



SAPIENZA
UNIVERSITÀ DI ROMA

Autovalori e stati legati dell'Hamiltoniana in presenza del potenziale di Yukawa

Facoltà di Scienze Matematiche, Fisiche e Naturali
Corso di Laurea in Fisica

Candidato

Riccardo Marinelli

Matricola 1795445

Relatore

Prof. G. Martinelli

Anno Accademico 2019/2020

Tesi non ancora discussa

Autovalori e stati legati dell'Hamiltoniana in presenza del potenziale di Yukawa
Tesi di Laurea. Sapienza – Università di Roma

© 2020 Riccardo Marinelli. Tutti i diritti riservati

Questa tesi è stata composta con \LaTeX e la classe Sapthesis.

Email dell'autore: marinelli.1795445@studenti.uniroma1.it

Ringraziamenti

Il mio sincero grazie va a mia madre e a tutti i componenti della mia famiglia, perché hanno costantemente fiducia in me mentre inseguo i miei sogni.

Un grazie affettuoso ai miei amici e alle mie amiche, un grazie soprattutto ad Arianna, per avermi sempre offerto aiuto e per avermi reso felice anche quando sentivo grandi preoccupazioni, siete molti, ma vi porto tutti nel cuore.

Un grazie colmo di gratitudine al mio amico Antonio De Lucreziis, per avermi insegnato a usare *Mathematica*, senza di lui sarei stato perduto.

Grazie ad Emanuele, per essere sempre un amico sincero e un esempio da seguire, per il quale trovo coraggio ed entusiasmo nello studio e nella mia vita cristiana.

Grazie al mio relatore, per avermi proposto un argomento di studio appassionante e per la pazienza dimostrata nel farmi notare i miei errori.

Grazie a Massimo della frutta, il perché lo sanno tutti.

Grazie a chi, anche nel più piccolo istante, abbia avuto fiducia nel fatto che qualche mia azione potesse portare del bene.

A zia Marianna

Sommario

Nella presente dissertazione si intende sviluppare il formalismo dei potenziali centrali per poi individuare spettro e autofunzioni dell'atomo d'idrogeno.

Ottenuti tali strumenti, si intende risolvere numericamente l'equazione di Schrödinger nel caso di potenziale di Yukawa, fornendo gli autovalori e le relative autofunzioni, mostrando così la parziale rimozione delle degenerazioni presenti nel caso coulombiano.

Indice

1	Equazione di Shrödinger per potenziali centrali	2
1.1	Unità di misura atomiche	2
1.2	Sistemi con potenziale centrale	2
1.3	Il caso dell'atomo d'idrogeno	4
2	Il potenziale di Yukawa	6
2.1	L'equazione di Klein-Gordon	6
2.2	Soluzioni stazionarie dell'equazione di Klein-Gordon	6
2.3	Dipendenze del problema dai parametri	7
2.4	Problema perturbativo	8
2.5	Problema da affrontare numericamente	9
3	Calcolo numerico dello spettro e delle autofunzioni	10
3.1	Calcolo delle condizioni iniziali delle autofunzioni	10
3.2	Calcolo dello spettro e delle autofunzioni del sistema	11
4	Risultati per lo spettro e le autofunzioni	12
4.1	Test: atomo d'idrogeno	12
4.2	Autovalori e autofunzioni in presenza di potenziale di Yukawa	13
5	Conclusioni	18
	Bibliografia	22

Introduzione

Una delle interazioni più note in natura è l'interazione elettrostatica che agisce tra due entità dotate di carica, ad essa è associata la forza di Coulomb che è derivabile dal potenziale coulombiano $U_C(r) = Ze^2 \frac{1}{r}$; inoltre, l'interazione elettrostatica può essere interpretata come un'interazione data dallo scambio tra due particelle di un fotone, una particella di massa nulla.

Il potenziale coulombiano è molto peculiare: se studiato nell'ambito della meccanica quantistica per la ricerca dei possibili stati del sistema fisico in esame, esso conferisce infiniti stati legati ed i livelli energetici associati a tali stati sono degeneri (a parità di numero quantico principale n) per diversi valori del numero quantico orbitale l ; tale degenerazione è dovuta alla simmetria accidentale di Lenz. Ci si aspetta, dunque, per potenziali più generici, di non osservare lo stesso comportamento.

Per evidenziare l'unicità del potenziale coulombiano, si è scelto di operare un confronto con un altro potenziale noto e di largo interesse nella fisica: il potenziale di Yukawa, dato dall'espressione $U_Y(r) = -\lambda \frac{1}{r} \exp\left\{-\frac{r}{r_0}\right\}$, con $\lambda > 0$, $r_0 > 0$.

A causa della sua forma, quest'ultimo potenziale è detto anche potenziale di Coulomb schermato; la scelta di tale potenziale è dettata sia dalla sua dipendenza dal parametro r_0 che adatta una stessa espressione matematica a diverse situazioni fisiche, sia dalla sua utilità nella fisica perché descrive l'interazione tra due nucleoni.

Anche l'interazione tra nucleoni, in modo simile all'interazione agente tra particelle cariche, può essere interpretata come scambio di una particella (questa volta dotata di massa), che fu chiamata pione tempo dopo la proposta del potenziale in questione da parte di Hideki Yukawa [1].

La grande versatilità del potenziale da lui proposto è attestata anche in altri ambiti della fisica: è utilizzato per modellizzare sistemi di particelle colloidali in elettroliti [2] e ad esso ci si riferisce come potenziale di Debye in fisica del plasma dove è utilizzato, in prima approssimazione, per descrivere l'interazione tra due particelle immerse in un plasma [3], [4], [5].

Essendo il potenziale di Yukawa a simmetria sferica, si può studiare il problema agli autovalori dell'hamiltoniana nel formalismo dei potenziali centrali, utilizzando, inoltre, i risultati noti per il sistema fisico dell'atomo d'idrogeno.

Capitolo 1

Equazione di Schrödinger per potenziali centrali

1.1 Unità di misura atomiche

Nella seguente trattazione useremo il sistema di unità di misura atomico tale che

$$\hbar = m_e = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1$$

dove m_e è la massa dell'elettrone ed e è la carica fondamentale; ciò permette di misurare le lunghezze in unità di raggi di Bohr $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 0.529177 \times 10^{-10}\text{m}$.

Nelle unità di misura scelte, l'equazione di Schrödinger a stati stazionari assume la forma

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla_{\vec{r}}^2 + U(\vec{r}) \right] \psi_E(\vec{r}) = E\psi_E(\vec{r}) . \quad (1.1)$$

1.2 Sistemi con potenziale centrale

Consideriamo un sistema fisico soggetto a un potenziale centrale $U = U(r)$, con $r = |\vec{r}|$, allora, passando in coordinate sferiche, si cercano soluzioni del tipo

$$\psi_E(\vec{r}) = R_E(r)Y_{lm}(\theta, \phi) .$$

In tale modo, l'equazione (1.1) può essere separata in parte angolare e parte radiale. Le soluzioni dell'equazione angolare, comuni per tutti i problemi di potenziale centrale, sono le armoniche sferiche Y_{lm} , mentre l'equazione di Schrödinger per la parte radiale della funzione d'onda è data da

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR_E}{dr} \right) + 2 \left(E - U(r) - \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right) R_E = 0 \quad (1.2)$$

Il problema può essere semplificato ponendo

$$y(r) = R(r)r , \quad (1.3)$$

per cui la (1.2) diventa

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + U(r) + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y(r) = E y(r) . \quad (1.4)$$

Poiché le forze conosciute in natura sono locali, è necessario che l'intensità delle interazioni vada a zero con la distanza che tende a infinito; per questo motivo è necessario che il potenziale descrivente l'interazione tenda a una costante. Inoltre, è sempre possibile ridefinire la scala delle energie in modo tale che il potenziale si annulli all'infinito. Nelle convenzioni utilizzate, i potenziali d'interesse di questa trattazione saranno di tipo coulombiano o che conservino lo stesso comportamento nell'origine e che si annullino all'infinito.

In presenza di un potenziale di suddetto tipo, l'equazione (1.4) possiede uno spettro discreto di autovalori negativi e uno spettro continuo di energie positive.

Si ricercano gli stati legati dotati di energia negativa, per cui, in luogo del parametro E e della variabile r , introduciamo le due grandezze

$$k = \sqrt{2|E|}; \quad x = 2kr ,$$

in tale modo, quindi, l'equazione (1.4) assume la forma:

$$\frac{d^2 y(x)}{dx^2} - \left[\frac{1}{4} + \frac{1}{2k^2} U\left(\frac{x}{2k}\right) + \frac{l(l+1)}{x^2} \right] y(x) = 0 . \quad (1.5)$$

Perché $R(r)$ possa essere una funzione d'onda normalizzabile, va imposta la condizione di regolarità

$$\int_0^\infty r^2 |R(r)|^2 dr < +\infty$$

ciò implica che, per $r \rightarrow 0$

$$y(r) \rightarrow O(r) . \quad (1.6)$$

Per $r \ll 1$ il potenziale $U(r)$ si deve poter scrivere come $U(r) = -\frac{g}{r} + U_1(r)$, con $g > 0$ costante e $U_1(r)$ inferiormente limitato; con queste ipotesi, per valori piccoli di r , la soluzione all'equazione (1.5) è proporzionale a r^{l+1} .¹

Poiché i potenziali di interesse si annullano per $r \rightarrow +\infty$, si può ottenere la soluzione asintotica per $r \rightarrow +\infty$ eliminando dall'equazione (1.5) i termini del tipo $\frac{1}{x^2}$ e $\frac{1}{x}$ e ottenendo quindi l'equazione

$$y'' = \frac{y}{4}$$

da cui, imponendo che y si annulli all'infinito, si ottiene la soluzione per il limite di grandi x :

$$y_\infty(x) = A \exp\left\{-\frac{x}{2}\right\} .$$

¹Questo risultato si ottiene supponendo come soluzione una funzione del tipo $\cos * r^s$, si ottengono così le soluzioni $s = l + 1$ e $s = -l$ ma solo la prima soddisfa la condizione (1.6)

Le considerazioni sulle soluzioni limite fatte fin ora, dunque, suggeriscono la sostituzione

$$y_l(x) = Ax^{l+1} \exp\left\{-\frac{1}{2}x\right\} v_l(x) , \quad (1.7)$$

grazie alla quale l'equazione (1.5) assume la forma

$$x \frac{d^2 v_l}{dx^2} + (2l + 2 - x) \frac{dv_l}{dx} - \left[l + 1 + \frac{x}{2k^2} U\left(\frac{x}{2k}\right) \right] v_l = 0 . \quad (1.8)$$

1.3 Il caso dell'atomo d'idrogeno

Un caso molto semplice per $U(r)$ è il potenziale coulombiano $U(r) = -\frac{1}{r}$ per il quale l'equazione (1.8) diventa

$$x \frac{d^2 v_l}{dx^2} + (2l + 2 - x) \frac{dv_l}{dx} - \left[l + 1 - \frac{1}{k} \right] v_l = 0 . \quad (1.9)$$

Per quest'ultima equazione, esiste la soluzione analitica

$$v_l(x) = A F\left(l + 1 - \frac{1}{k}, 2(l + 1), x\right) , \quad (1.10)$$

dove F è la **funzione ipergeometrica confluyente** ed è definita come

$$F(a, b, x) := 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{a(a+1) \dots (a+n-1)}{c(c+1) \dots (c+n-1)} \frac{x^n}{n!} .$$

Si ottiene quindi

$$y_l(x) = Ax^{l+1} e^{-\frac{x}{2}} F\left(l + 1 - \frac{1}{k}, 2(l + 1), x\right) ,$$

che è autofunzione se $l + 1 - \frac{1}{k} = -n_r$, con $n_r \in \mathbb{N}$.

Si può definire il numero quantico principale n come $n = n_r + l + 1$, ottenendo

$$y_l(r) = A(2k_n r)^{l+1} e^{-k_n r} F(-n + l + 1, 2(l + 1), 2k_n r) .$$

Utilizzando, a questo punto, $k = \frac{1}{n}$ e $k = \sqrt{2|E|}$ e risolvendo per E , si ottiene lo spettro dell'atomo di idrogeno:

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} .$$

La funzione ipergeometrica confluyente è legata ai **polinomî di Laguerre generalizzati** dalla relazione

$$L_p^q(x) = (-1)^q p! \binom{p}{q} F(-p + q, 1 + q, x)$$

Adottando una definizione alternativa, coerente con [6], il polinomio di Laguerre generalizzato $L_p^q(x)$ è soluzione dell'equazione

$$xv''(x) + (q+1-x)v'(x) + pv = 0 \quad (1.11)$$

che corrisponde esattamente all'equazione (1.8) nel caso di potenziale coulombiano, per cui v_l sarà proporzionale al polinomio di Laguerre e può essere ottenuto ricorsivamente o dalla relazione

$$L_p^q(x) = \sum_{s=0}^p (-1)^s \frac{[(p+q)!]^2}{(p-s)!(q+s)!} \frac{x^s}{s!} . \quad (1.12)$$

E dunque la soluzione dell'equazione (1.4) è data da

$$y_l(r) = A(2k_n r)^{l+1} e^{-k_n r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2k_n r) ; \quad (1.13)$$

dove gli indici del polinomio di Laguerre generalizzato sono ottenuti confrontando l'equazione (1.11) con l'equazione (1.9)

Si ottiene, infine

$$\boxed{R_{nl}(r) = C_{nl}(2k_n r)^l e^{-k_n r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2k_n r)} , \quad (1.14)$$

dove, imponendo la normalizzazione della funzione d'onda:

$$C_{nl} = \sqrt{(2k_n)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}} . \quad (1.15)$$

Capitolo 2

Il potenziale di Yukawa

In questo lavoro prenderemo in considerazione il problema agli autovalori dell'hamiltoniana in presenza del potenziale che descrive l'interazione tra nucleoni, il potenziale di Yukawa, che si può ricavare a partire dall'equazione di Klein-Gordon.

2.1 L'equazione di Klein-Gordon

Un primo tentativo di rendere quantistica l'equazione di Schrödinger è l'equazione di Klein-Gordon, quest'ultima si ottiene, considerando il sistema di riferimento in cui $c = 1$, quantizzando la relazione di dispersione relativistica

$$E^2 - p^2 = m^2$$

Si applicano le sostituzioni $\begin{cases} E \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t} \\ \vec{p} \rightarrow -i \vec{\nabla} \end{cases}$

e in tale modo si ottiene l'*Equazione di Klein-Gordon*

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Phi - \nabla^2 \Phi + m^2 \Phi = 0 \quad (2.1)$$

Essa possiede come ovvia soluzione $\Phi = N e^{i\vec{p} \cdot \vec{r} - iEt}$, con $E = \pm \sqrt{p^2 + m^2}$, che è la soluzione relativistica di particella libera.

2.2 Soluzioni stazionarie dell'equazione di Klein-Gordon

Il potenziale di Yukawa si ottiene cercando le soluzioni stazionarie dell'equazione (2.1), ovvero le soluzioni dell'equazione

$$(\nabla^2 - m^2)\Phi = \delta^3(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Supponendo che la soluzione possieda simmetria sferica, essa risolve, esprimendo l'operatore Laplaciano in coordinate sferiche:

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) &= m^2 \Phi \\ \frac{1}{r^2} \left(r^2 \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + 2r \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) &= m^2 \Phi \\ r \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + 2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} - mr^2 \Phi &= 0 \end{aligned} \quad (2.3)$$

La soluzione si ottiene ponendo $f = r\Phi$ e notando che $\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} = r \frac{\partial^2 \Phi}{\partial r^2} + \frac{\partial \Phi}{\partial r}$.

Allora, la (2.3) assume la forma

$$\frac{\partial^2 f}{\partial r^2} - m^2 f = 0 ,$$

che possiede, convergente per $r \rightarrow +\infty$, la soluzione

$$f = \lambda e^{-mr} .$$

Con $m > 0$ e con $\lambda \in \mathbb{R}$

Si ottiene dunque il potenziale di Yukawa

$$U(r) = -\lambda \frac{e^{-mr}}{r} = -\lambda \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{r_0}} , \quad (2.4)$$

dove il parametro λ è la costante d'accoppiamento e, se $m \rightarrow 0$ o, equivalentemente, $r_0 \rightarrow +\infty$, il potenziale di Yukawa degenera nel potenziale coulombiano.

Si ottiene, invece, il limite di particella libera, nel limite $m \rightarrow +\infty$ (o $r_0 \rightarrow 0$)

2.3 Dipendenze del problema dai parametri

Ottenuta la soluzione (2.4) dell'equazione (2.2), essa può essere inserita nella (1.4) ottenendo

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \lambda \frac{e^{-mr}}{r} + \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] y_{nl}(r) = E_{nl}(\lambda, m) y(r) \quad (2.5)$$

Si può notare che, mandando r in $\frac{r}{\lambda}$, il problema agli autovalori perde la dipendenza dal parametro λ e, risolvendo il nuovo problema che dà le soluzioni $E_{n,l}\left(1, \frac{m}{\lambda}\right)$, si ottengono le soluzioni del problema iniziale (2.5) mediante la relazione

$$E_{n,l}(\lambda, m) = \lambda^2 E_{n,l}\left(1, \frac{m}{\lambda}\right)$$

Per questo motivo si può porre, senza perdita di generalità, $\lambda = 1$ e si studierà il potenziale

$$U(r) = -\frac{e^{-mr}}{r} = -\frac{1}{r}e^{-\frac{r}{r_0}} \quad (2.6)$$

In tale modo, i livelli di energia $E_{n,l}$ dipenderanno unicamente dal valore di r_0 . Oltre che i livelli energetici $E_{n,l}$, dipendente dal parametro r_0 sarà anche il **numero di stati legati**; difatti, data la coppia di numeri quantici (n, l) , esiste un valore critico per r_0 , che denoteremo $r_{0,c}^{(n,l)}$ tale che

- Se $r_0 > r_{0,c}^{(n,l)}$, lo stato (n, l) è legato ed è descritto da una funzione d'onda normalizzata;
- Se $r_0 < r_{0,c}^{(n,l)}$, l'energia dello stato (n, l) passa dallo spettro discreto allo spettro continuo e la funzione d'onda non è normalizzabile.

Dunque, per uno stato (n, l) , il parametro di screening critico $r_{0,c}^{(n,l)}$ è tale che

$$E_{n,l}(r_{0,c}^{(n,l)}) = 0 \quad (2.7)$$

È anche possibile [8] mostrare che l'energia $E_{n,l}$ può essere rappresentata come un'espansione in serie di potenze di r_0 :

- Per stati con $l = 0$, $E_{n,0} = \frac{1}{r_0^2} \sum_{k=2}^{\infty} \beta_k^{n,0} (r_{0,c}^{(n,0)})^{-k} (r_0 - r_{0,c}^{(n,0)})^k$
- Per stati con $l \neq 0$, $E_{n,l} = \frac{1}{r_0^2} \sum_{k=2}^{\infty} \beta_{k-1}^{n,l} (r_{0,c}^{(n,0)})^{-k/2} (r_0 - r_{0,c}^{(n,l)})^{k/2}$

con $\beta_k^{n,0}$ e $\beta_{k-1}^{n,0}$ coefficienti reali.

2.4 Problema perturbativo

Innanzitutto, si può studiare il sistema considerato come perturbazione del sistema fisico dell'atomo d'idrogeno.

Date le conclusioni sulla dipendenza del problema agli autovalori dalla costante d'accoppiamento, possiamo utilizzare il potenziale nella forma (2.6), per il quale è possibile scrivere

$$U(r) = -\frac{1}{r}e^{-\frac{r}{r_0}} = -\frac{1}{r} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j}{j!} \left(\frac{r}{r_0}\right)^j,$$

allora, al primo ordine:

$$U(r) \simeq -\frac{1}{r} + \frac{1}{r_0}.$$

Dunque, considerando i termini al primo ordine perturbativo, detta H l'Hamiltoniana del sistema e detta H_0 l'hamiltoniana dell'atomo d'idrogeno, poiché vale la relazione

$$H \simeq H_0 + \frac{1}{r_0} ,$$

ci si aspetta, per alti valori di r_0 , che i livelli di energia del sistema legato siano dati da

$$E_{n,l} \simeq E_{n,l}^H + \frac{1}{r_0} ,$$

dove $E_{n,l}^H$ sono i livelli di energia dell'atomo d'idrogeno. Tale risultato si può verificare risolvendo il problema agli autovalori per valori di r_0 sempre maggiori.

2.5 Problema da affrontare numericamente

Adottando la sostituzione $x = 2kr$, il potenziale di Yukawa nella forma (2.6) diventa:

$$U\left(\frac{x}{2k}\right) = -\frac{2k}{x} \exp\left\{-\frac{x}{2kr_0}\right\} , \quad (2.8)$$

che può essere inserita nell'equazione (1.8) per ottenere

$$x \frac{d^2 v_l}{dx^2} + (2l + 2 - x) \frac{dv_l}{dx} - \left[l + 1 - \frac{1}{k} \exp\left\{-\frac{x}{2kr_0}\right\} \right] v_l = 0 . \quad (2.9)$$

Questa equazione non può essere risolta analiticamente, per cui occorre sviluppare il calcolo degli autovalori e delle autofunzioni mediante l'ausilio di strumenti di calcolo numerico, i dettagli del calcolo e i risultati sono riportati nel capitolo seguente.

Capitolo 3

Calcolo numerico dello spettro e delle autofunzioni

Ottenuto il problema (2.9), si procede alla risoluzione di quest'ultimo in due passaggi: l'individuazione delle condizioni al contorno della soluzione e il calcolo numerico vero e proprio, i cui dettagli sono riportati nelle sezioni seguenti.

3.1 Calcolo delle condizioni iniziali delle autofunzioni

L'obiettivo che si vuole raggiungere è il calcolo di autovalori e autofunzioni di un sistema con potenziale che nei pressi dell'origine corrisponde a quello Coulombiano, grazie alle richieste fatte sul potenziale, si può risolvere l'equazione (2.9) supponendo che il valore in $x = 0$ della funzione v_l e della sua derivata siano uguali a quelli assunti nel caso dell'atomo d'idrogeno. Dunque, come primo passo, vanno calcolate la condizione iniziale sulla soluzione $v_l(x=0) = v_l^H\left(x=0, k=\frac{1}{n}\right)$ e la condizione iniziale sulla derivata $\frac{dv_l}{dx}(x=0) = \frac{dv_l^H}{dx}\left(x=0, k=\frac{1}{n}\right)$, dove v_l^H è la soluzione dell'equazione (1.9) relativa al caso del potenziale coulombiano.

Questi ultimi valori possono essere calcolati a partire dai polinomi di Laguerre dei quali si conosce l'espressione analitica, per cui si è proceduto nel modo seguente mediante l'utilizzo del software *Mathematica*:

1. Si definiscono i coefficienti C_{nl} scrivendone l'espressione analitica e si definiscono i polinomi di Laguerre generalizzati $L_p^q(x)$ (nella convenzione adottata in questo lavoro) tramite la funzione `LaguerreL`;
2. si ottiene la funzione dalla quale calcolare le condizioni iniziali data da $v_l^H(x, k) = C_{nl}(k)\text{LaguerreL}[n-1-1, 2l+1, x]$, essa è la soluzione analitica dell'equazione (1.9);

3. si scelgono i numeri quantici n ed l caratterizzanti lo stato da prendere in considerazione, si opera la sostituzione $k = \frac{1}{n}$ e si calcolano le condizioni iniziali $v_l^H\left(0, \frac{1}{n}\right)$ e $\frac{dv_l^H}{dx}\left(0, \frac{1}{n}\right)$.

3.2 Calcolo dello spettro e delle autofunzioni del sistema

Va ora risolto (numericamente) il problema (2.9) del quale si conoscono le condizioni iniziali calcolate nella sezione precedente. L'equazione (2.9) può essere integrata con le stesse condizioni iniziali per un insieme continuo di valori di $k_{n,l}$, ma, per ogni coppia di numeri quantici (n, l) , solo un $k_{n,l}$ renderà la funzione d'onda normalizzabile e non divergente. La risoluzione segue questa strategia:

1. Si risolve l'equazione (2.9) mantenendo k_{nl} come parametro grazie alla funzione di *Mathematica* chiamata **ParametricNDSolve**; si utilizzano come condizioni iniziali delle funzioni v_l relative al potenziale di Yukawa le stesse del problema coulombiano calcolate in precedenza. Si ottiene, così, la soluzione parametrica $v_l(k_{nl}, x)$ per il potenziale di Yukawa, la vera soluzione (non parametrica) si ottiene selezionando il $k_{n,l}$ corretto.
2. Si calcola, utilizzando la relazione $x = 2k_{nl}r$, la funzione d'onda radiale parametrica $R(k_{nl}, r) = (2k_{nl}r)^l \exp\{-k_{nl}r\}v_l(k_{nl}, 2k_{nl}r)$. Per il corretto valore di k_{nl} , essa sarà l'autofunzione radiale in presenza del potenziale di Yukawa.
3. Mediante la funzione **FindRoot** si trova il parametro k_{nl} che rende la funzione d'onda R nulla in un punto x_2 a piacimento: si sceglie x_2 il più lontano possibile dall'origine per riprodurre quanto meglio una funzione d'onda convergente.
4. Si ottiene la funzione d'onda radiale $R_{nl}(r)$ sostituendo nella funzione parametrica $R(k_{n,l}, r)$ il valore di $k_{n,l}$ ottenuto nel punto 3.
5. Il livello energetico dello stato legato (n, l) sarà dato da $E_{n,l}^{r_0} = -\frac{1}{2}k_{n,l}^2$

Capitolo 4

Risultati per lo spettro e le autofunzioni

4.1 Test: atomo d'idrogeno

Le funzioni d'onda dell'atomo d'idrogeno sono ricavabili analiticamente e sono state discusse in precedenza, ma possono essere integrate per verificare il funzionamento dell'integrazione numerica.

Il calcolo degli stati legati nel caso del potenziale coulombiano ha riprodotto i risultati aspettati, il calcolo è avvenuto cercando le energie che annullassero la funzione d'onda in $x_2 = 200$, si riportano gli autovalori relativi ai primi stati possibili ottenuti nella tabella che segue:

(n, l)	$-E_{n,l}^H$ calcolato	$-E_{n,l}^H$ atteso
(1, 0)	0.500 000 000 000 000 000 000 000	1/2
(2, 0)	0.125 000 000 000 000 000 000 000	1/8
(2, 1)	0.125 000 000 000 000 000 000 000	1/8
(3, 0)	0.055 555 555 555 555 555 555 546	1/18
(3, 1)	0.055 555 555 555 555 555 555 543	1/18
(3, 2)	0.055 555 555 556 397 919 181 147	1/18
(4, 0)	0.031 249 999 999 585 504 567 390	1/32
(4, 1)	0.031 249 999 999 738 946 441 001	1/32
(4, 2)	0.031 250 000 000 198 739 337 112	1/32
(4, 3)	0.031 250 000 003 939 366 987 051	1/32

Tabella 4.1. Autovalori del sistema atomo d'idrogeno ottenuti tramite calcolatore

Tali cifre corrispondono ai valori attesi per i livelli energetici dell'atomo d'idrogeno entro al massimo una parte su 10^{11} , dunque si ritiene l'individuazione dello spettro soddisfacente.

Ottenuto lo spettro, si possono quindi graficare le autofunzioni dell'atomo d'idrogeno, sovrapponendole, per conferma, alle autofunzioni note teoricamente.

A titolo d'esempio, si riportano le funzioni d'onda radiali dell'Idrogeno R_{20} ed R_{61} teoriche sovrapposte alle soluzioni numeriche.

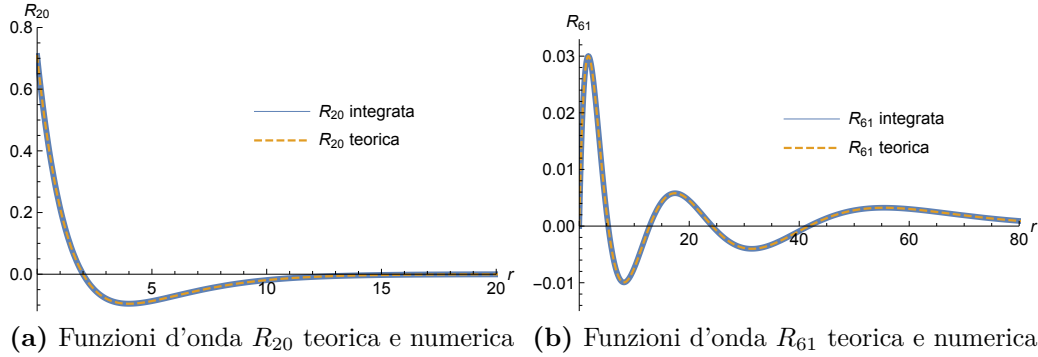


Figura 4.1. Funzioni d'onda R_{20} ed R_{61} in presenza di potenziale coulombiano

4.2 Autovalori e autofunzioni in presenza di potenziale di Yukawa

Si è proceduto, dunque, al calcolo descritto nel capitolo precedente: si riporta lo spettro elencando, per ogni stato (n, l) , i livelli energetici E_{nl} per diversi valori di r_0 : si utilizzano valori di r_0 che permettono di trovare una soluzione al problema, ovvero maggiori del valore critico per cui lo stato non sarebbe più legato.

Provando a ottenere una soluzione per raggi minori del raggio critico, si cerca un nodo di una funzione che, da un punto \bar{r} dipendente da (n, l) possiede segno fisso (perché divergente) e dunque il programma fallisce la risoluzione.

Si riporta, nella tabella seguente, il valore dell'energia di stato fondamentale per diversi valori possibili di r_0

Stato fondamentale $-E_{1,0}^{(r_0)}$			
$1/r_0$		$1/r_0$	
0.1	0.407 058 030 613 403 0	0.8	0.044 704 304 497 359 6
0.2	0.326 808 511 369 193 5	0.9	0.024 314 193 827 502 0
0.3	0.257 638 586 303 054 1	1	0.010 285 789 990 017 7
0.4	0.198 376 083 361 850 1	1.12	0.001 384 627 711 247 7
0.5	0.148 117 021 889 932 6	1.14	0.000 709 135 863 810 4
0.6	0.106 135 907 505 814 2	1.16	0.000 258 622 006 376 6
0.7	0.071 833 555 904 512 1	1.18	0.000 030 985 910 874 0
Stato fondamentale nel caso coulombiano: $-E_{1,0}^H = -0.5$			

Tabella 4.2. Valori dell'energia di stato fondamentale cambiati di segno

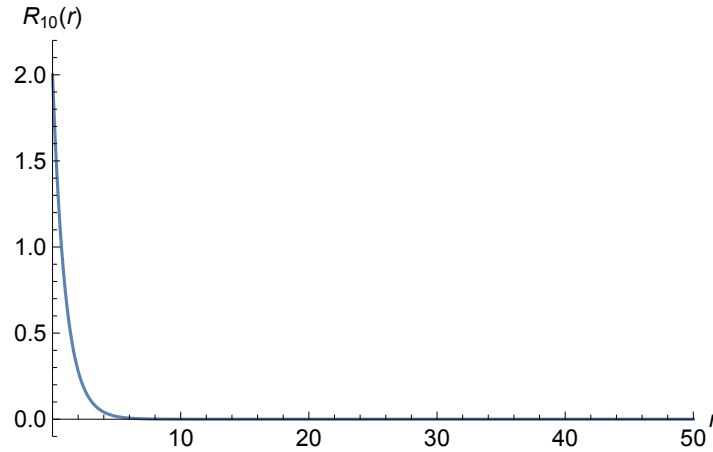


Figura 4.2. Funzione d'onda R_{10} per $r_0 = 5$

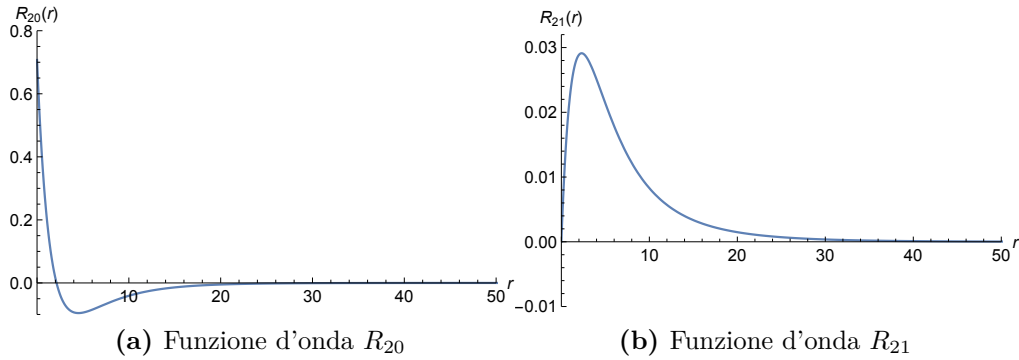
Per valori crescenti di r_0 , ci si aspetta che la perturbazione all'Hamiltoniana dell'atomo d'idrogeno (che scala al primo ordine come $1/r_0$) diventi sempre più trascurabile. A motivo di ciò, per r_0 crescente, l'energia $E_{1,0}^{(r_0)}$ dovrebbe approssimare l'energia di stato fondamentale dell'idrogeno $E_{1,0}^H = -0.5$; tale comportamento è rispecchiato dai valori riportati in tabella 4.2.

Con migliore precisione, all'aumentare di r_0 , l'energia $E_{1,0}^{(r_0)}$, è sempre meglio approssimata da $E_{1,0}^H - \frac{1}{r_0}$; tale approssimazione, ad esempio, vale per $r_0 = 5$ entro il 9%, mentre vale per $r_0 = 10$ entro il 2%.

I risultati ottenuti, inoltre, sono compatibili entro le prime sedici cifre decimali con i dati presentati nella referenza [8, pag.10, tabella II].

Si può ripetere il calcolo analogo allo stato fondamentale per gli stati con $n = 2$: si riportano i risultati nelle tabelle seguenti, utilizzando r_0 (anche diversi tra i due stati) appartenenti al range fisico permesso.

$1/r_0$	$-E_{2,0}$	$1/r_0$	$-E_{2,1}$
0.001	0.124 002 993 030 44	0.001	0.124 002 495 023 61
0.005	0.120 074 143 345 47	0.005	0.120 061 889 409 83
0.01	0.115 293 285 167 67	0.01	0.115 245 224 090 56
0.02	0.106 148 320 244 40	0.05	0.080 740 387 037 78
0.04	0.089 414 634 185 14	0.06	0.073 149 619 385 86
0.06	0.074 578 534 412 67	0.07	0.065 944 176 996 15
0.08	0.061 464 656 212 30	0.08	0.059 112 804 787 03
0.10	0.049 928 271 331 91	0.09	0.052 645 701 331 58
0.12	0.039 846 592 443 61	0.10	0.046 534 390 486 72
0.14	0.031 113 133 152 23	0.12	0.035 351 437 596 61
0.15	0.027 222 190 725 68	0.14	0.025 520 813 109 10
0.20	0.012 107 865 195 44	0.16	0.017 020 937 552 37
0.25	0.003 395 906 283 23	0.18	0.009 859 808 571 28
0.30	0.000 091 602 443 89	0.20	0.004 101 646 530 78

Tabella 4.3. Valori dell'energia per $n = 2$ **Figura 4.3.** Funzioni d'onda R_{20} ed R_{21} in presenza di potenziale di Yukawa con $r_0 = 5$

Notiamo che, come atteso, il potenziale di Yukawa rimuove la degenerazione coulombiana separando gli stati $(2, 0)$ e $(2, 1)$.

Una rappresentazione grafica della rimozione della degenerazione (e dell'innalzamento dei livelli energetici) da parte della perturbazione al potenziale coulombiano è rappresentata nella figura 4.4

Anche nel caso di $n = 2$, per r_0 crescente, l'energia $E_{2,l}^{(r_0)}$ si accosta con precisione sempre crescente al valore dell'energia perturbativo $E_2^H - \frac{1}{r_0} = -\frac{1}{2 \cdot 2^2} - \frac{1}{r_0}$:

- per $l = 0$ e $r_0 = 10, 100, 1000$, l'identità vale entro, rispettivamente, $\sim 99.7\%$, $\sim 0.25\%$, $\sim 0.0024\%$;
- per $l = 1$ e $r_0 = 10, 100, 1000$, l'identità vale entro, rispettivamente, $\sim 86\%$, $\sim 0.21\%$, $\sim 0.002\%$

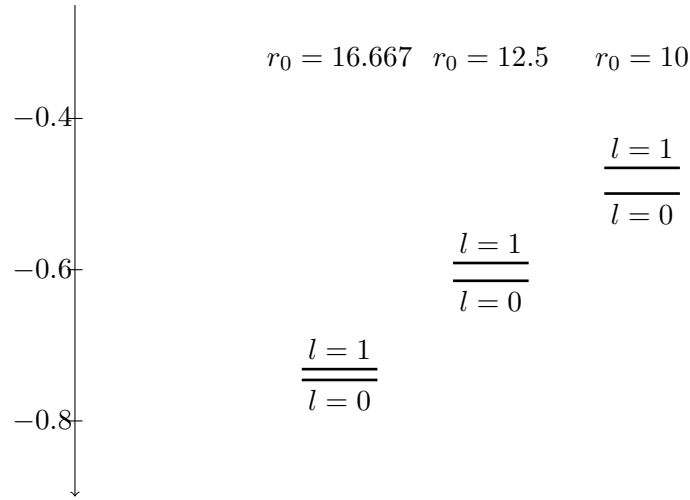


Figura 4.4. Parziale rimozione della degenerazione coulombiana a causa del potenziale di Yukawa per $n = 2$ ed $r_0 = 16.667, 12.5, 10$

I risultati ottenuti, inoltre, coincidono entro 12 cifre decimali con i risultati presentati in referenza [8, pag.11, tabella III].

Infine, si propongono i risultati per gli autovalori con $n = 3$

$1/r_0$	$-E_{3,0}$	$1/r_0$	$-E_{3,1}$
0.001	0.054 562 271 367 11	0.001	0.054 561 775 838 81
0.005	0.050 720 178 473 17	0.005	0.050 708 224 175 83
0.01	0.046 198 857 799 03	0.01	0.046 153 104 829 16
0.02	0.038 020 014 393 01	0.02	0.037 852 389 200 22
0.03	0.030 886 083 779 97	0.03	0.030 540 967 584 51
0.04	0.024 692 267 257 68	0.04	0.024 132 353 610 39
0.05	0.019 352 554 814 75	0.05	0.018 557 751 883 40
0.06	0.014 794 157 295 17	0.06	0.013 761 345 303 50
0.07	0.010 953 922 474 89	0.07	0.009 697 593 751 97
0.08	0.007 775 877 038 95	0.08	0.006 329 995 439 26
0.09	0.005 209 440 420 38	0.09	0.003 631 543 813 63
0.10	0.003 208 046 744 69	0.10	0.001 589 001 525 86
0.12	0.000 727 473 191 05		
0.13	0.000 165 431 777 93		

Tabella 4.4. Valori dell'energia per $n = 3, l = 0, 1$

$1/r_0$	$-E_{3,2}$
0.001	0.054 560 784 765 59
0.005	0.050 684 305 832 85
0.01	0.046 061 454 160 65
0.02	0.037 515 127 700 68
0.03	0.029 841 829 666 59
0.04	0.022 987 856 759 88
0.05	0.016 915 570 569 81
0.06	0.011 601 829 474 16
0.07	0.007 039 878 805 43
0.08	0.003 248 360 428 75

Tabella 4.5. Valori dell'energia per $n = 3$, $l = 2$

Anche in quest'ultimo caso considerato, si assiste alla rimozione della degenerazione coulombiana, come visibile nella figura (4.5):

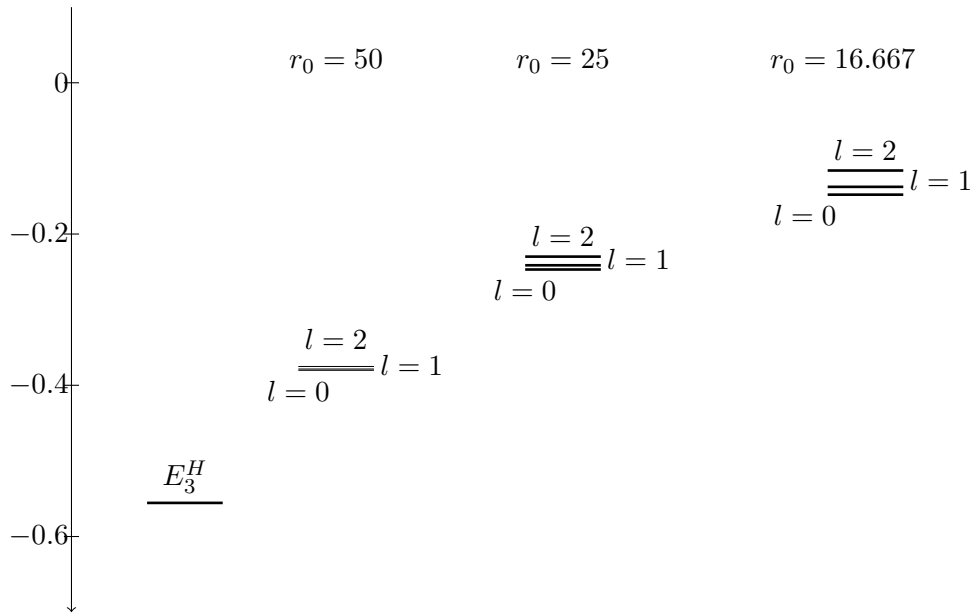


Figura 4.5. Parziale rimozione della degenerazione coulombiana a causa del potenziale di Yukawa per $n = 3$ ed $r_0 = 50, 25, 16.6667$

Si assiste ancora alla sempre migliore riproduzione, da parte dei livelli energetici, della stima perturbativa al primo ordine degli autovalori del sistema all'aumentare del raggio caratteristico del potenziale.

L'accordo con i risultati della tabella III di [8, pag.11] si attesta a 14 cifre decimali per gli autovalori con $l = 0, 1$ e con $l = 2$ fino a valori del raggio più vicini al raggio critico; per questi ultimi si è persa precisione ottenendo un accordo entro 10 cifre decimali (in questo caso una parte su 10^7).

Capitolo 5

Conclusioni

Nel presente lavoro si sono individuate le soluzioni analitiche per gli stati legati dell'atomo d'idrogeno a partire dal formalismo dei potenziali centrali, sfruttando la simmetria del sistema e studiando il problema radiale dell'equazione di Schrödinger.

Il problema dell'atomo d'idrogeno in presenza di potenziale Coulombiano può essere visto come caso semplificato di numerosi potenziali il cui problema di Schrödinger non è risolubile analiticamente.

Avendo come scopo ultimo l'individuazione di spettro e autofunzioni di un potenziale legato al potenziale coulombiano da una correzione al primo ordine (in questo caso il potenziale di Yukawa), si è elaborata una strategia di calcolo numerico che è stata testata sullo stesso potenziale coulombiano ottenendo risultati per lo spettro compatibili col valore teorico entro una parte su 10^{11} .

Individuato il potenziale di Yukawa come il potenziale d'interesse, si è proceduto al calcolo dello spettro e delle autofunzioni per numerosi valori del suo parametro caratteristico riconoscendo:

- la presenza di un range fisico per il parametro caratteristico r_0 che permette l'esistenza di un dato stato legato con numeri quantici (n, l) ;
- la rimozione dell'accidentale degenerazione coulombiana (dovuta alla simmetria di Lenz) a causa delle correzioni all'atomo d'idrogeno del potenziale in questione.

Si sono confrontati i risultati ottenuti per lo spettro con quelli dell'articolo [8], il confronto ha fornito una quasi completa corrispondenza dei valori con le peggiori compatibilità entro una parte su 10^7 .

In generale, il calcolo effettuato ha permesso l'elaborazione di un metodo di risoluzione numerica dell'equazione di Schrödinger in presenza di potenziali centrali opportunamente simili al potenziale coulombiano in modo tale da poter assegnare come condizioni iniziali delle funzioni d'onda le stesse delle autofunzioni dell'atomo d'idrogeno.

Appendice: codici utilizzati

Si riporta di seguito il codice utilizzato per individuare spettro e autofunzioni in presenza di potenziale coulombiano.

```
(*Reset*)
```

```
Quit
```

```
(*Cella per funzioni dell'idrogeno*)
```

```
(*Ci sono alcune sostituzioni:  $k=\sqrt{2|E|}$  e  $x=2kr$ *)
```

$$\text{Cnl}[k_]:= \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2*n*(n+l)!}} * ((2*k)^3)$$

```
(*Polinomi di Laguerre:*)
```

$$L[p_ , q_ , x_] := \sum_{s=0}^p \left((-1)^s * \frac{(p+q)!}{(p-s)! * (q+s)!} * \frac{(x)^s (s)!}{s!} \right)$$

$$vH[x_ , k_] := \text{Cnl}[k] * \text{LaguerreL}[n-l-1, 2*l+1, x]$$

```
(*Si decidono i numeri quantici e si calcolano le condizioni iniziali che  
saranno usate nella risoluzione dell'equazione nella cella seguente*)
```

```
n = 4
```

```
l = 3
```

```
v0 = vH[x, k] /. {x -> 0, k -> knl}
```

```
Dv0 = D[vH[x, k], x] /. {x -> 0, k -> knl}
```

(*Si risolve numericamente l'equazione differenziale parametrizzando su knl*)

```
wp = 24 (*Working precision*)
MS = 3 000 000
s = ParametricNDSolve[
  {
    v''[x] +  $\frac{(2 * l + 2 - x)}{x} * v'[x] - \left(l + 1 - \frac{1}{knl}\right) * \frac{v[x]}{x} == 0,$ 
    v[1 / 10 ^ 14] == v0 , v'[1 / 10 ^ 14] == Dv0},
  v, {x,  $\frac{1}{10 ^ 14}$ , 10 100}, {knl},
  WorkingPrecision → wp,
  MaxSteps → MS]
R[knl_][r_] := (2 * knl * r) ^ (l) * Exp[- knl * r] * v[knl][2 * knl * r] /. s
```

(*Si ottiene il knl che annulla R lontano dall'origine*)

```
sol = FindRoot[R[knl][100] /. s, {knl, 1 / 4},
  WorkingPrecision → wp,
  MaxIterations → MS]
Enl = -  $\frac{(knl /. sol) ^ 2}{2}$ 
```

(*Si plotta la funzione d'onda confrontando la funzione integrata con la funzione teorica*)

```
Needs["PlotLegends`"]

plot = Plot[
  {Evaluate[R[knl /. sol][r] /. s],
   Evaluate[Cnl[knl] * (2 * knl * r) ^ (l) * Exp[- knl * r] * LaguerreL[n - l - 1, 2 * l + 1, 2 * knl * r]]},
  {r, 0, 200}, PlotRange → {{0, 20}, {-0.12, 0.8}},
  PlotStyle → {{Opacity → 3, Thickness → 0.013}, {Dashed, Opacity → 3}},
  AxesLabel → {r, R20},
  LabelStyle → Directive[Medium],
  PlotLegends → {
    Placed[LineLegend[{"R20 integrata", "R20 teorica"}], {0.65, 0.65}]}
]
```

Infine, si riporta il codice utilizzato per il calcolo di spettro e stati legati in presenza di potenziale di Yukawa

```

(*Reset*)
Quit

(*Cella per funzioni dell'idrogeno*)
(*Ci sono alcune sostituzioni:  $k=\sqrt{2|E|}$  e  $x=2kr$ *)
Cnl[k_] :=  $\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2*n*(n+l)!}} * ((2*k)^3)$ 

(*Polinomi di Laguerre:*)
L[p_, q_, x_] :=  $\sum_{s=0}^p \left( (-1)^s * \frac{(p+q)!}{(p-s)!*(q+s)!} * \frac{(x)^s}{s!} \right)$ 

vH[x_, k_] := Cnl[k] * LaguerreL[n-l-1, 2*l+1, x]

(*Si sceglie il parametro di smorzamento di yukawa*)
alpha = 0.09

(*Si decidono i numeri quantici e si calcolano le condizioni iniziali che
saranno usate nella risoluzione dell'equazione nella cella seguente*)
n = 3
l = 2
v0 = vH[x, k] /. {x -> 0, k -> knl}
Dv0 = D[vH[x, k], x] /. {x -> 0, k -> knl}

(*Si risolve numericamente l'equazione differenziale parametrizzando su knl*)

wp = 24 (*Working precision*)
MS = 3000000
s = ParametricNDSolve[
{
v''[x] +  $\frac{(2*l+2-x)}{x} * v'[x] - \left( l+1 - \frac{1}{knl} * \text{Exp}\left[-\frac{x*alpha}{2*knl}\right] \right) * \frac{v[x]}{x} == 0,$ 
 $v\left[\frac{1}{10^{13}}\right] == v0,$   $v'\left[\frac{1}{10^{13}}\right] == Dv0,$ 
v, {x,  $\frac{1}{10^{13}}$ , 60100}, {knl},
WorkingPrecision -> wp,
MaxSteps -> MS
]
R[knl_][r_] :=  $(2*knl*r)^l * \text{Exp}[-knl*r] * v[knl][2*knl*r] /. s$ 

(*Si ottiene il knl che annulla R lontano dall'origine*)

sol = FindRoot[R[knl][30000] /. s, {knl, 0.0259020322},
WorkingPrecision -> wp,
MaxIterations -> MS]
Enl = -  $\frac{(knl /. sol)^2}{2}$ 

(*Si plotta la funzione R in funzione di r data dal knl calcolato sopra*)

plot = Plot[
Evaluate[R[knl /. sol][r]],
{r, 0, 200}, PlotRange -> {{0, 100}, {-0.0001, 0.001}},
AxesLabel -> {TraditionalForm[r], TraditionalForm[R10[r]]},
LabelStyle -> {Medium}]

```

Bibliografia

- [1] Hideki Yukawa, On the Interaction of Elementary Particles. I, Progress of Theoretical Physics Supplement, Volume 1, January 1955; <https://doi.org/10.1143/PTPS.1.1>
- [2] Yang-Zheng Lin, Yi-Gui Li, Ji-Ding Li, *Study on multi-Yukawa potential between charged colloid particles*, Journal of Molecular Liquids, Volume 125, Issue 1, 2006; <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0167732205001674>
- [3] C. Henning et al. (2006); <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.74.056403>
- [4] H. Kählert and M. Bonitz (2010); <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.82.036407>
- [5] H. Totsuji, T. Kishimoto, C. Totsuji and T. Sasabe (1998); <https://journals.aps.org/pre/abstract/10.1103/PhysRevE.58.7831>
- [6] Messiah, Albert (1999). *Quantum Mechanics*. New York: Dover. p. 1136.
- [7] Müller-Kirsten, Harald J.W. (2012). *Introduction to Quantum Mechanics: Schrödinger equation and path integral* (2nd ed.). Singapore: World Scientific.
- [8] Del Valle, J. C., and Nader, D. J. (2018) J. Math. Phys. **59**, 102103 (2018); <https://doi.org/10.1063/1.5050621>