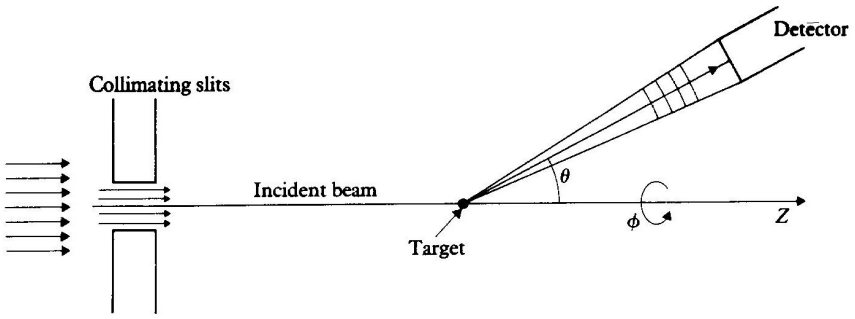

Figura 1: Immagine rappresentativa di un tipico esperimento di scattering

Se si considera, come fatto in questa tesi, che il fascio incidente è composto da elettroni e che le particelle bersaglio sono atomi, possono verificarsi tre diversi fenomeni di interazione, in quanto la collisione può essere:

- Elastica $\rightarrow$ né la particella incidente né la particella bersaglio vengono alterate, vi è solo una modifica della traiettoria e dell'energia della particella incidente in seguito allo scattering. Sono del tipo $A + B \rightarrow A + B$
- Anelastica $\rightarrow$ le particelle A e B subiscono un cambiamento interno, vale a dire che vengono a trovarsi un nuovo stato. Sono del tipo $A+B \rightarrow A+B'$ (con B' stato eccitato) oppure A'+B o ancora A'+B'.
- Ionizzazione $\rightarrow$ la particella (elettrone) A tramite l'interazione con B provoca l'espulsione di un elettrone il che rende B uno ione positivo.

A ciascuno di questi processi è associata un'energia di soglia che si definisce come la minima energia che l'elettrone incidente deve possedere affinché si verifichi il fenomeno corrispondente. Da quanto appena detto è facile capire che i processi che si possono osservare non sono esclusivamente questi tre in quanto il fascio incidente può avere energia prossima all'energia di soglia andando a creare un'interazione che non sarà puramente elastica (anelastica, di ionizzazione) ma sarà una combinazione di più processi. In generale qualsiasi collisione si

stia trattando il risultato della stessa viene espresso in termini di sezione d'urto, quindi l'obiettivo sarà quello di trovare un'espressione per la sezione d'urto della ionizzazione. Per comprendere cos'è la sezione d'urto si consideri un fascio di particelle che viene sparato su un certo materiale, il quale è ovviamente composto anch'esso da particelle che chiameremo bersagli o "target". Il numero di interazioni nell'unità di tempo ("rate") tra le particelle del fascio e quelle dell'atomo è proporzionale al flusso di particelle incidenti e al numero di bersagli (ai "target"). Questo fattore di proporzionalità è detto sezione d'urto che quantifica la probabilità che lo stato iniziale della particella risulti trasformato in un nuovo stato a causa dell'interazione.
Lo scopo di questa trattazione è quello di studiare i processi di ionizzazione ma per farlo è necessario studiare preliminarmente lo scattering dovuto ad un potenziale. Questo processo sarà analizzato nel Capitolo 1 in cui si discuteranno le approssimazioni tipiche dei fenomeni d'urto, con le relative condizioni al contorno necessarie per risolvere i problemi di questo tipo, e in cui si calcolerà la sezione d'urto differenziale, relativo al processo di scattering da potenziale, al primo ordine nell'approssimazione di Born. Successivamente nel Capitolo 2 si passerà allo studio delle collisioni tra elettroni e atomi. In questo Capitolo varrà analizzato prima il caso elastico e successivamente quello anelastico studiati tramite i metodi di approssimazione "static exchange" e "close coupling". Queste approssimazioni permettono di avere delle buone stime della sezione d'urto differeziale dello scattering elettroni-atomi e saranno anche indispensabili per formulare una rappresentazione matematica dei preocessi di ionizzazione. Infine nel Capitolo 3 verranno dapprima usate le approssimazioni appena citate per descrivere i processi di ionizzazione a energie di molto superiori all'energia di soglia e in un secondo momento, utilizzando le conoscenze apprese nel Capitolo 1 sullo scattering coulombiano, si potranno tenere in considerazione anche le interazioni tra le particelle, in modo da trovare un'espressione della sezione d'urto differenziale tripla che risulta in accordo con i dati sperimentali.

1 SCATTERING DA POTENZIALE

Nel primo paragrafo di questo Capitolo discuteremo la relazione tra le condizioni al contorno della funzione d'onda del problema di scattering e l'ampiezza di scattering. Successivamente nel secondo paragrafo sarà mostrata l'importanza dell'ampiezza di scattering e la sua relazione con la sezione d'urto differenziale facendo capire come sia fondamentale conoscere l'ampiezza per calcolare la sezione d'urto. Nel terzo paragrafo verrà affrontata la risoluzione dell'equazione di Schrödinger, che descrive il problema di scattering, constatando però la difficolta analitica della sua risoluzione. Questo problema verrà risolto nel quarto paragrafo utilizzando l'approssimazione di Born al primo ordine che si rivelerà essere un'ottima approssimazione in quanto in accordo con i dati sperimentali. Infine nel quinto paragrafo verrà analizzato il caso in cui il "target" e il bersaglio sono carichi.

1.1 Problema generale e condizioni al contorno

La prima trattazione sarà dedicata allo studio dei processi di scattaring da potenziale che in questo caso sarà originato da una particella in moto non relativistico e priva di spin, verso una seconda particella. Una volta compresi questi processi si potrà passare allo studio di collisioni tra atomi ed elettroni. Bisogna quindi risolvere un sistema di due particelle di massa m_1 e m_2 che interagiscono tramite il potenziale $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ che per l'appunto dipende dalla coordinata relativa $\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Innanzitutto si scrive l'hamiltoniana classica del sistema:

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \ , \tag{1}$$

da cui facendo le sostituzioni di $\mathbf{p}_1 \to -i\hbar\nabla_{r_1}$ e $\mathbf{p}_2 \to -i\hbar\nabla_{r_2}$ si ottiene l'operatore hamiltoniano quantistico e di conseguenza l'equazione di Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2m_1}\nabla_{r_1}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_2}\nabla_{r_2}^2 + V(\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2})\right]\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, t) \ . \tag{2}$$

A questo punto è utile un cambiamento di coordinate per poter risolvere il problema. Si introduce la coordinata relativa $\mathbf{r} = \mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}$ e il vettore $\mathbf{R}$ che determina la posizione del centro di massa, definito come $R = \frac{m_1\mathbf{r_1} + m_2\mathbf{r_2}}{m_1+m_2}$. Inoltre vengono introdotte le variabili M e μ definite come: $M = m_1 + m_2$ e $m = \dfrac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$. Con queste nuove variabili l'equazione di Schrödinger (2) diventa:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) = \left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla_R^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_r^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}, t) \ . \tag{3}$$

L'equazione di Schrodinger ottenuta è formata da una parte indipendente dal tempo, che descrive il centro di massa di una particella di massa M, e una che descrive il moto relativo delle due particelle. Poiché la prima equazione

è facilmente risolvibile è bene concentrarsi sulla seconda che una volta risolta insieme alla prima darà la soluzione complessiva del problema (l'energia totale è la somma delle energie e la funzione d'onda totale il prodotto delle singole funzioni d'onda). Per quanto detto bisogna focalizzarsi sull'equazione:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\Psi(\mathbf{r},t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\mathbf{r},t) \ , \tag{4}$$

da cui è possibile ricondursi all'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r},t) = E\psi(\mathbf{r},t) \ , \tag{5}$$

che ha soluzioni stazionarie del tipo:

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \psi(\mathbf{r})e^{-}\frac{iEt}{\hbar} \ , \tag{6}$$

dove E è l'energia della particella. Assumendo che la particella provenga da $r \to -\infty$, poichè $\lim_{r\to\infty} V(r) \to 0$ l'energia incidente è:

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{1}{2}mv^2 \ , \tag{7}$$

e

$$p = |\mathbf{p}_i| = |\mathbf{p}_f|, \quad k = |\mathbf{k}_i| = |\mathbf{k}_f|, \quad v = |\mathbf{v}_i| = |\mathbf{v}_f|,$$

sono definiti come il momento, il vettore d'onda e la velocità. L'equazione (5) può essere semplificata introducendo il potenziale ridotto:

$$U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r}) \ , \tag{8}$$

così da avere:

$$\left[\nabla^2 + k^2 - U(\mathbf{r})\right]\psi(\mathbf{r}) = 0 \ . \tag{9}$$

E' lecito pensare che l'azione del potenziale sia praticamente nulla a grandi distanze (assumendo che vada all'infinito più velocemente di 1/r) il che significa che l'equazione di Schrödinger per grandi r diventa:

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\psi(\mathbf{r}) = 0 \ . \tag{10}$$

Poiché queste osservazioni sono fatte molto lontano dalla regione in cui è avvenuto lo scattering la soluzione asintotica è la somma della funzione d'onda incidente e della funzione d'onda uscente,

$$\lim_{r\to\infty}\psi_{\mathbf{k}_i} \sim \psi_{inc}(\mathbf{r}) + \psi_{sc}(\mathbf{r}) \ , \tag{11}$$

inoltre dal momento che le particelle incidenti viaggiano tutte nella stessa direzione $\mathbf{k}_i$ (che prendo parallelo all'asse Z) e sono approssimativamente monoenergetiche si può considerare il fascio incidente come un onda piana. Un analogo

ragionamento può essere fatto per il fascio uscente, infatti la funzione d'onda diffusa descrive un flusso di particelle uscenti dalla regione di interazione e può essere descritto come un'onda sferica uscente. Nel complesso si può scrivere quindi:

$$\lim_{r\to\infty} \psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) \sim A\left[e^{i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{r}} + f(k,\theta,\phi)\frac{e^{ikr}}{r}\right]. \tag{12}$$

La prima parte rappresenta un'onda piana e la seconda un'onda sferica con A costante di normalizzazione tale che $|\psi_{inc}|^2 = A^2$.
Inoltre nell'equazione (12) compare f che è detta ampiezza di scattering e che per definizione descrive l'ampiezza dell'onda sferica prodotta dall'interazione di un'onda piana con una particella puntiforme. Essa è particolarmente importante perché permette di trovare la sezione d'urto differenziale che, come detto, è fondamentale per studiare i fenomeni di scattering.

1.2 Relazione tra sezione d'urto differenziale e ampiezza di scattering

La sezione d'urto differenziale $\frac{d\sigma}{d\Omega}$ è definita come il rapporto tra il flusso di particelle uscenti passanti attraverso l'area $r^2 d\Omega$ e il flusso incidente, cioè come:

$$\frac{F_{sc} r^2 d\Omega}{F_{inc}} \ .$$

Si ricordi a questo punto la definizione di densità di corrente:

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right] \ , \tag{13}$$

vale a dire il numero di particelle che attraversano la superficie unitaria nell'unità di tempo. Per trovare il flusso di particelle entranti e quindi il flusso incidente bisogna sostituire nell'espressione di $\mathbf{j}\cdot\hat{r}$, corrente radiale entrante, la funzione d'onda incidente nell'equazione (13). Allo stesso modo per trovare il flusso uscente bisogna sostituire la funzione d'onda (sferica) uscente. Per prima cosa è necessario trovare F_{inc} scrivendo l'espressione della corrente di probabilità in termini della sua componente radiale, la quale è ottenuta sviluppando il gradiente in coordinate sferiche:

$$\mathbf{j}_r = \mathbf{j}_{inc}\cdot\hat{\mathbf{r}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial r}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial r}\psi^*\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left[|A|^2 e^{-ik_i r} ik_i e^{ik_i r} + |A|^2 e^{ik_i r} ik_i e^{-ik_i r}\right] =$$

$$= \frac{\hbar}{2mi}\left[2i|A|^2 k_i\right] \Rightarrow \mathbf{j}_r = |A|^2\frac{k_i\hbar}{m} = |A|^2 v \ .$$

Quindi si è ottenuto $F_{inc} = |A|^2 v$ e analogamente con lo stesso ragionamento si può trovare F_{sc}:

$$\mathbf{j}_r = \mathbf{j}_{sc}\cdot\hat{\mathbf{r}} = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\frac{\partial}{\partial r}\psi - \psi\frac{\partial}{\partial r}\psi^*\right]$$

$$\frac{\hbar}{2mi}\left[|A|^2|f|^2\frac{e^{-ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{ikr}}{r}-|A|^2|f|^2\frac{e^{ikr}}{r}\frac{\partial}{\partial r}\frac{e^{-ikr}}{r}\right]$$

$$\frac{|A|^2|f|^2}{r}\frac{\hbar}{2mi}\left[e^{-ikr}\left(\frac{irke^{ikr}-e^{ikr}}{r^2}\right)-e^{ikr}\left(\frac{irke^{-ikr}-e^{-ikr}}{r^2}\right)\right]$$

$$\frac{|A|^2|f|^2}{r}\frac{\hbar}{2mi}\left[\frac{ikr-1}{r^2}+\frac{ikr+1}{r^2}\right]$$

$$\frac{|A|^2|f|^2}{r}\frac{\hbar}{2mi}\left[\frac{2irk}{r^2}\right]=\frac{|A|^2|f|^2}{r^2}\frac{\hbar k}{m}=\frac{|A|^2|f|^2}{r^2}v\ .$$

Adesso che sono noti F_{sc} e F_{inc} , ricordando la definizione di sezione d'urto è possibile ricavare la sezione d'urto differenziale:

$$d\sigma=\frac{F_{sc}r^2d\Omega}{F_{inc}}=|f|^2d\Omega\ ,$$

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}=|f|^2\ . \tag{14}$$

Avendo compreso l'importanza dell'ampiezza di scattering per conoscere la sezione d'urto si può tornare al problema iniziale che per l'appunto sarà risolto in termini dell'ampiezza.

1.3 Equazione integrale del potenziale di scattering

Dopo le precisazioni fatte sulla sezione d'urto e l'ampiezza di scattering si torni all'equazione di Schrödinger che descrive il sistema:

$$\left(\nabla^2+k^2\right)\psi(k,\mathbf{r})=U(\mathbf{r})\psi(k,\mathbf{r})\ . \tag{15}$$

La soluzione generale del problema è scritta tramite l'utilizzo della funzione di Green che soddisfa l'equazione:

$$\left(\nabla^2+k^2\right)G(\mathbf{r},\mathbf{r}')=\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\ . \tag{16}$$

Per le proprietà della delta di Dirac si può scrivere:

$$U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})=\int U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d\mathbf{r}'=$$

$$=\int U(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}')\left(\nabla^2+k^2\right)G(\mathbf{r},\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\ ,$$

da cui segue che mettendo a sistema quest'ultima equazione con la (15) si ottiene la soluzione generale:

$$\psi(k,\mathbf{r})=\phi(k,\mathbf{r})+\int G_0(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi(k,\mathbf{r}')d\mathbf{r}'\ , \tag{17}$$

dove la ϕ è la soluzione dell'omogenea associata

$$\left(\nabla^2 + k^2\right)\phi(k,\mathbf{r}) = 0 \ .$$

A questo punto si costruisce una soluzione dell'equazione (16). Per farlo bisogna ricordare la formulazione integrale della delta di Dirac,

$$\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}') = (2\pi)^{-3}\int e^{i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}d\mathbf{k}' \ , \tag{18}$$

e sostituire la trasformata di Fourier della funzione di Green:

$$G_0(k,\mathbf{r},\mathbf{r}') = (2\pi)^{-3}\int e^{i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}}g_0(k,\mathbf{k}',\mathbf{r}')d\mathbf{k}' \ , \tag{19}$$

nell'equazione (16). Si ottiene:

$$g_0(k,\mathbf{k}',\mathbf{r}') = \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{r}'}}{k^2 - k'^2} \ , \tag{20}$$

e di conseguenza

$$G_0(k,\mathbf{r},\mathbf{r}') = -(2\pi)^{-3}\int \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}}{k'^2 - k^2}d\mathbf{k}' \ . \tag{21}$$

Tramite il cambio di variabile $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ è possibile riscrivere la $G_0(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')$ come:

$$G_0(k,\mathbf{r},\mathbf{r}') = -(2\pi)^{-3}\int \frac{e^{-i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{R}}}{k'^2 - k^2}d\mathbf{k}' =$$

$$= -(2\pi)^{-3}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} k'^2 dk' \int_0^{\pi} \sin\theta d\theta \frac{e^{-ik'R\cos\theta}}{k'^2 - k^2} \ ,$$

e applicando il cambio di variabile $x = cos\theta$ per semplificare l'integrazione si ha:

$$-(2\pi)^{-2}\int_0^{\infty} k'^2 dk' \int_{-1}^{1}\left(-\frac{e^{-ik'Rx}}{k'^2 - k^2}\right)dx =$$

$$= -(2\pi)^{-2}\int_0^{\infty} k'^2 dk' \left[\frac{e^{-ik'Rx}}{-ik'R(k'^2 - k^2)}\right]_1^{-1} =$$

$$G_0(k,R) = -\frac{1}{4\pi^2 R}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k'\sin k'R}{k'^2 - k^2}dk' \ . \tag{22}$$

Inoltre introducendo le quantità I_1 e I_2 definite come:

$$I_1 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ik'R}\left(\frac{1}{k'-k} + \frac{1}{k'+k}\right)dk' \ , \tag{23}$$

$$I_2 = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik'R}\left(\frac{1}{k'-k} + \frac{1}{k'+k}\right)dk' \ , \tag{24}$$

si può scrivere:

$$G_0(k,R) = \frac{i}{16\pi^2 R}\left(I_1 - I_2\right) \ . \tag{25}$$

Per calcolare gli integrali I_1 e I_2 conviene considerare integrali di linea nel piano complesso k' circondando i poli, nel caso di I_1, tramite il "percorso" P, come si può vedere in Figura 2 (a). Si calcola poi l'integrale lungo C, dato dalla somma del percorso P più il semicerchio C_1. Per quanto riguarda l'integrale sul semicerchio basta applicare il lemma di Jordan e notare che nel limite per $k' \to \infty$ tende a zero. L'integrale lungo P è, quindi, ottenuto con il teorema dei residui: $I_1 = 2\pi i e^{ikR}$. Allo stesso modo si ottiene il secondo integrale utilizzando questa volta il percorso (c) in Figura 2 ottenendo $I_2 = -2\pi i e^{ikR}$. La scelta dei contorni di integrazione riportati in Figura 2 permette di ottenere la funzione di Green che ha il corretto comportamento asintotico che è quello di un'onda sferica uscente in accordo con l'equazione (12).

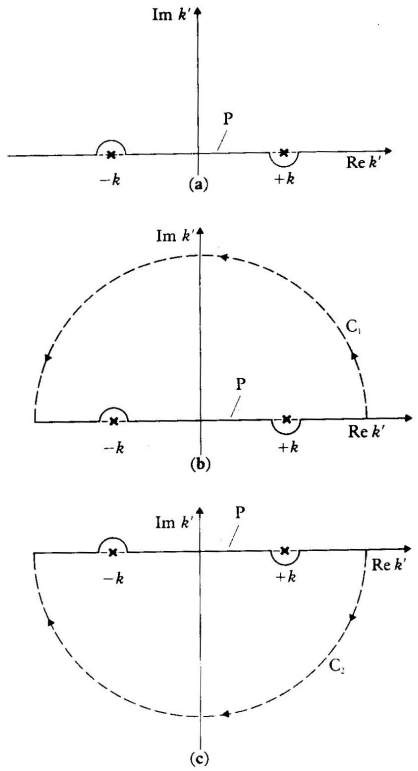

Figura 2: Percorsi di integrazione intorno alle singolarità

A questo punto sostituendo I_1 e I_2 è possibile ricavare ${G_0}^{(+)}(k, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ espresso in funzione di $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$:

$$ {G_0}^{(+)}(k, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik\mathbf{R}}}{\mathbf{R}} = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \ . \tag{26} $$

Proprio come richiesto la funzione ottenuta ha un andamento per r molto grande concorde con un onda sferica e si può quindi sostituire la funzione di Green appena ottenuta nell'espressione (17) ricavando:

$$ \psi_{k_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{4\pi}\int \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \ . \tag{27} $$

Così facendo in un'unica espressione si ottiene la soluzione dell'equazione di Schrödinger con le corrette condizioni a contorno. Questa funzione è particolarmente utile poichè il suo limite per r che tende all'infinito, se confrontato con l'equazione (12), permette di calcolare l'ampiezza di scattering. Prima però è bene fare delle considerazioni di carattere generale sugli apparati sperimentali. Infatti in un esperimento di scattering, poichè il rivelatore è collocato lontano dal "target" relativamente alle dimensioni dello stesso, ha senso studiare il comportamento per r molto grande e cioè per $r' \ll r$. In questa condizione, come si evince dalla Figura (3), si ha:

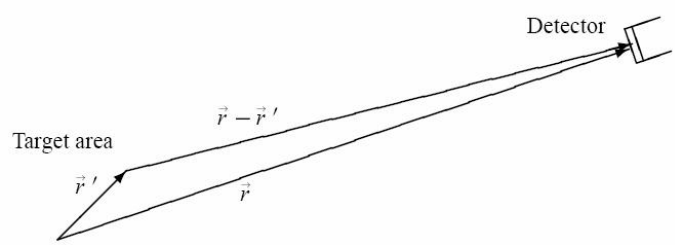

Figura 3: Confronto tra le dimensioni del "target" e la posizione del rivelatore

$$ |\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \to r - \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{r}' + ... \ , $$
$$ \frac{1}{\mathbf{r} - \mathbf{r}'} = \frac{1}{r}\frac{1}{|1 - \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/\mathbf{r}^2|} \sim \frac{1}{r}\left(1 + \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r^2}\right) \sim \frac{1}{r} \ , $$

e di conseguenza:

$$ \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \to \frac{e^{ik\mathbf{r}}}{r} e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} \ , \tag{28} $$

con $\mathbf{k}_f = \mathbf{k}\hat{\mathbf{r}}$. Queste considerazioni permettono di esprimere il limite della $\psi_{\mathbf{k}_i}(r)$ (27) come:

$$ \lim_{r\to\infty} \psi_{\mathbf{k}_i}(r) \to e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - \frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik\mathbf{r}}}{r}\int e^{-i\mathbf{k}_f \cdot \mathbf{r}'} U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \ . \tag{29} $$

Si evince subito, dal confronto con (12), che l'ampiezza di scattering, nella sua rappresentazione integrale, vale:

$$f = -\frac{1}{4\pi}\int e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'}U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' = -\frac{1}{4\pi}\left\langle \phi_{\mathbf{k}_f}\left|U\right|\psi_{\mathbf{k}_i}\right\rangle , \tag{30}$$

dove $\phi_{\mathbf{k}_f} = e^{-i\mathbf{k}_f\cdot\mathbf{r}'}$.

1.4 Serie e approssimazione di Born

E' ovvio che nella forma in cui si presenta la f bisogna conoscere la soluzione del problema, vale a dire $\psi_{\mathbf{k}_i}$, per poterla calcolare. Per questo motivo la strada che si intraprende a questo punto consiste nel fare un' approssimazione. In particolare si considera:

$$\psi_{k_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}}\cdot\mathbf{r} - \frac{1}{4\pi}\int {G_0}^{(+)}(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \ , \tag{31}$$

che può essere risolta in maniera iterativa. Cioè all'ordine zero questa funzione sarà data dal considerare solo l'onda piana incidente (cioè $\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}') = 0$), poi all'ordine uno la funzione si ottiene sostituendo al posto di $\psi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')$ la funzione ottenuta all'ordine 0 e così via ricavando una sequenza di funzioni in cui ciascuna si ottiene conoscendo la soluzione della precedente.

$$\psi_0(\mathbf{r}') = \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}}$$

$$\psi_1(\mathbf{r}') = \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) + \int {G_0}^{(+)}(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_0(\mathbf{r}')d\mathbf{r}'$$

$$\vdots$$

$$\psi_n(\mathbf{r}') = \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) + \int {G_0}^{(+)}(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\psi_{n-1}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' \ .$$

La convergenza dell'ennesimo termine alla $\psi_{\mathbf{k}_i}$ è da mostrare nel caso specifico. Se quest'ultima è verificata allora è giustificata la seguente espansione perturbativa del potenziale d'interazione che prende il nome di Serie di Born:

$$\psi_{\mathbf{k}_i} = \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}) + \int {G_0}^{(+)}(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}')\phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}')d\mathbf{r}' +$$

$$+ \int {G_0}^{(+)}(k,\mathbf{r},\mathbf{r}')U(\mathbf{r}'){G_0}^{(+)}(k,\mathbf{r}',\mathbf{r}'')U(\mathbf{r}'')\phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r}'')d\mathbf{r}'d\mathbf{r}'' + ... \ , \tag{32}$$

che se sostituita nell'ampiezza di scattering restituisce:

$$f = -\frac{1}{4\pi}\left\langle \phi_{\mathbf{k}_f}\left|U + U{G_0}^{(+)}U + U{G_0}^{(+)}U{G_0}^{(+)}U + ...\right|\phi_{\mathbf{k}_i}\right\rangle \ . \tag{33}$$

La prima approssimazione di Born consiste nel prendere solo il primo termine della serie di Born vale a dire $\psi_{\mathbf{k}_i} = \phi_{\mathbf{k}_i}(\mathbf{r})$ così da avere la seguente approssimazione per f:

$$f_{B1} = \frac{1}{4\pi} \left\langle \phi_{\mathbf{k}_f} \left| U \right| \phi_{\mathbf{k}_i} \right\rangle \ . \tag{34}$$

Dal momento che $\phi_{\mathbf{k}_f}$ e $\phi_{\mathbf{k}_i}$ sono noti possono essere sostituite in f_{B1} ottenendo:

$$\begin{aligned} f_{B1} &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{i(\mathbf{k}_i - \mathbf{k}_f)\cdot \mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}} U(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \ , \end{aligned} \tag{35}$$

con $\mathbf{\Delta} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ vettore d'onda trasferito.

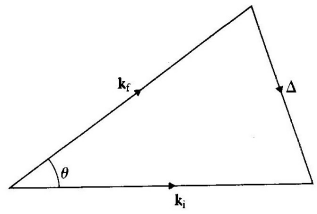

Figura 4: Momento trasferito

Il momento trasferito è dato da $\hbar\mathbf{\Delta}$ (che è uguale a $\mathbf{\Delta}$ nel sistema di unità atomiche dove $\hbar = 1$) e il modulo di $\mathbf{\Delta}$, tenendo in considerazione che nello scattering elastico i moduli di $\mathbf{k}_f$ e $\mathbf{k}_i$ sono uguali, vale:

$$|\mathbf{\Delta}| = \Delta = \sqrt{{k_i}^2 + {k_f}^2 - 2k_i k_f \cos\theta} = k\sqrt{2(1-\cos\theta)} = 2k \sin\frac{\theta}{2} \ . \tag{36}$$

Ricordando la relazione tra l'ampiezza di scattering e la sezione d'urto differenziale, nella prima approssimazione di Born, si ha:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} = |f_{B1}|^2 \ . \tag{37}$$

Per trovare la sezione d'urto totale bisogna integrare la sezione d'urto differenziale e per farlo si considera il potenziale centrale in modo da semplificare i calcoli e da poter scrivere f_{B1} come:

$$f_{B1} = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}} U(r) d\mathbf{r} =$$

$$= -\frac{1}{4\pi} \iiint \ e^{i\Delta r \cos\theta} U(r) r^2 \sin\theta dr \, d\theta \, d\varphi =$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} r^2 U(r)\, dr \int_0^{\pi} e^{i\Delta r\cos\theta}\sin\theta\, d\theta =$$

$$= -\frac{1}{4\pi}\left[2\pi\int_0^{\infty} r^2 U(r)\, dr \int_{-1}^{1} e^{i\Delta r x}\, dx\right] \ ,$$

dove si è operata la sostituzione $cos\theta = x$,

$$-\frac{1}{4\pi}\left[2\pi\int_0^{\infty} r^2 U(r)\frac{e^{i\Delta r} - e^{-i\Delta r}}{i\Delta r}\right] =$$

$$= \frac{4\pi}{\Delta}\int_0^{\infty} r\sin(\theta r) U(r)\, dr \ . \tag{38}$$

La sezione d'urto totale risulta quindi essere:

$$\sigma^{B1}{}_{tot} = \int |f_{B1}|^2\, d\Omega = \iint |f_{B1}|^2 \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = 2\pi\int_0^{\pi} |f_{B1}|^2 \sin\theta\, d\theta \ , \tag{39}$$

e ricordando la definizione di Δ (36) si nota che:

$$\frac{\Delta d\Delta}{k^2} = \frac{2k\sin(\frac{\theta}{2})k\cos(\frac{\theta}{2})\, d\theta}{k} = \sin\theta\, d\theta \ , \tag{40}$$

da cui segue che:

$$\sigma^{B1}{}_{tot} = \frac{2\pi}{k^2}\int_0^{2k} |f_{B1}|^2 \Delta\, d\Delta \ . \tag{41}$$

Questa nuova forma è molto utile per notare l'andamento all'infinito della sezione d'urto totale infatti:

$$\lim_{k\to\infty}\left[k^2\sigma^{B1}{}_{tot}\right] = 2\pi\int_0^{2k} |f_{B1}|^2 \Delta\, d\Delta \ . \tag{42}$$

La quantità a destra non dipende da k il che vuol dire che per grandi valori di k la sezione d'urto totale deve avere un andamento del tipo $\frac{1}{k^2}$. Inoltre poichè $E = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$ si può dire che:

$$\sigma^{B1}{}_{tot} \sim AE^{-1} \qquad \text{(per E che tende all'infinito)} \ . \tag{43}$$

Per trovare una formula precisa e non un andamento è necessario sostituire un potenziale U(r), come ad esempio il potenziale di Yukawa.

1.5 Scattering Coulombiano

Nel caso in cui l'atomo "target" e la particella diffusa sono carichi è presente un potenziale coulombiano tra loro che è molto importante quando le particelle cariche sono vicine e diventa sempre più irrilevante quando si trovano a grande distanza. Per atomi con pochi elettroni l'effetto di schermaggio può essere riassorbito in una rinormalizzazione della carica effettiva. Nel seguito consideriamo:

$$V(r) = 2m\frac{Z_1 Z_2 e^2}{r\hbar^2} = \frac{a}{r}, \qquad r < R,$$

(dove si pone $a = 2m\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar^2}$).
Di conseguenza l'equazione di Schrödinger per un potenziale puramente coulombiano è riscrivibile come:

$$\left[\nabla^2 + k^2 - \frac{a}{r}\right]\psi(r) = 0 \ . \tag{44}$$

Questa equazione è risolvibile in coordinate paraboliche definite in questo modo $x = \xi\eta\cos\varphi$, $y = \xi\eta\sin\varphi$, $z = \frac{1}{2}\left(\xi^2 - \eta^2\right)$ e quindi:

$$\xi = r + z$$

$$\eta = r - z$$

$$\varphi = \tan^{-1}\left(\frac{y}{x}\right)$$

(dove $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$).
L'equazione di Schrödinger in coordinate paraboliche diventa :

$$\left(\frac{4}{\xi+\eta}\right)\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial\psi}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial\psi}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\eta\xi}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + \left[k^2 - \frac{2a}{\xi+\eta}\right]\psi = 0 \ . \tag{45}$$

Poichè la ψ è fattorizzabile si scrive:

$$\psi = f_1(\xi)f_2(\eta)e^{im\varphi} \ , \tag{46}$$

e per via della simmetria intorno all'asse z si può considerare m=0 così da avere:

$$\psi = f_1(\xi)f_2(\eta) \ , \tag{47}$$

che sostituita nell'equazione di Schrödinger (45) restituisce:

$$\left(\frac{4}{\xi+\eta}\right)\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\xi\frac{\partial f_1(\xi)f_2(\eta)}{\partial\xi}\right) + \frac{\partial}{\partial\eta}\left(\eta\frac{\partial f_1(\xi)f_2(\eta)}{\partial\eta}\right)\right] + \frac{1}{\eta\xi}\frac{\partial^2 f_1(\xi)f_2(\eta)}{\partial\varphi^2} +$$

$$+ \left[k^2 - \frac{2a}{\xi+\eta}\right]f_1(\xi)f_2(\eta) = 0 \tag{48}$$

$$\left(\frac{4}{\xi+\eta}\right)\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right) + \left(\frac{4}{\xi+\eta}\right)\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right) + \left[k^2 - \frac{2a}{\xi+\eta}\right]f_1(\xi)f_2(\eta) = 0$$

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left(\frac{k^2(\eta+\xi)}{4}-\frac{a}{2}\right)f_1f_2=0\ . \tag{49}$$

Introducendo β per la separazione delle variabili si ha:

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi\frac{df_1}{d\xi}\right)+\left(\frac{k^2\xi}{4}+\beta\right)f_1=0\ , \tag{50}$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left(\frac{k^2\eta}{4}-\beta-\frac{a}{2}\right)f_2=0\ . \tag{51}$$

Per poterle risolvere bisogna utilizzare le condizioni al contorno, infatti si può considerare l'onda incidente a grande distanza dalla regione di interazione come un'onda piana del tipo:

$$e^{ikz}=e^{ik(\xi-\eta)/2}\qquad\text{(per }\eta\text{ che tende all'infinito)}\ . \tag{52}$$

Questa condizione è soddisfatta prendendo $\beta=-\frac{1}{2}ik$ e in questo caso:

$$f_1(\xi)=e^{ik\xi/2}\ , \tag{53}$$

(infatti con questa scelta di β è facile notare che si prendono i termini che moltiplicano f_1 uguali ai risultati delle derivate). Sostituendo β nell'equazione di f_2 (51) si ottiene:

$$\frac{d}{d\eta}\left(\eta\frac{df_2}{d\eta}\right)+\left(\frac{k^2\eta}{4}+\frac{1}{2}ik-\frac{a}{2}\right)f_2=0\ , \tag{54}$$

e per soddisfare la condizione al contorno (52) f_2 deve avere un andamento pari a :

$$f_2(\eta)=e^{-\frac{1}{2}ik\eta}w(\eta)\ , \tag{55}$$

con $w(\eta)$ che ovviamente deve diventare costante per $\eta\to\infty$. Andando a sostituire nella (54) questa espressione di f_2 si ha:

$$\eta\frac{d^2w}{d\eta^2}+(1-ik\eta)\frac{dw}{d\eta}-\left(\frac{a}{2}\right)w=0\ . \tag{56}$$

Questa equazione è soddisfatta dalla funzione ipergeometrica confluente definita dalla seguente espansione:

$$F(\mathrm{a},b,x)=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\Gamma(\mathrm{a}+n)\Gamma(b)}{\Gamma(b+n)\Gamma(\dashv)}\frac{x^n}{n!}\quad\text{(dove }\Gamma\text{ è la funzione gamma di Eulero)}, \tag{57}$$

che è per l'appunto la soluzione dell'equazione:

$$x\frac{d^2F}{dx^2}+(b-x)\frac{dF}{dx}-aF=0\ . \tag{58}$$

Quest'ultima è proprio l'equazione di $w(\eta)$ da risolvere con a $= -1a/2k$, $b = 1$, $x = ik\eta$. Quindi la soluzione dell'equazione di Schrodinger (45) iniziale è

$$\psi = f_1(\xi) f_2(\eta) = e^{ik\xi/2} e^{-\frac{1}{2}ik\eta} w(\eta) =$$

$$= e^{ikz} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\Gamma(-1a/2k+n)\Gamma(1)}{\Gamma(1+n)\Gamma(-1a/2k)} \frac{ik\eta^n}{n!} \ , \tag{59}$$

che in coordinate polari sferiche può essere scritta come:

$$\psi_k^{c^+} = Ce^{ikz} F(-ia/2k, 1, ikr(1-\cos\theta)) \ , \tag{60}$$

(C è una costante). La forma asintotica della funzione ipergeometrica confluente, per grandi valori di x(e quindi per $\eta \to \infty$), è

$$F(\mathrm{a}, b, x) \sim \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(b-\mathrm{a})} e^{-\mathrm{a}\log(-x)} \left[1 + \frac{\mathrm{a}(\mathrm{a}+1-b)}{x} + ...\right] +$$

$$+ \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(\mathrm{a})} e^{x+(\mathrm{a}-b)\log x} \left[1 + \frac{(1-\mathrm{a})(b-\mathrm{a})}{x} + ...\right] \ , \tag{61}$$

e quindi la forma asintotica della funzione d'onda è

$$\psi_k^{c^+} \sim C \frac{e^{a\pi/4k}}{\Gamma(1+ia/2k)} \left[\left\{1 - \frac{a^2}{4ik^3 r(1-\cos\theta)}\right\} e^{i[kz+(a/2k)\log kr(1-\cos\theta)]} + \right] ...$$

$$... \left[f_k^c(\theta) r^{-1} e^i [kr - (a/2k)\log 2kr]\right] \ , \tag{62}$$

(Normalizzando risulta $C = \Gamma(1+ia/2k)e^{-a\pi/4k}$). L'ampiezza di scattering che compare nell'espressione precedente vale:

$$f_k^C(\theta) = -\frac{a}{4k^2 \sin^2\theta/2} \frac{\Gamma(1+ia/2k)}{\Gamma(1-ia/2k)} e^{-i(a/2k)\log\sin^2\theta/2} \ , \tag{63}$$

da cui si può ricavare la sezione d'urto differenziale

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = |f_k^C(\theta)|^2 = \frac{a^2}{16k^4 \sin^4\theta/2} \ , \tag{64}$$

che risulta uguale a quella ottenuta nel caso classico. Si noti che il caso coulombiano è l'unico in cui la sezione d'urto classica e quella quantistica coincidono, ovviamente nel caso classico l'ampiezza di scattering non ha una fase, che invece è presente nel caso quantistico.

2 COLLISIONI TRA ELETTRONI E ATOMI

Avendo compreso le basi dello scattering dovuto a un potenziale adesso si possono usare i risultati ottenuti per studiare le collisione tra elettroni e atomi partendo dal caso elastico, limitandoci al caso dell'atomo d'idrogeno. Come nel primo Capitolo, il primo paragrafo sarà dedicato allo studio delle condizioni al contorno della funzione d'onda dello scattering elettrone-atomo, e alla relazione tra le ampiezze di scattering (diretto e di scambio) con la sezione d'urto differenziale. Nel secondo paragrafo sarà illustrato il metodo dello "static exchange" che considera solo una parte dei canali aperti e trascura quelli chiusi ma che fornisce un'ottima stima della sezione d'urto differenziale come varrà mostrato nel caso particolare dell'atomo di elio. Nel terzo paragrafo sulla base del metodo precedente verrà impostato il metodo "close coupling" che risulta molto accurato in quanto tiene in considerazione le deformazione del "target" che avvengono durante l'interazione. Nel quarto paragrafo sarà analizzato il caso anelastico studiato utilizzando nuovamente il metodo "close coupling" per ottenere la sezione d'urto differenziale dello scattering anelastico.

2.1 Sezione d'urto differenziale generica e condizioni al contorno

Per prima cosa è bene utilizzare opportune condizione che semplifichino il problema. Innanzitutto è opportuno considerare che il protone sia il centro del sistema di riferimento e che abbia massa infinita, essendo quest'ultima circa 2000 volte più grande, così da poter considerare il protone fermo. Inoltre sono dette $\mathbf{r_1}$ e $\mathbf{r_2}$ le distanze rispettivamente tra elettrone incidente e il protone e tra l'elettrone dell'idrogeno e il protone. In queste condizioni, usando le unità atomiche, si può scrivere un'equazione di Schrödinger per la parte radiale che soddisfi il problema. Ovviamente quest'ultima dovrà contenere i contributi cinetici dei due elettroni, i loro contributi di interazione con il protone e l'interazione reciproca tra loro:

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{\mathbf{r_1}} - \frac{1}{\mathbf{r_2}} + \frac{1}{|\mathbf{r_1} - \mathbf{r_2}|} - E_{tot}\right]\psi(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = 0 \ . \tag{65}$$

Per via della degenerazione di scambio la parte spaziale può essere simmetrica ψ_+ o antisimmetrica ψ_- a cui sono associate rispettivamente una parte di spin antisimmetrica $S = 1$ di tripletto o simmetrica $S = 0$ di singoletto. Proprio come fatto nella sezione precedente bisogna stabilire delle condizioni al contorno che aiutino a risolvere il problema. Per fare ciò si considera il caso in cui l'idrogeno sia nello stato fondamentale ψ_{100} (dove i pedici stanno ad indicare i numeri quantici n, l e m) e si valuta l'energia del sistema. L'energia totale sarà data dalla somma dell'energia dell'idrogeno nello stato fondamentale e dell'energia cinetica dell'elettrone incidente:

$$E_{tot} = E_{100} + \frac{1}{2}k_1^2 \ . \tag{66}$$

Se l'energia incidente non è sufficiente ad eccitare l'atomo nel livello successivo la funzione d'onda del problema per $\mathbf{r_1} \gg \mathbf{r_2}$ potrà essere scritta come prodotto della funzione che descrive l'atomo di idrogeno ψ_{100} e della funzione d'onda della particella libera che verrà chiamata $F_1^{\pm}$:

$$\lim_{r_1 \to \infty} \psi_{\pm}(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) \sim F_1^{\pm}(\mathbf{r_1}) \psi_{100}(\mathbf{r_2}) \ . \tag{67}$$

Per simmetria della funzione d'onda si ha anche:

$$\lim_{r_2 \to \infty} \psi_{\pm}(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) \sim F_1^{\pm}(\mathbf{r_2}) \psi_{100}(\mathbf{r_1}) \ . \tag{68}$$

Proprio come visto nella sezione precedente la funzione d'onda $F_1^{\pm}(\mathbf{r})$ deve contenere un'onda piana incidente e un'onda sferica uscente e affinchè queste condizioni al contorno vengano soddisfatte, prendendo la direzione del fascio incidente lungo l'asse z, la $F_1^{\pm}(\mathbf{r})$ può essere scritta come:

$$\lim_{r_1 \to \infty} F_1^{\pm}(\mathbf{r_1}) \sim e^{ik_1 z_1} + f_1^{\pm}(k_1, \theta, \varphi) \frac{e^{ik_1 r_1}}{r_1} \ , \tag{69}$$

che per le considerazioni fatte sull'energia è valida soltanto a basse energie. Avendo una funzione d'onda simmetrica e una antisimmetrica si hanno due ampiezze di scattering f_1^+ e f_1^- che servono per determinare la sezione d'urto differenziale. Se l'orientazione degli atomi di idrogeno e degli elettroni è casuale ci si aspetta che le collisioni nello stato di tripletto diano tre volte quelle nello stato di singoletto.

$$\frac{d\sigma_{11}}{d\Omega} = \frac{1}{4}|f_1^+|^2 + \frac{3}{4}|f_1^-|^2 \ , \tag{70}$$

dove il pedice 11 indica che lo scattering considerato è di tipo elastico (dallo stato 1 prima dell'interazione allo stato 1 dopo l'interazione). Per quanto riguarda invece le alte energie le condizioni al contorno vanno riviste perchè possono verificarsi eccitazioni o ionizzazioni. Per prima cosa per semplificare la notazione invece di usare i numeri quantici nlm si indica ciascun stato (ciascun tripletto di numeri quantici) con la q, quindi allo stato fondamentale corrisponde a $q = 1$ e così via per gli stati eccitati, che avranno una funzione d'onda ψ_q e un'energia E_q. Per la conservazione dell'energia, l'energia cinetica di un elettrone uscente dalla regione di scattering, che ha provocato un'eccitazione dell'elettrone dallo stato fondamentale al livello q, sarà:

$$\frac{1}{2}{k_q}^{\mathbf{2}} = E_{tot} - E_q = \frac{1}{2}{k_1}^{\mathbf{2}} + (E_1 - E_q) \ , \tag{71}$$

dove per i canali aperti ${k_q}^{\mathbf{2}} \geq 0$. Per grandi valori di r_1, ($r_1 \gg_2$), proprio come prima, la funzione d'onda può essere rappresentata dal prodotto della funzione d'onda di un elettrone uscente con energia cinetica $\frac{1}{2}{k_q}^{\mathbf{2}}$ e della funzione d'onda dell'idrogeno nello stato eccitato. Bisogna considerare inoltre che l'eccitazione può avvenire verso vari stati q a seconda dell'energia della particella uscente

quindi possono esserci più canali (N) da andare a considerare:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \sim \sum_{q=1}^{N} F_q^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_q(\mathbf{r_2}) \ . \tag{72}$$

In ciascun canale deve esserci un'onda sferica uscente dalla regione di interazione mentre in entrata deve essere presente solo l'onda piana che rappresenta l'elettrone incidente (vale a dire l'elettrone entrante di energia cinetica $\frac{1}{2}k_1{}^{\mathbf{2}}$). Queste considerazioni permettono di scrivere l'andamento di F per grandi valori di $\mathbf{r_1}$:

$$\lim_{r_1\to\infty} F_q^{\pm}(\mathbf{r_1}) \sim e^{ik_1z_1}\delta_{q1} + f_q^{\pm}(k_1,\theta,\varphi)\frac{e^{ik_qr_1}}{r_1} \ , \tag{73}$$

da cui si ricava:

$$\lim_{r_1\to\infty} \psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \to e^{ik_1z_1}\psi_1(\mathbf{r}_2) + \sum_q f_{q1}{}^{\pm}(k_i,\theta,\varphi)\frac{e^{ik_qr_1}}{r_1}\psi_q(\mathbf{r}_2) \ . \tag{74}$$

Proprio come nel capitolo precedente sfruttando il rapporto tra il flusso uscente e il flusso entrante si calcola la sezione d'urto differenziale:

$$\frac{d\sigma_{q1}}{d\Omega} = \frac{k_q}{k_1}\left[\frac{1}{4}|f_q^+|^2 + \frac{3}{4}|f_q^-|^2\right] . \tag{75}$$

In questa forma si sta considerando anche l'ampiezza di scattering di scambio che tiene conto del possibile scambio tra l'elettrone incidente e quello legato, essendo i due indistinguibili. Esplicitando quanto detto nel caso più generale possibile, cioè da uno stato iniziale $|\mathbf{k}_i, i\rangle$ a uno stato finale $|\mathbf{k}_f, f\rangle$, le condizioni al contorno diventano:

$$\lim_{r_1\to\infty} \psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \sim \sum_j F_j^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_j(\mathbf{r_2}) \ , \tag{76}$$

dove, per via della generalizzazione, la somma è fatta su tutti i canali aperti:

$$\lim_{r_1\to\infty} F_j(\mathbf{r_1}) \sim e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1}\delta_{ij} + f_{ij}(\mathbf{k}_i,\theta_1,\varphi_1)\frac{e^{i\mathbf{k}_jr_1}}{r_1} \ . \tag{77}$$

f_{ij} è detta ampiezza di scattering diretto . Per grandi valori di $\mathbf{r}_2$ si ha:

$$\lim_{r_2\to\infty} \psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \sim \sum_j G_j(\mathbf{r_2})\psi_j(\mathbf{r_1}) \ , \tag{78}$$

con

$$\lim_{r_2\to\infty} G_j(\mathbf{r_2}) \sim g_{ij}(\mathbf{k}_i,\theta_2,\varphi_2)\frac{e^{i\mathbf{k}_jr_2}}{r_2} \ . \tag{79}$$

L'ampiezza g_{ij} è detta ampiezza di scattering di scambio. Detto questo, le forme asintotiche delle funzioni d'onda soluzioni del problema iniziale risultano essere:

$$\lim_{r_1\to\infty} \psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \to e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1}\psi_i(\mathbf{r}_2) + \sum_j f_{ij}(\mathbf{k}_i,\theta_1,\varphi_1)\frac{e^{i\mathbf{k}_jr_1}}{r_1}\psi_j(\mathbf{r}_2) \ , \tag{80}$$

$$\lim_{r_2\to\infty} \psi_\pm(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \to \sum_j g_{ij}(\mathbf{k}_i,\theta_2,\varphi_2)\frac{e^{i\mathbf{k}_j r_2}}{r_2}\psi_j(\mathbf{r}_1) \ , \tag{81}$$

che comparate con l'espressione precedente, cioè con (74) danno:

$$\lim_{r_1\to\infty} \psi_\pm(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \to e^{ik_1 z_1}\psi_1(\mathbf{r}_2) + \sum_q f_{q1}{}^{\pm}(k_i,\theta,\varphi)\frac{e^{ik_q r_1}}{r_1}\psi_q(\mathbf{r}_2) \ ,$$

la quale permette di dire che:

$$f_{ij}^{\pm} = f_{ij} \pm g_{ij} \ . \tag{82}$$

La sezione d'urto differenziale diventa quindi:

$$\frac{d\sigma_{ij}}{d\Omega} = \frac{k_j}{k_i}\left[\frac{1}{4}|f_{ij}\pm g_{ij}|^2 + \frac{3}{4}|f_{ij}\pm g_{ij}|^2\right] . \tag{83}$$

2.2 Calcolo sezione d'urto differenziale per scattering elastico con il metodo "static exchange"

Per calcolare $f_I^{\pm}$ la funzione d'onda $\psi_\pm(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})$ è scritta come prodotto simmetrico:

$$\psi_\pm(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) = \left[F_1^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_1(\mathbf{r_2}) \pm F_1^{\pm}(\mathbf{r_2})\psi_1(\mathbf{r_1})\right] \ . \tag{84}$$

Questa è chiaramente un'approssimazione per semplificare il problema in quanto bisognerebbe considerare tutti i canali aperti e dovrebbe essere presente la componente per il canale chiuso ($\chi_N^{\pm}$), nella forma:

$$\psi_\pm(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) = \sum_{k=1}^{N}\left[F_q^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_q(\mathbf{r_2}) \pm F_q^{\pm}(\mathbf{r_2})\psi_q(\mathbf{r_1})\right] + \chi_N^{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \ . \tag{85}$$

Per ottenere $F_1^{\pm}$ bisogna considerare che la proiezione dell'equazione di Schrödinger sul set completo di funzioni idrogenoidi ortonormali ψ_q è nulla:

$$\int \psi_q^*(\mathbf{r_2})\left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|} - E_{tot}\right]\psi_\pm(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) = 0 \ . \tag{86}$$

Sostituendo la funzione d'onda approssimata (84) si può soddisfare una di queste condizioni richiedendo che la proiezione sullo stato fondamentale ψ_1 si annulli:

$$\int \psi_1^*(\mathbf{r_2})\left[-\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} + \frac{1}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|} - E_{tot}\right] ...$$

$$... \left[F_1^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_1(\mathbf{r_2}) \pm F_1^{\pm}(\mathbf{r_2})\psi_1(\mathbf{r_1})\right] d\mathbf{r_2} = 0 \ . \tag{87}$$

Usando l'equazione di Schroödinger per l'atomo idrogenoide,

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} - E_q\right]\psi_q = 0 \ , \tag{88}$$

Dalla (87) si ottiene la seguente equazione per $F_1^{\pm}$:

$$(\nabla_1^2 + {k_1}^2)F_1^{\pm}(\mathbf{r_1}) = 2V_{11}F_1^{\pm}(\mathbf{r_1}) \pm 2\int K_{11}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})F_1^{\pm}(\mathbf{r_2})d\mathbf{r_2} \ , \tag{89}$$

dove V_{11} è detto potenziale diretto e K_{11} è detto potenziale di scambio:

$$V_{11} = \left\langle \psi_1 \left| -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|} \right| \psi_1 \right\rangle = -\frac{1}{r_1} - \int \frac{|\psi_1(\mathbf{r_2})|^2}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|} d\mathbf{r_2} \ , \tag{90}$$

$$K_{11}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) = \psi_1^*(\mathbf{r_1})\psi_1(\mathbf{r_2}) \left[\frac{1}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|} - (E_{tot} - 2E_1) \right] . \tag{91}$$

Poichè la funzione $F_1^{\pm}$ ha un andamento che è circa $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r_2}}$, l'integrale

$$\int K_{11(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})} F_1^{\pm}(\mathbf{r_2})d\mathbf{r_2} \ ,$$

decresce rapidamente all'aumentare dell'energia il che significa che nelle trattazioni ad alta energia ,dove l'approssimazione di Born è più accurata, questo termine sarà trascurabile, ma lo si deve tenere in considerazione nei problemi a basse energie (tipicamente i problemi di questo tipo si risolvono in maniera numerica). Ad alte energie si può quindi considerare solo il potenziale diretto da cui segue che la (90), riscritta per un atomo con carica nucleare Z, e tenendo in considerazione che $|\psi_1(r_2)|^2$ è la densità elettronica $\rho(r_2)$, diventa:

$$V_{11}(\mathbf{r_1}) = -\frac{Z}{r_1} - \int \frac{\rho(\mathbf{r_2})}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|} d\mathbf{r_2} \ . \tag{92}$$

Inoltre si ricordi che per l'approssimazione di Born:

$$f_{B1} = -\frac{1}{4\pi} \int e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_1}} U(\mathbf{r_1}) d\mathbf{r_1}$$

con $U(\mathbf{r}) = \frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r})$ che in unità atomiche diventa $U(\mathbf{r}) = 2V(\mathbf{r}) \Rightarrow$,

$$f_{B1} = -\frac{1}{2\pi} \int e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_1}} V_{11}(\mathbf{r_1}) d\mathbf{r_1} \ . \tag{93}$$

Questa espressione integrale della f_{B1} può essere riscritta in una formula più facile da analizzare che si ottiene andando a studiare il seguente integrale:

$$I = \int e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}} \left(\frac{e^{-\lambda r}}{r} \right) d\mathbf{r} = \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} e^{i\Delta r\cos\theta} \left(\frac{e^{-\lambda r}}{r} \right) \sin\theta d\theta =$$

$$= 2\pi \int_0^{\infty} r^2 dr \int_{-1}^{1} e^{i\Delta r\cos\theta} \left(\frac{e^{-\lambda r}}{r} \right) d\cos\theta =$$

$$= 2\pi \int_0^{\infty} r^2 \left(\frac{e^{-\lambda r}}{r} \right) \left[\frac{e^{i\Delta r\cos\theta}}{i\Delta r} \right]_{-1}^{1} = \frac{4\pi}{\Delta} \int_0^{\infty} \sin(\Delta r) e^{-\lambda r} dr =$$

$$= \frac{4\pi}{\Delta}\int_0^\infty \left(\frac{e^{i\Delta r}-e^{-i\Delta r}}{2i}\right)e^{-\lambda r}dr = \frac{4\pi}{\Delta}\left\{\int_0^\infty \frac{e^{(i\Delta-\lambda)r}}{2i}dr - \int_0^\infty \frac{e^{-(i\Delta+\lambda)r}}{2i}dr\right\} =$$

$$= \frac{4\pi}{\Delta}\left\{\left[\frac{e^{-(-i\Delta+\lambda)r}}{2i(i\Delta-\lambda)}\right]_0^\infty - \left[\frac{e^{-(i\Delta+\lambda)r}}{2i(i\Delta+\lambda)}\right]_0^\infty\right\} =$$

$$= \frac{4\pi}{\Delta}\left\{\frac{-1}{2i(-i\Delta+\lambda)} + \frac{1}{2i(i\Delta+\lambda)}\right\} = \frac{4\pi}{(\lambda^2+\Delta^2)} \ .$$

Nel limite per $\lambda \to \infty$ si ottiene l'integrale di Bethe:

$$\int \frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}}}{r}d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{\Delta^2} \ . \tag{94}$$

Sostituendo l'espressione di V_{11} (92) in f_{B1} (93) si ottiene:

$$f_{B1} = \frac{Z}{2\pi}\int \frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_1}}}{r_1}d\mathbf{r_1} - \frac{1}{2\pi}\iint \frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_1}}\rho(\mathbf{r_2})}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|}d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_2} =$$

$$= \frac{Z}{2\pi}\int \frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_1}}}{r_1}d\mathbf{r_1} - \frac{1}{2\pi}\iint \frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_1}}\rho(\mathbf{r_2})}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|}\frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_2}}}{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_2}}}d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_2} \ . \tag{95}$$

Sfruttando l'integrale di Bethe (94) si ha:

$$f_{B1} = \frac{2Z}{\Delta^2} - \frac{1}{2\pi}\iint \frac{e^{i\mathbf{\Delta}\cdot(\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2})}}{|\mathbf{r_1}-\mathbf{r_2}|}\rho(\mathbf{r_2})e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_2}}d\mathbf{r_1}d\mathbf{r_2} =$$

$$= \frac{2Z}{\Delta^2} - \frac{1}{2\pi}\frac{4\pi}{\Delta^2}\int \rho(\mathbf{r_2})e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r_2}}d\mathbf{r_2} \Rightarrow$$

$$f_{B1} = \frac{2}{\Delta^2}\left[Z - \mathcal{L}(\mathbf{\Delta})\right] \ , \tag{96}$$

dove $\mathcal{L}(\mathbf{\Delta})$ è detto fattore di forma ,definito come:

$$\mathcal{L}(\mathbf{\Delta}) = \int \rho(\mathbf{r})e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}}d\mathbf{r} \ . \tag{97}$$

E' adesso possibile calcolare la sezione d'urto differenziale:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} = |f_{B1}|^2 = \frac{4}{\Delta^4}|Z - \mathcal{L}(\mathbf{\Delta})|^2 \ . \tag{98}$$

Nel caso specifico dell'idrogeno, ad esempio, $Z = 1$ e $\rho(r) = e^{-2r/\pi}$ e quindi $\mathcal{L}_{\mathcal{H}}(\mathbf{\Delta}) = \left[1 + (\Delta/2)^2\right]^{-2}$ da cui si ricava:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{B1} = 4\frac{(\Delta^2+8)^2}{(\Delta^2+4)^4} \ .$$

Da questa espressione è chiaro che misurando la sezione d'urto in funzione del momento trasferito si ricava il fattore di forma la cui trasformata di Fourier fornisce la densità ρ che può essere comparata con quella ottenuta con il metodo di Hartree-Fock. Inoltre nel grafico seguente è possibile notare come i risultati della sezione d'urto differenziale calcolata tramite la (98), graficata in questo caso per l'atomo di elio, siano compatibili con i dati sperimentali ad alte energie.

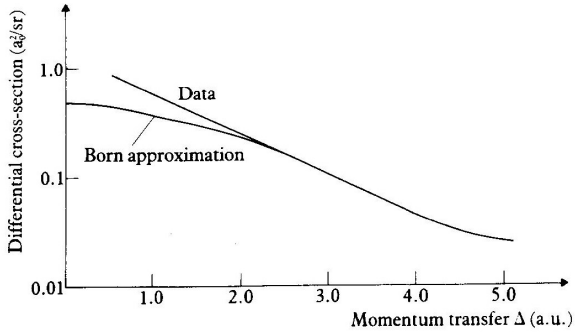

Figura 5: Confronto tra sezione d'urto differenziale teorica e sperimentale dell'elio

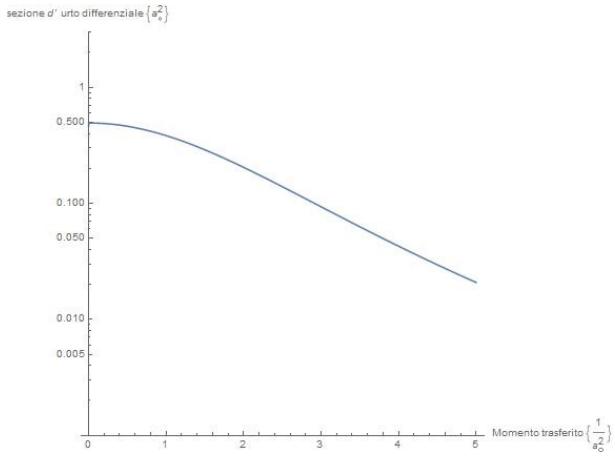

Figura 6: Andamento della sezione d'urto differenziale per l'atomo di elio ottenuto con programma di calcolo

2.3 Impostazione del metodo "close coupling"

Un metodo più accurato dello "static-exchane" è detto "close coupling". Questa approssimazione si basa sul fatto che durante l'interazione l'atomo bersaglio si deforma, il che significa che avrà una funzione d'onda diversa che modifica l'interazione facendo entrare in gioco altri canali. Queste considerazioni possono essere tenute in conto includendo altre configurazioni nella funzione d'onda approssimata che si va a considerare. In particolare si supponga che N stati siano quelli che contribuiscono a determinare il fenomeno di interazione mentre quelli per $q > N$ sono trascurabili quindi si può scrivere:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r_1}, \mathbf{r_2}) = \sum_{q=1}^{N} \left\{ F_q^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_q(\mathbf{r_2}) \pm F_q^{\pm}(\mathbf{r_2})\psi_q(\mathbf{r_1}) \right\} . \tag{99}$$

Ripercorrendo il procedimento usato per lo "static exchange" si ottiene la seguente equazione per $F_q^{\pm}$:

$$(\nabla_1^2 + {k_q}^2)F_q^{\pm}(\mathbf{r_1}) = 2\sum_{q'=1}^{N} V_{qq'}(\mathbf{r_1})F_q^{\pm}(\mathbf{r_1}) \pm 2\sum_{q'=1}^{N}\int K_{qq'}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2})F_q^{\pm}(\mathbf{r_2})d\mathbf{r_2} \ , \tag{100}$$

risolta allo stesso modo dell'approssimazione precedente ("static exchange").

2.4 Sezione d'urto per scattering anelastico

Ora che è nota l'interazione tra elettroni e atomi di tipo elastico si passa ad analizzare le interazioni di tipo anelastico. In questo tipo di interazioni c'è un'eccitazione (o una diseccitazione) dell'atomo bersaglio e l'approssimazione usata è quella di prendere la funzione d'onda del problema come somma delle funzioni d'onda che descrivono "target" e elettrone incidente prima e dopo l'interazione,

$$\begin{aligned}\psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) = &\left[F_1^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_1(\mathbf{r_2}) \pm F_1^{\pm}(\mathbf{r_2})\psi_1(\mathbf{r_1})\right] + \\ &+ \left[F_q^{\pm}(\mathbf{r_1})\psi_q(\mathbf{r_2}) \pm F_q^{\pm}(\mathbf{r_2})\psi_q(\mathbf{r_1})\right] .\end{aligned} \tag{101}$$

Quest'ultima, come è facile notare, sono solo una coppia ($N = 2$) delle N equazioni (99) scritte in precedenza nell'approssimazione di "close coupling". Proprio come per lo scattering elastico anche in questo caso anelastico si può ottenere, ad alte energie, la sezione d'urto differenziale ricorrendo all'approssimazione di Born. E' lecito quindi prendere come funzione d'onda quella imperturbata, con $\mathbf{k}_i = k_1\hat{\mathbf{z}}$:

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) \simeq \psi_0(\mathbf{r_1},\mathbf{r_2}) = e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1}\psi_{100}(\mathbf{r_2}) \ , \tag{102}$$

e come funzione $F_q^{\pm}$ quella all'ordine più basso:

$$F_q^{\pm}(\mathbf{r}_1) = \delta_{q1}e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1} \ . \tag{103}$$

Ricordando l'equazione di $F_q^{\pm}$ (100) e che ad alte energie il potenziale di scambio è ininfluente, si può scrivere:

$$(\nabla_1^2 + k_q^2)F_q(\mathbf{r}_1) \simeq 2V_{q1}(\mathbf{r}_1)e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1} \ . \tag{104}$$

Proprio come già visto nel caso elastico rifacendo gli stessi conti e usando la funzione di Green si ottiene:

$$F_q(\mathbf{r}_1) = -\frac{1}{2\pi}\int\frac{e^{ik_q|\mathbf{r}_1-\mathbf{r'}_1|}}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r'}_1|}V_{q1}(\mathbf{r}_1)e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r'}_1}d\mathbf{r'}_1 \ , \tag{105}$$

che nel limite per $r_1 \to \infty$ diventa:

$$\lim_{r_1\to\infty} F_q(\mathbf{r}_1) \sim -\frac{1}{2\pi}\frac{e^{ik_q r_1}}{r_1}\int e^{i\mathbf{k}_q\cdot\mathbf{r'}_1}V_{q1}(\mathbf{r'}_1)e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r'}_1}d\mathbf{r'}_1 \ , \tag{106}$$

dove $\mathbf{k}_q$ è un vettore che ha per direzione quella di $\mathbf{r}_1$ e per intensità k_q. Comparando l'espressione appena ottenuta con le condizioni al contorno fissate precedentemente e cioè con:

$$\lim_{r_1 \to \infty} F_q^{\pm}(\mathbf{r_1}) \sim e^{ik_1 z_1}\delta_{q1} + f_q^{\pm}(k_1, \theta, \varphi)\frac{e^{ik_q r_1}}{r_1} \ ,$$

si evince che:

$$f_q = -\frac{1}{2\pi}\int e^{i\Delta \cdot r_1^{'}} V_{q1}(\mathbf{r}_1')d\mathbf{r}'_1 \ , \tag{107}$$

dove il momento trasferito vale $\mathbf{\Delta} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_q$. Si procede come nel caso elastico e si usa l'integrale di Bethe per scrivere l'ampiezza nel caso di un'eccitazione dal livello fondamentale a un certo stato eccitato q:

$$f_q = -\frac{2}{\Delta^2}\int \psi_q^*(\mathbf{r})e^{i\Delta\cdot\mathbf{r}}\psi_1(\mathbf{r})d\mathbf{r} \ . \tag{108}$$

Si può nuovamente introdurre un fattore di forma, in questo caso detto fattore di forma anelastico $\mathcal{L}_{qq'}$, definito come:

$$\mathcal{L}_{qq'}(\mathbf{\Delta}) = \int \psi_q^*(\mathbf{r})e^{i\Delta\cdot\mathbf{r}}\psi_{q'}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \ , \tag{109}$$

così da poter riscrivere l'ampiezza di scattering come:

$$f_q = -\frac{2}{\Delta^2}\mathcal{L}_{q1}(\mathbf{\Delta}) \ , \tag{110}$$

da cui si ricava la sezione d'urto differenziale:

$$\frac{d\sigma_{q1}}{d\Omega} = \frac{k_q}{k_1}|f_q|^2 \ . \tag{111}$$

3 IONIZZAZIONE

Con la conoscenza dei fenomeni di scattering elastico ed anelastico si può finalmente descrivere l'argomento della ionizzazione. I processi di ionizzazione sono più complicati da analizzare in quanto:

- a basse energie nei pressi della soglia di eccitazione si potrebbe usare l'approssimazione "close-coupling" ma non c'è modo di estenderla alla ionizzazione.
- per alte energie si potrebbe usare l'approssimazione di Born che però non tiene conto dell'interazione coulombiana tra l'elettrone diffuso e quello ionizzato. Inoltre questi due elettroni risultano indistinguibili mentre nell'approssimazione di Born non vengono considerati tali in prima approssimazione.

Nonostante le precisazioni fatte in precedenza però nel primo paragrafo varrà utilizzata l'approssimazione di Born per trovare la sezione d'urto del processo di ionizzazione in quanto, se l'energia dell'elettrone incidente è di molto superiore a quella della soglia di ionizzazione, l'approssimazione di Born fornisce comunque una sezione d'urto totale che non si discosta troppo dai dati sperimentali. Nel secondo paragrafo si studieranno i processi di ionizzazione tenendo in considerazione anche le interazioni coulombiane target-particella e particella-particella che definiranno nuove condizioni al contorno. Tramite lo studio dell'ampiezza di scattering sarà possibile ricavare una sezione d'urto differenziale tripla della ionizzazione.

3.1 Ionizzazioni ad energie molto maggiori della soglia di ionizzazione

Utilizzando l'approssimazione di Born per descrivere la sezione d'urto della ionizzazione se ne ottiene una buona stima come si può notare dal seguente grafico:

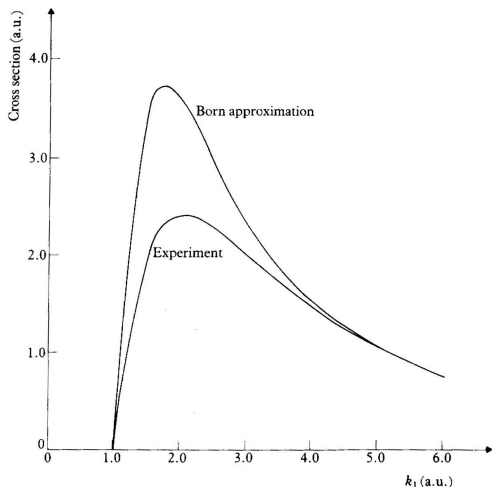

Figura 7: Sezione d'urto per la ionizzazione di un atomo di idrogeno

Questa sezione d'urto totale si può ottenere, come detto in precedenza, applicando l'approssimazione di Born all'equazione (101) con la differenza che l'elettrone non passa ad un livello q ma viene ionizzato, il che significa che adesso si indica con $\mathbf{q}$ il momento dell'elettrone emesso che può quindi assumere valori continui e non discreti. Quindi l'ampiezza di scattering e di conseguenza la sezione d'urto dipendono anche da $\mathbf{q}$ e quindi bisognerà calcolare la sezione d'urto differenziale per gli elettroni emessi che hanno momento compreso tra $\mathbf{q}$ e $\mathbf{q} + d\mathbf{q}$:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\mathbf{q}} = \frac{k_{\mathbf{q}}}{k_1}|f_q(k_1,\theta)|^2 \ . \tag{112}$$

Per la conservazione dell'energia ,quest'ultima, deve equivalersi prima e dopo la ionizzazione e cioè:

$$\frac{1}{2}k_1^2 + E_1 = \frac{1}{2}k_{\mathbf{q}}^2 + \frac{1}{2}q^2 \ . \tag{113}$$

Il momento massimo dell'elettrone emesso si ottiene quando l'elettrone diffuso si ferma in seguito all'interazione:

$$q_{max} = (k_1^2 + 2E_1)^{1/2} \ . \tag{114}$$

Per ottenere la sezione d'urto totale bisogna integrare su tutti gli angoli e le energie di emissione

$$\sigma_{ION}(k_1) = 2\pi \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^{q_{max}} q^2 dq \int d\Omega(\hat{\mathbf{q}}) \frac{k_q}{k_1}|f_{\mathbf{q}}(k_1,\theta)|^2 \ . \tag{115}$$

3.2 Processi di ionizzazione con interazioni coulombiane tra particelle

E' possibile adesso analizzare il fenomeno di ionizzazione tenendo in considerazione anche l'interazione coulombiana che si instaura tra gli elettroni emessi. Innanzitutto bisogna fare delle considerazioni cinematiche sul processo di ionizzazione che può essere schematizzato nella forma:

$$e^- + A(i) \rightarrow A^+(f) + 2e^- \ , \tag{116}$$

dove $A(i)$ è l'atomo neutro nello stato iniziale e $A^+(f)$ è lo ione nello stato finale. Si consideri un elettrone di momento $\mathbf{k}_i$ ed energia $E_i^e = k_i^2/2$ che va ad incidere su un atomo A che si trova nell'autostato $|i\rangle$ con autovalore E_i e autofunzione ψ_i. Nello stato finale si hanno due elettroni che emergono dallo ione, che hanno momenti $\mathbf{k}_A$ e $\mathbf{k}_B$ e energie $E_A^e = k_A^2/2$ $E_B^e = k_A^2/2$ mentre lo ione si trova nell'autostato $|f\rangle$ di energia ϵ_f. Detto Q il momento con cui rincula lo ione in seguito all'espulsione per la conservazione del momento si può scrivere:

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_A + \mathbf{k}_B + \mathbf{Q} \ . \tag{117}$$

Le direzioni dei momenti $\mathbf{k}_A$ e $\mathbf{k}_B$ sono specificate rispettivamente dagli angoli (θ_A, ϕ_A) e (θ_B, ϕ_B) rispetto alla direzione incidente $\hat{\mathbf{k}}_i$ che coincide con l'asse z come riportato in figura (8): Per la conservazione dell'energia si ha:

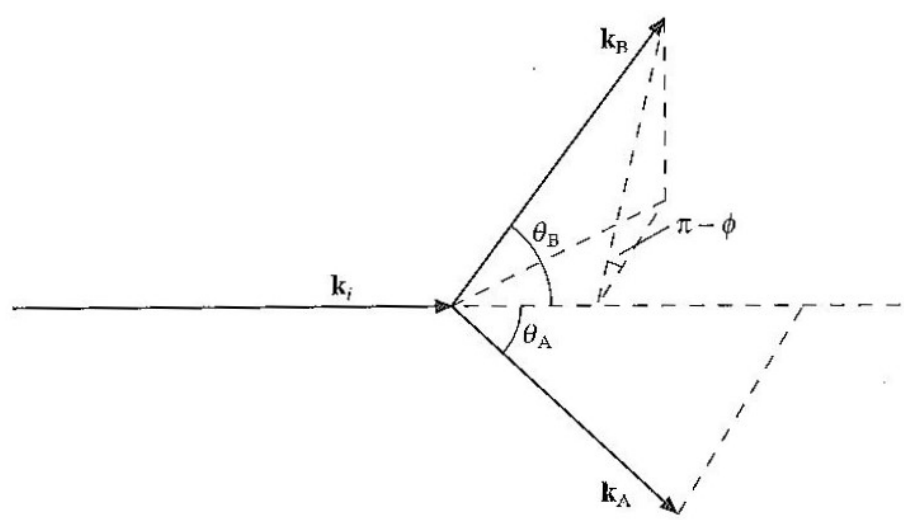

Figura 8: Raffigurazione cinematica della reazione di ionizzazione

$$E = \frac{k_i^2}{2} + E_i = \frac{k_A^2}{2} + \frac{k_B^2}{2} + \epsilon_f \ , \tag{118}$$

in cui viene trascurata l'energia dello ione (quella dovuta al rinculo) in quanto l'energia è inversamente proporzionale alla massa dello ione la quale è molto più grande delle masse degli elettroni, il che rende questo contributo energetico trascurabile. Proprio come fatto nei casi precedenti si introduce il momento trasferito $\Delta = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_A$ e si nominano l'elettrone A 'diffuso' e l'elettrone B 'emesso'. Ciò che è interessante studiare è la probabilità che, in una reazione del tipo preso in analisi, un elettrone incidente di momento $\mathbf{k}_i$ ed energia E_i^e collida con il bersaglio provocando l'espulsione di due elettroni di momento $\mathbf{k}_A$ e $\mathbf{k}_B$ ed energia E_A^e e E_B^e rispettivamente negli angoli solidi $d\Omega_A$ e $d\Omega_B$ centrati nelle direzioni (θ_A, φ_A) e (θ_B, φ_B). Quindi ciò che è rilevante conoscere è la sezione differenziale tripla (TDCS acronimo di "triple differential cross section") indicata come $\frac{d^3\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE}$, che si ricollega alla (112) integrando su uno dei due angoli solidi. La TDCS integrata su tutte le energie e gli angoli di scattering, ricordando sempre che gli elettroni emessi sono indistinguibili, fornisce la sezione d'urto totale della ionizzazione.
Per prima cosa si analizza il più semplice problema di ionizzazione, vale a dire, quello che ha come "target" un atomo di idrogeno:

$$e^- + H(i) \to H^+ + 2e^- \ . \tag{119}$$

In questa situazione per la conservazione dell'energia si può scrivere:

$$E = \frac{k_i^2}{2} + E_i = \frac{k_A^2}{2} + \frac{k_B^2}{2} = \frac{K^2}{2} \ . \tag{120}$$

Si chiami r_1 la coordinata dell'elettrone incidente e r_2 la coordinata dell'elettrone che è inizialmente legato. A questo, punto proprio come fatto nelle collisioni analizzate in precedenza, si devono definire delle condizioni al contorno che però tengano in considerazione anche dell'interazione coulombiana che si instaura tra i due elettroni emessi e tra ciascun elettrone con lo ione, oltre alle classiche condizioni già discusse in precedenza. E' quindi presente un contributo aggiuntivo contenente: l'ampiezza dello scattering coulombiano, la funzione d'onda(coulombiana in questo caso) e l'onda sferica ritardata di una fase detta $\rho(\mathbf{q}_B, \mathbf{r})$ (questo nuovo contributo è dovuto al fatto che nella ionizzazione è presente un canale in più da considerare). Si può notare che sono presenti due fasi in quanto l'ampiezza di scattering deve tenere conto delle fasi dei due elettroni interagenti che sono alla base del processo di ionizzazione.

$$\lim_{r_1\to\infty} \psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \to e^{i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1}\psi_i(\mathbf{r}_2) + \sum_j f_{ij}(k_i, \theta_1, \varphi_1)\frac{e^{ik_j r_1}}{r_1}\psi_j(\mathbf{r}_2) +$$

$$+ \int_{q\leq K} d\mathbf{q}_B f_i(q_A\hat{\mathbf{r}}_1, \mathbf{q}_B)\frac{e^{i[q_a r_1 + \rho(\mathbf{q}_B, \mathbf{r}_1)]}}{r_1}\psi^{(-)}_{c,\mathbf{q}_B}(Z=1, \mathbf{r}_2) \ , \tag{121}$$

$$\lim_{r_2\to\infty} \psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \to \sum_j g_{ij}(k_i, \theta_2, \varphi_2)\frac{e^{ik_j r_2}}{r_2}\psi_j \mathbf{r}_1 +$$

$$+\int_{q\leq K} d\mathbf{q}_B g_i(q_A\hat{\mathbf{r}}_2,\mathbf{q}_B)\frac{e^{i[q_a r_2+\rho(\mathbf{q}_B,\mathbf{r}_2)]}}{r_2}\psi^{(-)}_{c,\mathbf{q}_B}(Z=1,\mathbf{r}_1)\ , \tag{122}$$

dove si sta considerando che:

$$k_j=(k_i^2+2E_i-2E_j)^{1/2} \qquad \text{per la conservazione dell'energia,}$$

$$q_A=(K^2-q_B^2)^{1/2} \qquad \text{per la conservazione del momento.}$$

La funzione d'onda $\psi^{(-)}_{c,\mathbf{q}_B}(Z=1,\mathbf{r}_1)$ è quella trovata in precedenza nel problema di scattering coulombiano che descrive l'andamento dell'elettrone in un campo Coulombiano (62) e l'esponente (-) sta ad indicare il comportamento entrante della funzione d'onda sferica. Per quanto detto in precedenza (83) la tripla sezione d'urto differenziale è data da:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE}=\frac{k_A k_B}{k_i}\left[\frac{1}{4}|f_i\pm g_i|^2+\frac{3}{4}|f_i\pm g_i|^2\right]=\frac{k_A k_B}{k_i}\left[\frac{1}{4}|f_i^+|^2+\frac{3}{4}|f_i^-|^2\right]\ , \tag{123}$$

scritta ricordando che $f_i\equiv f_i(\mathbf{k}_A,\mathbf{k}_B)$, $g_i\equiv g_i(\mathbf{k}_A,\mathbf{k}_B)$ e $f_i^{\pm}=f_i\pm g_i$. Da cui, integrando, si ricava la sezione d'urto totale di ionizzazione:

$$\sigma_i=\frac{1}{k_i}\int_0^{E/2} dE_B^e k_A k_B\int d\Omega_A\int d\Omega_B\left[\frac{1}{4}|f_i^+|^2+\frac{3}{4}|f_i^-|^2\right]. \tag{124}$$

Per poter risolvere questo integrale si potrebbe usare l'approssimazione di Born ma bisogna considerare che, espandendo in serie di Born la funzione d'onda $\psi^{(+)}(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$, si avrebbero due espansioni in serie, una generata dall'ampiezza di scattering diretta f e una da quella di scambio g. Per il momento si consideri solo f_i, di conseguenza usando la prima approssimazione di Born si ha:

$$f_i^{B1}=-\frac{1}{2\pi}\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{k}_j\cdot\mathbf{r}_1}\psi^{(-)*}_{c,\mathbf{k_B}}(\mathbf{r}_2)\left(-\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_{12}}\right)e^{-i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1}\psi_i(\mathbf{r}_2)\ . \tag{125}$$

Poichè le funzioni d'onda del bersaglio, corrispondenti a stati diversi, sono ortogonali, il termine $\frac{1}{r_1}$ proveniente dall'interazione elettrone-nucleo scompare. Infatti le funzioni d'onda nell'integrale sono dipendenti solo da r_2 e quindi il loro prodotto scalare è nullo:

$$f_i^{B1}=-\frac{1}{2\pi}\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{k}_j\cdot\mathbf{r}_1}\psi^{(-)*}_{c,\mathbf{k_B}}(\mathbf{r}_2)\frac{1}{r_{12}}e^{-i\mathbf{k}_i\cdot\mathbf{r}_1}\psi_i(\mathbf{r}_2)\ , \tag{126}$$

che introducendo nuovamente il momento trasferito $\mathbf{\Delta}=\mathbf{k}_i-\mathbf{k}_A$ si scrive come:

$$f_i^{B1}=-\frac{1}{2\pi}\int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}_1}\psi^{(-)*}_{c,\mathbf{k_B}}(\mathbf{r}_2)\frac{1}{r_{12}}\psi_i(\mathbf{r}_2)\ . \tag{127}$$

Nota f_i^{B1} è possibile calcolare la sezione d'urto differenziale tripla tramite la formula:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_A d\Omega_B dE}=\frac{k_A k_B}{k_i}|f_i^{B1}|^2\ . \tag{128}$$

Per semplificare l'espressione dell'ampiezza di scattering si usa l'integrale di Bethe (94) per integrare sulla variabile $\mathbf{r}_1$ e usando il fattore di forma si ottiene:

$$f_i^{B1} = -\frac{2}{\Delta^2}\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B}) \ , \tag{129}$$

con:

$$\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B}) = \int \psi_{c,\mathbf{k_B}}^{(-)*}(\mathbf{r}_2) e^{i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}_2} \psi_i(\mathbf{r}_2) d\mathbf{r}_2 \ . \tag{130}$$

Il calcolo di questo integrale e del suo modulo quadro, nel caso specifico in cui l'idrogeno sia inizialmente nello stato fondamentale, cioè $\psi_1(\mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(r_2) = \pi^{-1/2}e^{-r_2}$, è svolto nell'appendice. Sfruttando i risultati dell'appendice e in particolare utilizzando le (18.A), (19.A) , (20.A) e (21.A) si può scrivere il modulo quadro della $\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B})$ che grazie alla (128) e (129) permette di trovare la sezione d'urto differenziale tripla:

$$\frac{d^3\sigma_{1s}^{B1}}{d\Omega_A d\Omega_B dE} = \frac{k_A k_B}{k_i}|f_i^{B1}|^2 =$$

$$= \frac{2^8}{\pi}\frac{k_A}{k_i}\frac{\Delta^2 - 2\Delta k_B \cos\gamma + (k_B^2+1)\cos^2\gamma}{\Delta^2[\Delta^2 + k_B^2 - 2\Delta k_B\cos\gamma + 1]^4[(\Delta + k_B)^2 + 1][(\Delta - k_B)^2 + 1]} \times$$

$$\times \frac{e^{\left\{-(2/k_B)\tan^{-1}[2k_B/(\Delta^2 - k_B^2 + 1)]\right\}}}{1 - e^{-2\pi/k_B}} \ . \tag{131}$$

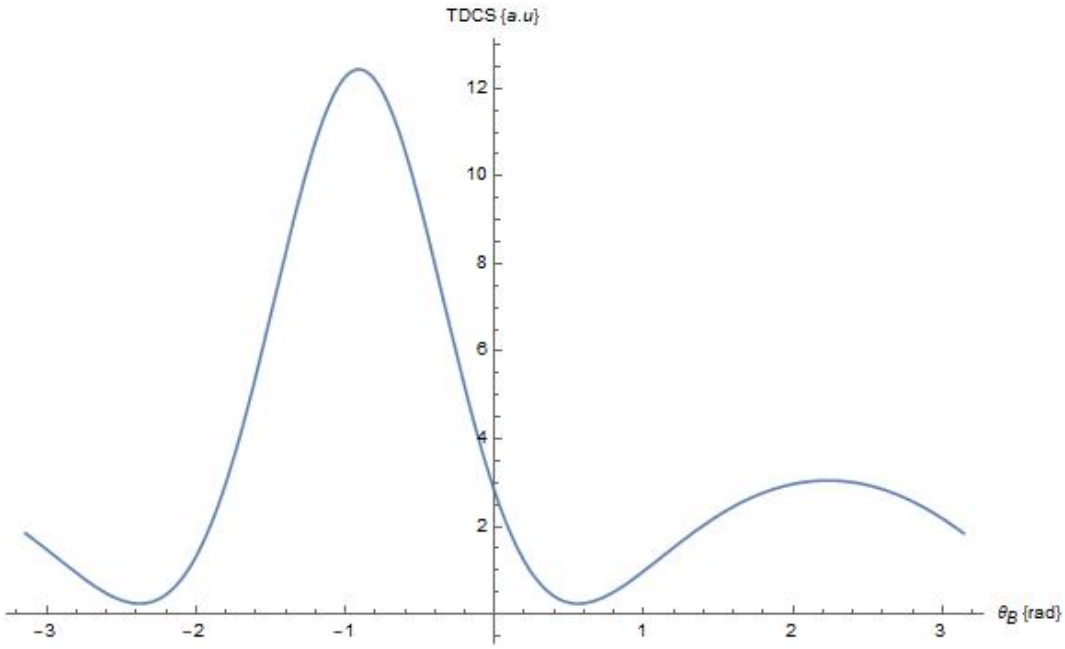

Figura 9: Andamento della sezione d'urto differenziale tripla ottenuto con programma di calcolo prendendo $E_i^e = 250eV$,$E_B = 5eV$,$\theta_A = 3°$

Una rappresentazione della sezione d'urto differenziale tripla appena trovata è data della grafico in Figura 9 ottenuto nel caso particolare di geometria asimmetrica e complanare , vale a dire che l'espulsione dell'elettrone A avviene in coincidenza con quella dell'elettrone B e i due elettroni vengono emessi in modo che i momenti $\mathbf{k}_i$, $\mathbf{k}_A$ e $\mathbf{k}_B$ siano nello stesso piano. Nel grafico sono fissati l'energia iniziale dell'elettrone incidente e l'angolo dell'elettrone diffuso (θ_A) mentre viene fatto variare θ_B. Inoltre si può notare che la TDCS presenta dei massimi quando la direzione di $\mathbf{k}_B$ è la stessa di $\mathbf{\Delta}$ o $-\mathbf{\Delta}$. Nel primo caso ci si riferisce al massimo come foreward peak e nel secondo come recoil peak. Inoltre è interessante notare che i picchi della TDCS si ottengono (sempre ad alte energie e a piccoli angoli di deviazione dell'elettrone diffuso) per grandi angoli di emissione dell'elettrone espulso. A questo punto si può ricavare la sezione d'urto totale per la ionizzazione sempre ovviamente nell'approssimazione di Born e trascurando l'ampiezza di scattering di scambio.

$$\sigma_{tot}^{B1}(i) = \frac{1}{k_i}\int_0^{E/2} dE_B^e k_B \int d\Omega_B k_A \int d\Omega_A |f_i^{B1}|^2 \ , \tag{132}$$

dove si è detta $E = k_i^2/2 + E_i$ l'energia totale del sistema. Per risolvere l'integrale bisogna considerare che ad alte energie sono le collisioni che trasferiscono piccoli momenti a contribuire maggiormente alla $\sigma_{tot}^{B1}(i)$. Per questo si espande il termine $e^{(i\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{r}_1)}$, nella (130), in serie di potenze $(1 + iz_1\Delta)$ e si tiene solo il

primo contributo non nullo dovuto al termine di dipolo ottenendo:

$$\sigma_{tot}^{B1}(i) = \frac{1}{k_i}\int_0^{E/2} dE_B^e k_B \int d\Omega_B k_A \int d\Omega_A \frac{4}{\Delta^4}\psi_{c,\mathbf{k_B}}^{(-)*}(Z=1,\mathbf{r}_2)|z_1|\psi_i(\mathbf{r}_2) > |^2 \Delta^2 \ . \tag{133}$$

Si opera adesso il seguente cambio di variabile:

$$\begin{cases} d\Omega_A = 2\pi \sin\theta_A d\theta_A = 2\pi(-d\cos\theta_A) \\ \Delta^2 = k_i^2 + k_a^2 - 2k_i k_A \cos\theta_A \end{cases}$$

Da cui si può dire che:

$$2\Delta d\Delta = -2k_i k_A d(cos\theta_A) \Rightarrow$$

$$\frac{\Delta d\Delta}{k_i k_A} = (-d\cos\theta_A) \Rightarrow d\Omega_A = (2\pi)\frac{\Delta d\Delta}{k_i k_A} \ .$$

Che se sostituita nella (132) fornisce:

$$\sigma_{tot}^{B1}(i) = \frac{8\pi}{k_i^2}\int_0^{E/2} dE_B^e k_B \times$$

$$\times \int d\Omega_B | < \psi_{c,\mathbf{k_B}}^{(-)*}(Z=1,\mathbf{r}_2)|z_1|\psi_i(\mathbf{r}_2) > |^2 \int_{\Delta_{min}}^{\hat{\Delta}} \frac{d\Delta}{\Delta} \ , \tag{134}$$

dove il cambio di variabile fatto tra θ_A e Δ è frutto della relazione $\Delta = (k_i^2 + k_A^2 - 2k_i k_A \cos\theta_A)^{1/2}$. Inoltre $\Delta_{min} = k_i - k_A$ e $\hat{\Delta}$ è il valore del momento trasferito oltre il quale il contributo a $\sigma_{tot}^{B1}(i)$ decresce rapidamente. Per la (120) e considerando che ad alte energie e per piccoli momenti trasferiti $k_i + k_A \sim 2k_i$ si ha $\Delta_{min} \sim (k_B^2/2 - E_i)/k_i$. Detto questo si può integrare su Δ ed estendendo l'estremo superiore di integrazione di E_B^e all'infinito (poichè la trattazione è fatta ad alte energie) si ricava:

$$\sigma_{tot}^{B1}(i) = \frac{8\pi}{k_i^2}\int_0^{\infty} dE_B^e k_B \times$$

$$\times \int d\Omega_B | < \psi_{c,\mathbf{k_B}}^{(-)*}(Z=1,\mathbf{r}_2)|z_1|\psi_i(\mathbf{r}_2) > |^2 \log\frac{k_i\hat{\Delta}}{E_B^e - E_i} \ . \tag{135}$$

A questo punto detto:

$$A = 2\pi\int_0^{\infty} dE_B^e k_B \int d\Omega_B | < \psi_{c,\mathbf{k_B}}^{(-)*}(Z=1,\mathbf{r}_2)|z_1|\psi_i(\mathbf{r}_2) > |^2 \ , \tag{136}$$

e ricordando la relazione $E_B^e = k_B^2/2$ si può operare il cambio di variabile e scrivere:

$$A = 2\pi \int d\mathbf{k}_B | < \psi_{c,\mathbf{k_B}}^{(-)*}(Z=1,\mathbf{r}_2)|z_1|\psi_i(\mathbf{r}_2) > |^2 \ , \tag{137}$$

che è indipendente da E_i^e e quindi si può scrivere la (135) come:

$$\sigma_{tot}^{B1}(i) \simeq A \frac{\log E_i^e}{E_i^e} \ . \tag{138}$$

Partendo dal caso più semplice in presenza di solo potenziale si è potuto risalire a una sezione d'urto che è in accordo con i dati sperimentali anche se, come è possibile notare dal grafico seguente, delle buone stime della sezione d'urto si hanno solo per energie dell'elettrone incidente superiori a 300eV mentre nella regione a più basse energia, soprattutto nel picco, c'è un evidente distacco. Questo è ovviamente dovuto alle approssimazioni fatte per risolvere il problema.

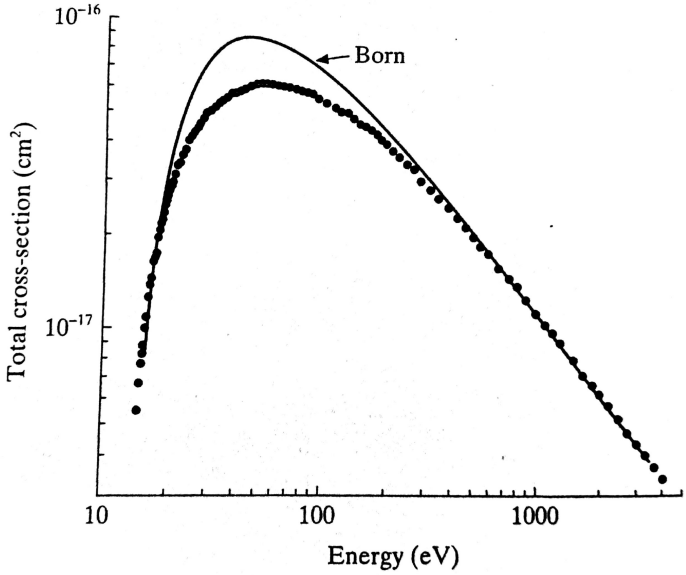

Figura 10: Sezione d'urto totale per la ionizzazione del idrogeno nello stato fondamentale

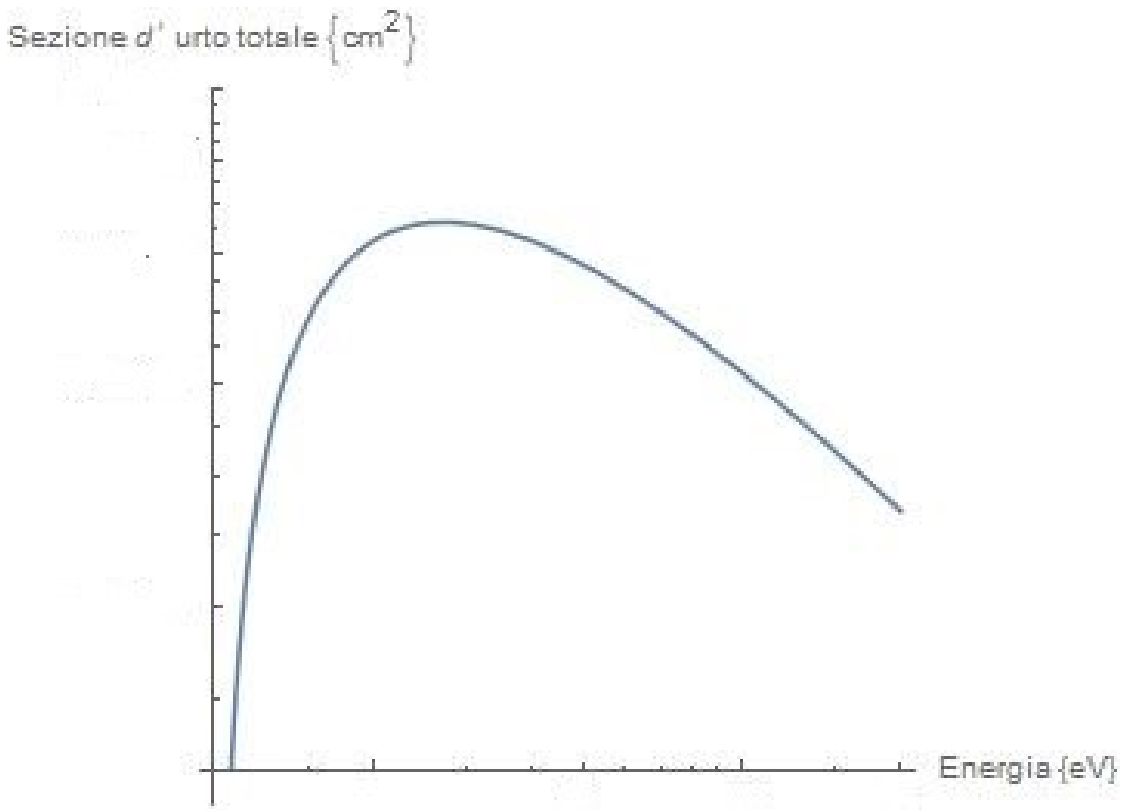

Figura 11: Andamento della sezione d'urto totale ottenuto con programma di calcolo

Conclusioni

Dall'analisi effettuata si capisce quindi che la comprensione dei processi di ionizzazione prevede un percorso attraverso fenomeni più semplici da analizzare, infatti i primi capitoli sono serviti per ottenere le conoscenze primarie che integrate tra loro permettono di creare un modello per descrivere la ionizzazione. Lo studio dei processi di scatteing ha condotto a delle soddisfacenti stime in accordo con i dati sperimentali il che significa che, nonostante si siano utilizzate delle approssimazioni, i modelli utilizzati funzionano. Ripercorrendo la trattazione effettuata il primo Capitolo ha permesso di conoscere la sezione d'urto differenziale dello scattering da potenziale al primo ordine dell'approssimazione di Born attraverso il calcolo dell'ampiezza di scattering. Inoltre si è analizzata l'interazione coulombiana tra partcielle nei fenomeni di diffusione che ha portato alla sezione d'urto differenziale dello scattering coulombiano. Nel secondo Capitolo, tramite l'utilizzo dei metodi "close coupling" e "static exchane", è stato possibile conoscere la sezione d'urto differenziale dei processi di scattering atomo-elettrone sia nel caso elastico che in quello anelastico. Infine nell'ultimo capitolo è stato possibile ricavare una sezione d'urto di ionizzazione usando l'approssimazione di Born e addirittura, considerando anche le interazioni coulombiane, calcolare una sezione d'urto differenziale tripla in accordo con i dati sperimentali.
Tuttavia la trattazione fatta sui fenomeni di ionizzazione è generalizzabile a fenomeni più articolati come ionizzazioni di atomi più complessi o di molecole e processi non complanari. Inoltre la comprensione ottenuta potrebbe essere utilizzata per studiare gli effetti di un gas sottoposto a passaggio di corrente elettrica o ad alte temperature o ancora per indagare l'effetto di fotoionizzazione dovuto all'assorbimento di un fotone. Lo studio di fenomeni di ionizzazione in atomi di gas Nobili, come Argon e Xenon, è di grande importanza anche per la comprensione di rivelatori di interesse nella fisica delle alte energie. Un'altra interessante analisi dei fenomeni di scattering potrebbe essere fatta considerando che il "target", essendo composto da cariche in movimento, produce un campo elettromagnetico che potrebbe essere descritto in prima approssimazione con una teoria elettrodinamica di campo classico. Così facendo si possono studiare gli effetti di questo campo su una particella bersaglio in modo tale da non dover utilizzare dei potenziali ad hoc come fatto in questa trattazione. In un secondo momento si potrebbe passare ad utilizzare la meccanica quantistica per studiare i campi prodotti dagli atomi e confrontare il risultato con il caso classico e i dati sperimentali. Concludendo la ionizzazione è un processo frequente in atomi e molecole e, se si vuole avere una visione completa del quadro dei fenomeni microscopici, non può certamente essere trascurato.

Appendice

In questa appendice verranno trattati i calcoli necessari per esplicitare il fattore di forma $\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B})$ che servirà per calcolare l'ampiezza di scattering e di conseguenza le sezione d'urto differenziale tripla.

Calcolo del fattore di forma per trovare la TDCS

Si calcoli l'integrale (130) nel caso specifico in cui l'idrogeno sia inizialmente nello stato fondamentale, cioè $\psi_1(\mathbf{r}_2) = \psi_{1s}(r_2) = \pi^{-1/2}e^{-r_2}$. Sostituendo l'espressione ricavata in precedenza di $\psi_{c,\mathbf{k_B}}$ (62) si ha:

$$\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B}) = -2^{-3/2}\pi^{-2}e^{[\pi/(2k_B)]}\Gamma(1 - i/k_B)\left[\frac{\partial}{\partial\lambda}I(\mathbf{q}, \mathbf{k}_B, \lambda)\right]_{\lambda=1} , \quad (1.A)$$

con:

$$I(\mathbf{q}, \mathbf{k}_B, \lambda) = \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2}\frac{e^{-\lambda r_2}}{r_2}F_1\left(\frac{i}{k_B}, 1, i(k_B r_2 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2)\right) d\mathbf{r}_2 , \quad (2.A)$$

(dove $\mathbf{q} = \mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B$). In questo caso si è detta $F_1(ia, 1, u)$ la rappresentazione integrale della funzione ipergeometrica confluente:

$$F_1(ia, 1, u) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C t^{ia-1}(t-1)^{-ia}e^{ut}dt , \quad (3.A)$$

dove si pone $a = 1/k_B$, $u = i(k_B r_2 + \mathbf{k}_B \cdot \mathbf{r}_2)$. Quindi la funzione da integrare si ottiene sostituendo la (3.A) nella (2.A):

$$I(\mathbf{q}, \mathbf{k}_B, \lambda) = \int d\mathbf{r}_2 e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2}\frac{e^{-\lambda r_2}}{r_2}\frac{1}{2\pi i}\oint_C dt t^{ik_B-1}(t-1)^{-1/k_B}e^{i(k_B r + \mathbf{k}_B\cdot\mathbf{r}_2)t} . \quad (4.A)$$

Se c'è assoluta convergenza si può fare il cambio dell'ordine di integrazione e scrivere:

$$I(\mathbf{q}, \mathbf{k}_B, \lambda) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C dt\ t^{ik_B-1}(t-1)^{-i/k_B}\phi(t) , \quad (5.A)$$

con:

$$\phi(t) = \int dr e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}\frac{e^{-\lambda r}}{r}e^{i(k_B r + \mathbf{k}_B\cdot\mathbf{r})t} . \quad (6.A)$$

Condizione sufficiente affinchè $\phi(t)$ converga uniformemente rispetto a t è che $\lambda + 2k_B Im\ t > 0$, $\forall t$ nel contorno C. Supposto che C verifichi la condizione appena citata e che quindi si possa fare il cambio dell'ordine di integrazione si può svolgere l'integrale di $\phi(t)$. Chiamando θ l'angolo tra $\mathbf{r}_2$ e $\mathbf{q}+\mathbf{k}_B$ e ponendo $\mathbf{r}_2 \equiv \mathbf{r}$ per snellire la notazione si ha:

$$\phi(t) = \int d\mathbf{r}\frac{e^{-\lambda r}}{r}e^{itk_B r}e^{i\mathbf{r}\cdot(\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t)} . \quad (7.A)$$

Integrando si trova:

$$\phi(t) = 2\pi \int_0^\infty dr\ r^2 \frac{e^{-\lambda r}}{r} e^{itk_B r} \int_{-1}^{1} dx e^{ir|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t|x} =$$

$$= 2\int_0^\infty dr e^{-\lambda r} \frac{e^{itk_B r}}{|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t|} 2\sin\left[r|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t|\right]$$

$$\phi(t) = \frac{4\pi}{\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t} \int_0^\infty dr e^{r(itk_B-\lambda)} \sin\left[r|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B|t\right] \ .$$

Si noti che questo integrale è lo stesso risolto per ottenere l'integrale di Bethe (94) e quindi ripetendo gli stessi passaggi si ottiene:

$$\phi(t) = \frac{4\pi}{|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t|} \frac{|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t|}{|\mathbf{q}+\mathbf{k}_B t|^2 + (itk_B-\lambda)^2}$$

$$= \frac{4\pi}{-t^2k_B^2 + \lambda^2 - 2itk_B\lambda + q^2 + k_B^2t^2 + 2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B t} =$$

$$= \frac{4\pi}{\lambda^2 + q^2 - 2t(i\lambda - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)} \ . \tag{8.A}$$

L'equazione appena ottenuta sostituita nella (5.A) restituisce:

$$I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \frac{1}{2\pi i}\oint_C dt\ t^{ik_B-1}(t-1)^{-i/k_B} \frac{4\pi}{\lambda^2+q^2-2t(i\lambda-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}$$

$$= \left(\frac{2}{i}\right)\oint dt \frac{t^{i/k_B-1}(t-1)^{-i/k_B}}{\lambda^2+q^2-2t(i\lambda-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)} \ . \tag{9.A}$$

Oltre alle discontinuità in $t=0$ e $t=1$ è presente anche un polo semplice per $\lambda^2+q^2-2t(i\lambda-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)=0$ e cioè per:

$$t_0 = \frac{\lambda^2+q^2}{2(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)} \ , \tag{10.A}$$

la cui parte immaginaria è (moltiplicando e dividendo per $-ik_B\lambda + \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B$):

$$Im\ t_0 = Im\ \left[\frac{(\lambda^2+q^2) - ik_B\lambda + \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B}{2(\lambda^2k_B^2 + \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}\right] =$$

$$= -\frac{\lambda k_B(\lambda^2k_B^2)}{2(\lambda^2k_B^2 + (\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)^2)} \ . \tag{11.A}$$

Quindi:

$$\lambda + 2k_B Im\ t_0 = \lambda + \frac{k_B(-\lambda k_B)(\lambda^2k_B^2)}{(\lambda^2k_B^2 + (\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)^2)} =$$

$$= \frac{\lambda(\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)^2 + \lambda^3k_B^2 - \lambda^3k_B^2 - \lambda k_B^2q^2}{\lambda^2k_B^2 + (\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)^2} =$$

$$= -\frac{\lambda\left[k_B^2 q^2 - (\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)\right]}{\left[(\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)^2 + \lambda^2 k_B^2\right]} \ .$$

Ciò implica che $\lambda + 2k_B Im\ t_0 < 0$ e quindi che t_0 è l'unica singolarità fuori dal contorno C. Bisogna integrare nel piano complesso t intorno ai punti di singolarità $t = 0$ e $t = 1$ come evidenziato in figura:

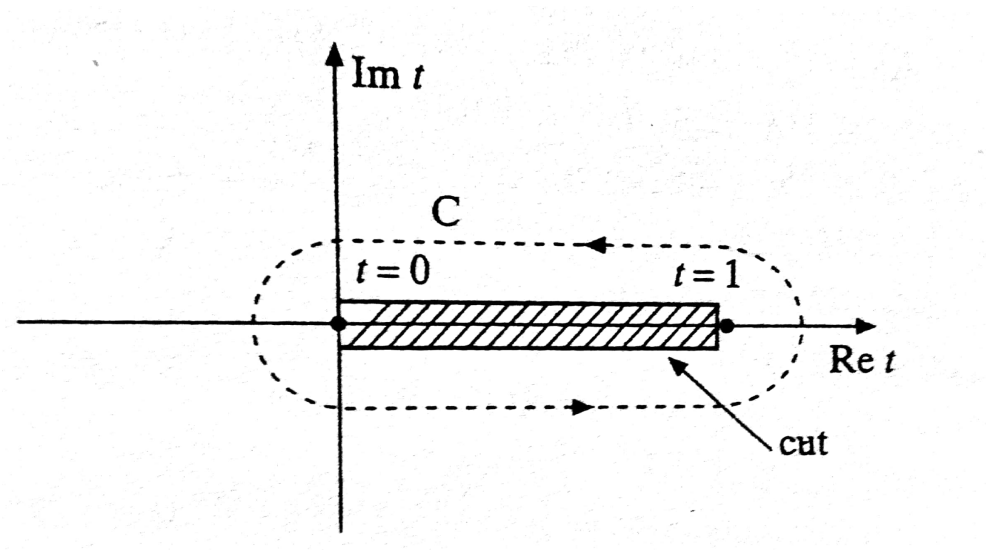

Figura 12: Integrazione sul contorno

Per poter integrare si considera il cerchio S di raggio R molto più grande delle dimensioni di C e si prosegue sfruttando il teorema di Cauchy. Detto Γ il contorno totale e f(z) la funzione da integrare sul contorno si ha che:

$$\int_\Gamma dz\ f(z) = 0 \qquad \text{per il teorema di Cauchy.} \tag{12.A}$$

Per come è stato definito Γ si può scrivere:

$$0 = \int_\Gamma dz\ f(z) = \oint_C f(z)dz + \oint_{d_1} f(z)dz - \oint_{d_1} f(z)dz + \oint_{d_2} f(z)dz$$
$$- \oint_{d_2} f(z)dz + \oint_D f(z)dz + \oint_s f(z)dz \ .$$

Dove d_1 e d_2 sono rispettivamente i segmenti che uniscono C con D (che è il percorso intorno t_0) e D con S. Inoltre per $R \to \infty$ l'integrale su S va a zero come 1/R il che significa che l'equazione si riduce a:

$$\int_C dz\ f(z) = -\int_D dz\ f(z) \ .$$

Poichè in D c'è un polo semplice si può risolvere l'integrale usando il teorema dei residui:

$$I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \left(\frac{2}{i}\right)\frac{1}{(-2)(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}\oint_C dt\frac{t^{i/k_B-1}(t-1)^{-i/k_B}}{t-t_0} =$$

$$= \left(\frac{-1}{i}\right)\frac{1}{(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}(-1)\oint_D dt\frac{t^{i/k_B-1}(t-1)^{-i/k_B}}{t-t_0} \Rightarrow$$

$$I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \left(\frac{2\pi i}{i}\right)\frac{1}{(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}\frac{t_0^{i/k_B}(t_0-1)^{-i/k_B}}{t_0}$$

$$I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \frac{2\pi}{(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)t_0}\left(\frac{t_0}{t_0-1}\right)^{i/k_B} . \tag{13.A}$$

A questo punto si sostituisce nella (13.A) il valore calcolato di t_0 nella (10.A) . Per prima cosa:

$$\frac{t_0-1}{t_0} = \frac{\frac{\lambda^2+q^2}{2(i\lambda k_B-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}-1}{\frac{\lambda^2+q^2}{2(i\lambda k_B-\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)}} =$$

$$= \frac{q^2+\lambda^2+2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B}{q^2+\lambda^2} ,$$

e detta questa quantità $\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)$ si ha che:

$$\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \frac{q^2+\lambda^2+2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B}{q^2+\lambda^2} , \tag{14.A}$$

che per $\lambda = 1$, ricordando che $\mathbf{q} = \mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B$, diventa:

$$\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda=1) = \frac{\Delta^2-k_B^2+1-2ik_B}{(\mathbf{\Delta}-\mathbf{k}_B)^2+1} . \tag{15.A}$$

Inoltre sostituendo al denominatore si ha:

$$(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)t_0 = (i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)\frac{(\lambda^2+q^2)}{2(i\lambda k_B - \mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B)} = \frac{\lambda^2+q^2}{2} .$$

Sostituendo tutto nella (13.A) si ottiene:

$$I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \frac{4\pi}{(\lambda^2+q^2)}\left[\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)\right]^{-i/k_B} \Rightarrow$$

$$I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda) = \frac{4\pi}{(\lambda^2+q^2)}e^{-\frac{i}{k_B}\log[\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)]} . \tag{16.A}$$

Adesso che l'espressione di $I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)$ (16.A) è nota si può finalmente calcolare la sua derivata da sostituire nella (1.A).

$$\frac{\partial I(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)}{\partial\lambda} = 4\pi\frac{\partial}{\partial\lambda}\frac{e^{-\frac{i}{k_B}\log[\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)]}}{q^2+\lambda^2} =$$

$$\frac{4\pi}{(q^2+\lambda^2)^2}\left[e^{-\frac{i}{k_B}\log\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)}-\frac{i}{k_B}\frac{1}{\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)}\frac{\partial\nu}{\partial\lambda}(q^2+\lambda^2)+\right.$$

$$\left.-2\lambda e^{-\frac{i}{k_B}\log\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)}\right]=$$

$$=\frac{4\pi}{(q^2+\lambda^2)^2}e^{-\frac{i}{k_B}\log\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)}$$

$$\times\left[-\frac{i}{k_B}\frac{(q^2+\lambda^2)}{\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda)}\frac{(2\lambda-2ik_B)(q^2+\lambda^2)-2\lambda(q^2+\lambda^2+2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B}{q^2+\lambda^2}\right]=$$

$$=\frac{4\pi}{(q^2+\lambda^2)^2}e^{-\frac{i}{k_B}\log\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda=1)}$$

$$\times\left[\frac{-i}{k_B}\frac{(2\lambda-2ik_B)(q^2+\lambda^2)-2\lambda(q^2+\lambda^2)-2\lambda(2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)}{(q^2+\lambda^2+2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)}-2\lambda\right]=$$

$$=\frac{4\pi}{(q^2+\lambda^2)^2}e^{-\frac{i}{k_B}\log\nu(\mathbf{q},\mathbf{k}_B,\lambda=1)}$$

$$\times\left[(-i)\frac{(-2ik_B)(q^2+\lambda^2)-2\lambda(2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)-2\lambda(q^2+\lambda^2)-2\lambda(2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)}{(q^2+\lambda^2+2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)}\right].$$

Per prima cosa si studia il denominatore:

$$(q^2+\lambda^2+2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)=\Delta^2+k_B^2-2\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B+\lambda^2+2\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B-2k_B^2-2i\lambda k_B=$$

$$=\Delta^2-(k_B+i\lambda)^2\ .$$

Il numeratore , detto $N(\lambda)$, vale:

$$N(\lambda)=(-2ik_B)(q^2+\lambda^2)-2\lambda(2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)-2\lambda(q^2+\lambda^2)-2\lambda(2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)=$$

$$=2k_B(q^2+\lambda^2)(1+\lambda)+2\lambda(2\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_B-2i\lambda k_B)(i-k_B)\ .$$

Per $\lambda=1$ e utilizzando $\mathbf{q}=\mathbf{\Delta}-\mathbf{k}_B$ si ha:

$$N(\lambda=1)=-4k_B(1+\Delta^2+k_B^2-2\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B)+4\,(i-k_B)\,(\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B-k_B^2-ik_B)\ .$$

Si raccolga k_B così da avere:

$$\frac{N(\lambda=1)}{k_B}=-4(1+\Delta^2+k_B^2-2\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B)+4\left(\frac{i}{k_B}\right)(\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B-k_B^2-ik_B)=$$

$$=-4\left[1+\Delta^2+k_B^2-2\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B+\left(1-\frac{i}{k_B}\right)\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B+\left(1-\frac{i}{k_B}\right)(k_B^2+ik_B)\right]=$$

$$=-4\left[1+\Delta^2+k_B^2-2\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B+\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B-\frac{i}{k_B}\mathbf{\Delta}\cdot\mathbf{k}_B+ik_B-1-k_B^2-ik_B\right]=$$

$$=-4\mathbf{\Delta}\cdot\left[\mathbf{\Delta}-\mathbf{k}_B\left(1+\frac{i}{k_B}\right)\right].$$

A questo punto si sostituisce la derivata appena calcolata nel fattore di forma (1.A):

$$\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B}) = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} e^{\pi/2k_B} \Gamma(1 - i/k_B) e^{\left[-\frac{i}{k_B} \log \nu(\mathbf{q}, \mathbf{k}_B, \lambda=1)\right]} \ldots$$

$$\ldots \frac{\mathbf{\Delta} \cdot [\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B(1 + i/k_B)]}{[\Delta^2 - (k_B + i)^2][(\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B)^2 + 1]^2} \ . \tag{17.A}$$

Per conoscere la sezione d'urto differenziale tripla bisogna trovare il modulo quadro dell'ampiezza di scattering e quindi calcolare il modulo quadro del fattore di forma. Si analizzano quindi i vari fattori di $\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B})$ singolarmente. Innanzitutto si focalizzi l' attenzione sul termine esponenziale e si ricordi che:

$$\ln(z) = \ln|z| + i \ arg(z) \ .$$

Come mostrato nella (15.A):

$$\nu(\mathbf{q}, \mathbf{k}_B, \lambda = 1) = \frac{\Delta^2 - k_B^2 + 1 - 2ik_B}{(\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B)^2 + 1} = \frac{\Delta^2 - k_B^2 + 1}{(\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B)^2 + 1} - \frac{2ik_B}{(\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B)^2 + 1} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow arg(z) = \arctan\left(-\frac{2k_B}{\Delta^2 - k_B^2 + 1}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \log \nu = \log|\nu| + i \arctan\left(-\frac{2k_B}{\Delta^2 - k_B^2 + 1}\right) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow e^{-\frac{i}{k_B} \log \nu} = e^{-\frac{i}{k_B}|\nu|} e^{-\frac{i}{k_B} i \arctan\left(-\frac{2k_B}{\Delta^2 + k_B^2 + 1}\right)} \ ,$$

da cui si ricava che:

$$\left|e^{-\frac{i}{k_B}}\right|^2 = e^{-\frac{2}{k_B} \arctan\left(-\frac{2k_B}{\Delta^2 + k_B^2 + 1}\right)} \ . \tag{18.A}$$

Si passa a calcolare:

$$|\mathbf{\Delta} \cdot [\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B(1 + i/k_B)]|^2 \ ,$$

che risulta uguale a:

$$\{\mathbf{\Delta} \cdot [\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B(1 + i/k_B)]\} \{\mathbf{\Delta} \cdot [\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B(1 - i/k_B)]\} \ .$$

Dal prodotto di queste due quantità e chiamando γ l'angolo tra $\mathbf{\Delta}$ e $\mathbf{k}_B$ si ha:

$$\Delta^2 \left\{\Delta^2 - 2\Delta k_B \cos\gamma + (k_B^2 + 1)\cos^2\gamma\right\} \ . \tag{19.A}$$

Analogamente si ricava anche:

$$\left|\Delta^2 - (k_B^2 + i)^2\right|^2 = \Delta^4 - 2\Delta^2(k_B^2 - 1) + (k_B^2 - 1)^2 + 4k_B^2 \ , \tag{20.A}$$

mentre la quantità $[(\mathbf{\Delta} - \mathbf{k}_B)^2 + 1]^2$ è reale. Per quanto riguarda la funzione Gamma di Eulero si ha:

$$|\Gamma(1+iy)|^2 = |\Gamma(1+iy)||\Gamma(1-iy)| = \frac{\pi y}{\sinh(\pi y)} \qquad (\text{con } y = -1/k_B)$$

Inoltre nel modulo quadro da esplicitare compare il prodotto:

$$e^{\frac{\pi}{k_B}} |\Gamma(1 - i/k_B)|^2 = \frac{e^{\frac{\pi}{k_B}} \pi \left(-\frac{1}{k_B}\right)}{\frac{e^{-\frac{\pi}{k_B}} - e^{\frac{\pi}{k_B}}}{2}} \ ,$$

che può essere scritto come:

$$= \left(\frac{2\pi}{k_B} \frac{1}{1 - e^{-2\frac{\pi}{k_B}}}\right) \ . \tag{21.A}$$

Utilizzando le (18.A), (19.A) , (20.A) e (21.A) si può scrivere il modulo quadro della $\mathcal{L}_i^H(\mathbf{\Delta}, \mathbf{k_B})$ che grazie alla (128) e (129) permette di trovare la sezione d'urto differenziale tripla:

$$\frac{d^3\sigma_{1s}^{B1}}{d\Omega_A d\Omega_B dE} = \frac{k_A k_B}{k_i} |f_i^{B1}|^2 \ .$$

Bibliografia

- B.H. BRANSDEN AND C.J.JOACHAIN 1983
  Physic of atoms and molecules
  Published by Longman Scientific & Thecnical
- B.H. BRANSDEN AND C.J.JOACHAIN 2003
  Physic of atoms and molecules 2nd edition
  Published by Prentice Hall
- B.H. BRANSDEN 1970
  Atomic Collision Theory
  Published by W. A. Benjamin Inc
- J.J. SAKURAI 1994
  Modern Quantum Mechanics Revised Edition
  Published by Addison-Wesley Publishing Company
- M. ABRAMOWITZ AND I. STEGUN 1964
  Handbook of mathematical functions
  Published by National Institute of Standards and Technology (NBS)
- COHEN TANNOUDJI, BERNARD DIU
  AND FRANCK LALOE 2006
  Quantum Mechanics
  Published by Hermann and by John Wiley & Sons