

## Lezione 12

# Problemi ad una dimensione

Equazione differenziale tipo Schrödinger.

Teorema del Wronskiano.

$$y'' + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V(x)]y = 0$$

$V(x)$  è reale e limitato inferiormente.

Definizione di **Wronskiano**

$$W(y_1, y_2) = y_1 y_2' - y_2 y_1'$$

Se  $y_1$  e  $y_2$  sono soluzione di

$$y_1'' + F_1(x)y_1 = 0 \quad ; \quad y_2'' + F_2(x)y_2 = 0 \quad (1)$$

$F_1(x)$  e  $F_2(x)$  sono continue.

Teorema

$$W(y_1, y_2) \Big|_a^b = \int_a^b [F_1(x) - F_2(x)] y_1 y_2 dx$$

Moltiplico in (1) la prima equazione per  $y_2$  e la seconda per  $y_1$  poi sottraggo.

$$y_2(y_1'' + F_1(x)y_1) - y_1(y_2'' + F_2(x)y_2) = 0$$

$$[F_1(x) - F_2(x)] y_1 y_2 = [y_1 y_2'' - y_2 y_1''] = \frac{d}{dx} W(y_1, y_2)$$

c.v.d.

Considero per l'equazione di Schrödinger

$$F_1(x) = \epsilon_1 - \mathcal{V}(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (E_1 - V(x)) ; \quad F_2(x) = \epsilon_2 - \mathcal{V}(x)$$

$$W(y_1, y_2) \Big|_a^b = \int_a^b [\epsilon_1 - \mathcal{V}(x) - \epsilon_2 + \mathcal{V}(x)] y_1 y_2 dx = (\epsilon_1 - \epsilon_2) \int_a^b y_1 y_2 dx$$

Se  $\epsilon_1 = \epsilon_2$

$$W(y_1, y_2) \Big|_a^b = 0 \quad ; \quad W(y_1, y_2) \text{ costante} \quad \forall x \quad -\infty \leq x \leq \infty$$

perché  $a$  e  $b$  sono arbitrari.

Se siamo nello spettro discreto

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_1(x) \rightarrow 0 \quad ; \quad \lim_{x \rightarrow \pm\infty} \psi_2(x) \rightarrow 0$$

quindi

$$W(\psi_1, \psi_2) = \psi_1(x)\psi_2'(x) - \psi_2(x)\psi_1'(x) = 0$$

$$\frac{\psi_1(x)}{\psi_1'(x)} = \frac{\psi_2(x)}{\psi_2'(x)} \quad ; \quad \frac{d}{dx} [\ln(\psi_1)] = \frac{d}{dx} [\ln(\psi_2)]$$

$$\ln(\psi_1) = \ln(\psi_2) + \mathcal{K} \quad ; \quad \psi_1 = \psi_2 e^{\mathcal{K}}$$

$\mathcal{K}$  costante.  $\psi_1$  e  $\psi_2$  rappresentano lo stesso stato.

*Lo spettro discreto di sistema 1D NON è degenere*

## Nodi ed energie.

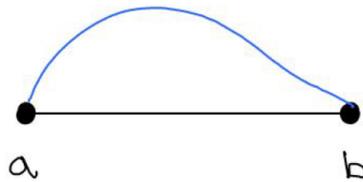
Ordiniamo le soluzioni secondo il valore delle energie.

$$E_0 < E_1 \cdots E_n < E_{n+1} \quad \text{con } \psi_0, \psi_1, \dots, \psi_n, \psi_{n+1}$$

Il numero dei nodi è legato all'indice.

Consideriamo due soluzioni con  $E_n$  e  $E_{n+1}$ .

$$W(\psi_n, \psi_{n+1}) \Big|_a^b = (\epsilon_n - \epsilon_{n+1}) \int_a^b \psi_n(x) \psi_{n+1}(x) dx$$



Consideriamo  $a$  e  $b$  come due punti dove  $\psi_n(a) = \psi_n(b) = 0$ .

$$W(\psi_n, \psi_{n+1}) \Big|_a^b = -\psi_{n+1}(b)\psi_n'(b) + \psi_{n+1}(a)\psi_n'(a) = (\epsilon_n - \epsilon_{n+1}) \int_a^b \psi_n(x) \psi_{n+1}(x) dx$$

Nell'intervallo  $[a, b]$   $\psi_n(x)$  ha segno costante.

Ad esempio se  $\psi_n > 0$  allora  $\psi_n'(a) \geq 0$  e  $\psi_n'(b) \leq 0$ .

Di conseguenza  $\psi_{n+1}$  deve cambiare di segno, altrimenti i due membri dell'equazione avrebbero segno differente.

Ad esempio, supponiamo che  $\psi_{n+1} > 0$  in tutto l'intervallo. Il termine destro è negativo perché  $(\epsilon_n - \epsilon_{n+1}) < 0$  e l'integrale è  $> 0$ .

La parte sinistra  $\psi'_n(b) \leq 0$  e  $\psi'_n(a) \geq 0$  quindi è  $> 0$ .

Dividendo il dominio in intervalli possiamo applicare il ragionamento ad ogni intervallo.

# Soluzioni per potenziali costanti a tratti

Equazione generale

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x)$$

Per potenziale costante  $V(x) \equiv V$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V) \psi(x) = 0$$

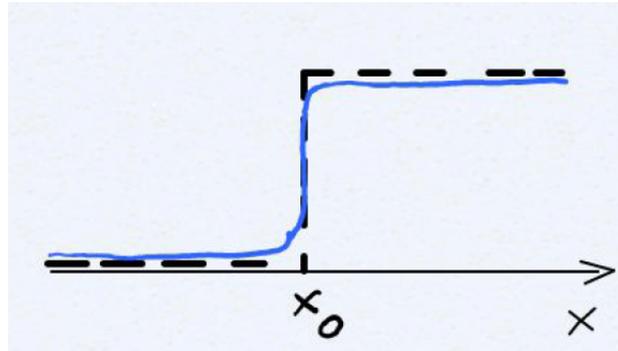
1)  $E > V$  definisco  $k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (E - V)$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x) \quad (\text{H.O.}) \quad \psi(x) = A e^{ikx} + A' e^{-ikx}$$

2)  $E < V$  definisco  $\rho^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2} (V - E)$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \rho^2 \psi(x) \quad ; \quad \psi(x) = A e^{\rho x} + A' e^{-\rho x}$$

## Punto di discontinuità



Supponiamo di lavorare con un potenziale continuo  $V_\epsilon(x)$  che differisce da  $V(x)$ , discontinuo, solo nell'intervallo  $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ .

$V_\epsilon(x)$  è sempre limitato nell'intervallo  $[x_0 - \epsilon, x_0 + \epsilon]$ .

L'equazione di Schrödinger è:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_\epsilon(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_\epsilon(x))\psi_\epsilon(x) = 0$$

Nel limite per  $\epsilon \rightarrow 0$  la funzione  $\psi_\epsilon(x)$  tende ad una funzione  $\psi(x)$  continua e derivabile in  $x_0$ .

$\psi_\epsilon(x)$  è limitata nell'intervallo attorno a  $x_0$ , per le proprietà delle equazioni differenziali.

Integro l'equazione di Schrödinger in un intervallo  $\Delta\eta$  attorno a  $x_0$ .

$$\left. \frac{d}{dx} \psi_\epsilon(x) \right|_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} = \int_{x_0-\eta}^{x_0+\eta} dx \frac{2m}{\hbar^2} (V_\epsilon(x) - E) \psi_\epsilon(x)$$

Doppio limite.

a)  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0}$  che produce il potenziale discontinuo  $V(x)$  che comunque è limitato.

b)  $\lim_{\eta \rightarrow 0}$  che annulla l'integrale dato che l'integrando è finito.

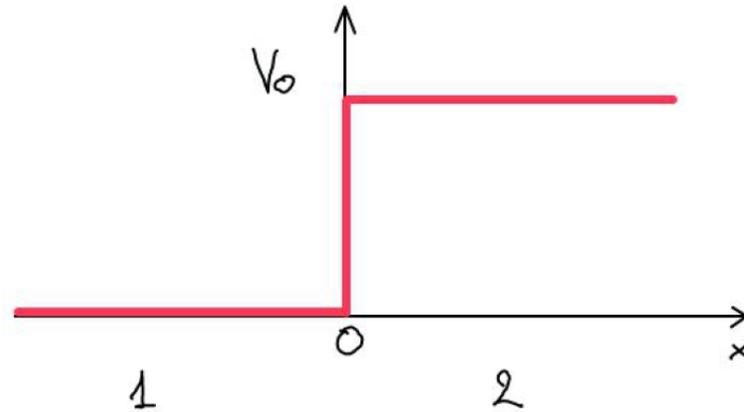
$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left[ \left. \frac{d}{dx} \psi_\epsilon(x) \right|_{x=x_0+\eta} - \left. \frac{d}{dx} \psi_\epsilon(x) \right|_{x=x_0-\eta} \right] \longrightarrow 0$$

La derivata prima di  $\psi(x)$  è continua in  $x_0$ , e anche  $\psi(x)$  come integrale di una funzione continua.

È essenziale che  $V_\epsilon$  sia limitato in tutto l'intervallo.

Nel caso il potenziale tenda all'infinito non c'è continuità della funzione e della sua derivata.

# Gradino di potenziale



$$V(x) = 0 \text{ per } x < 0, \quad V(x) = V_0 \text{ per } x > 0$$

## A) Caso $E > V_0$

Definisco

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad ; \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 1}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \quad \text{zona 2}$$

Ci sono 4 costanti e 2 condizioni al contorno: continuità di  $\psi$  e  $\psi'$  nel punto  $x = 0$ .

Il problema è stazionario. Bisogna pensare ad una soluzione dipendente dal tempo che moltiplica la funzione d'onda per  $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$ .

Direzione del flusso di corrente.

La corrente è definita come

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^* \right)$$

Il segno è importante per soddisfare l'equazione di continuità

$$\frac{d}{dt} \rho + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0$$

Soluzione  $\psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m} \left[ e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (i\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} (-i\mathbf{k}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \right] = \frac{\hbar}{m} \mathbf{k}$$

Il flusso di corrente ha la stessa direzione di  $\mathbf{k}$ .

Per  $\psi(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$  il risultato ha segno opposto. Il flusso ha direzione opposta a  $\mathbf{k}$ .

Nel caso in esame, il termine  $e^{-ik_2x}$  rappresenta un'onda che proviene da  $x \rightarrow +\infty$  e si propaga verso  $x \rightarrow -\infty$ .

Ipotizzo che il flusso di particelle provenga solo da  $x \rightarrow -\infty$ , quindi pongo  $A'_2 = 0$ . Adesso le condizioni da imporre nel punto di discontinuità fissano 2 costanti, e la terza è definita dalla normalizzazione della funzione d'onda.

Impongo le condizioni di continuità della funzione e della sua derivata nel punto di discontinuità.

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \implies A_1 + A'_1 = A_2$$

$$\psi'_1(x) \Big|_{x=0} = \psi'_2(x) \Big|_{x=0} \implies k_1(A_1 - A'_1) = k_2 A_2$$

Quindi utilizzando  $A_2$  dalla prima equazione

$$k_1(A_1 - A'_1) = k_2(A_1 + A'_1) \ ; \ A_1(k_1 - k_2) = A'_1(k_1 + k_2) \ ; \ A'_1 = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} A_1$$

$$A_2 = \left(1 + \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right) A_1 = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} A_1$$

Il termine  $e^{ik_1x}$  rappresenta un'onda proveniente da  $x \rightarrow -\infty$  con momento  $p_1 = \hbar k_1$ .

Il termine  $e^{-ik_1x}$  rappresenta un'onda riflessa con momento  $|p_1| = \hbar|k_1|$ .

Il termine  $e^{ik_2x}$  rappresenta un'onda trasmessa con momento  $p_2 = \hbar k_2$ .

Calcolo la corrente nella zona 1.

$$\begin{aligned} J_1(x) &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[ (A_1^* e^{-ik_1x} + A_1'^* e^{+ik_1x}) ik_1 (A_1 e^{+ik_1x} - A_1' e^{-ik_1x}) \right. \\ &\quad \left. - (A_1 e^{+ik_1x} + A_1' e^{-ik_1x}) ik_1 (-A_1^* e^{-ik_1x} + A_1'^* e^{+ik_1x}) \right] \\ &= -\frac{i\hbar}{2m} \left[ ik_1 (|A_1|^2 - A_1^* A_1' e^{-2ik_1x} + A_1'^* A_1 e^{+2ik_1x} - |A_1'|^2 \right. \\ &\quad \left. + |A_1|^2 - A_1 A_1'^* e^{+2ik_1x} + A_1' A_1^* e^{-2ik_1x} - |A_1'|^2) \right] = \frac{\hbar}{m} k_1 (|A_1|^2 - |A_1'|^2) \end{aligned}$$

$J_1$  ha due componenti, una incidente, con ampiezza legata ad  $|A_1|^2$ , ed una riflessa, con ampiezza legata ad  $|A'_1|^2$ .

Il coefficiente di riflessione è dato dal loro rapporto.

$$R = \frac{J_R}{J_I} = \frac{|A'_1|^2}{|A_1|^2} = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

Un calcolo analogo al precedente porta al risultato per la corrente nella zona 2:

$$J_2(x) = \frac{\hbar}{m} k_2 |A_2|^2$$

Il coefficiente di trasmissione è dato da

$$T = \frac{J_2}{J_I} = \frac{k_2 |A_2|^2}{k_1 |A_1|^2} = \frac{k_2}{k_1} \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2}$$

$$T + R = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2 + \frac{k_2}{k_1} \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{k_2^2 + k_1^2 - 2k_1k_2 + 4k_1k_2}{(k_1 + k_2)^2} = 1$$

## B) Caso $E < V_0$

Definisco

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E \quad ; \quad \rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E) \quad ; \quad \rho_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 1}$$

$$\psi_2(x) = B_2 e^{\rho_2 x} + B'_2 e^{-\rho_2 x} \quad \text{zona 2}$$

La soluzione deve rimanere limitata anche per  $x \rightarrow \infty$ , quindi  $B_2 = 0$ .

Per le altre costanti si procede come prima. In realtà basta sostituire  $k_2$  con  $i\rho_2$ .

$$A'_1 = \frac{k_1 - i\rho_2}{k_1 + i\rho_2} A_1 \quad ; \quad B'_2 = \frac{2k_1}{k_1 + i\rho_2} A_1$$

Il coefficiente di riflessione

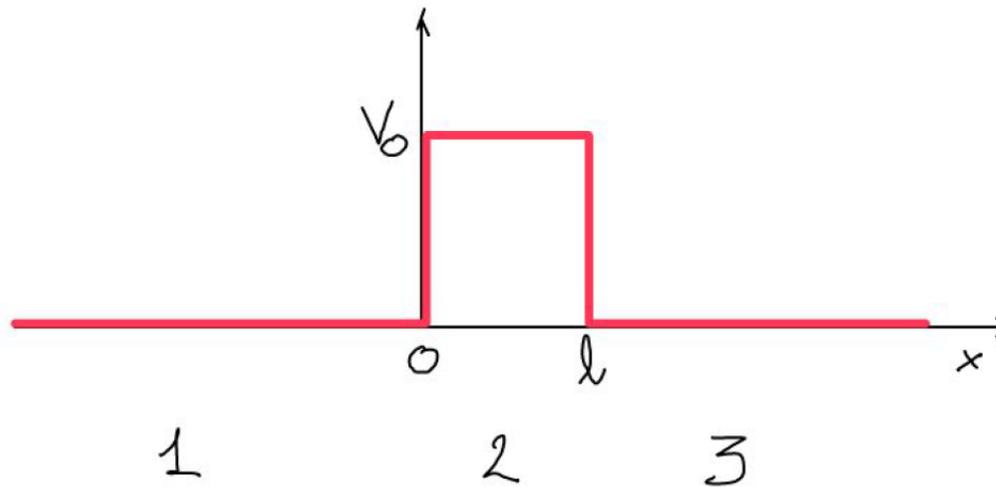
$$R = \frac{|A'_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - i\rho_2)(k_1 + i\rho_2)}{(k_1 + i\rho_2)(k_1 - i\rho_2)} = 1$$

La corrente nella zona 2.

$$J_2(x) = \frac{-i\hbar}{2m} \left[ B_2'^* e^{-\rho_2 x} \frac{d}{dx} B_2' e^{-\rho_2 x} - B_2' e^{-\rho_2 x} \frac{d}{dx} B_2'^* e^{-\rho_2 x} \right] = 0$$

Il coefficiente di trasmissione  $T = 0$ .

# Barriera di potenziale



$$V(x) = 0 \text{ per } x < 0, V(x) = V_0 \text{ per } 0 < x < l, V(x) = 0 \text{ per } x > l,$$

A) Caso  $E > V_0$

Definisco

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad ; \quad k_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 1}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ik_2 x} + A'_2 e^{-ik_2 x} \quad \text{zona 2}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 3}$$

Anche qui poniamo  $A'_3 = 0$ .

Ci sono 5 costanti e 4 condizioni al contorno.

Esprimiamo tutto in funzione di  $A_3$ . In  $x = 0$  si ottiene:

$$A_1 + A'_1 = A_2 + A'_2 \quad ;$$

$$k_1(A_1 - A'_1) = k_2(A_2 - A'_2)$$

In  $x = l$  si ottiene:

$$A_2 e^{ik_2 l} + A'_2 e^{-ik_2 l} = A_3 e^{ik_1 l}$$

$$ik_2(A_2 e^{ik_2 l} - A'_2 e^{-ik_2 l}) = ik_3 A_3 e^{ik_1 l}$$

Sviluppando i calcoli si ottiene:

$$A_2 = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1 - k_2)l} A_3$$

$$A'_2 = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{k_1}{k_2} \right) e^{i(k_1 + k_2)l} A_3$$

$$A_1 = \left[ \cos(k_2 l) - i \frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2} \sin(k_2 l) \right] e^{ik_1 l} A_3$$

$$A'_1 = \left[ i \frac{k_2^2 - k_1^2}{2k_1 k_2} \sin(k_2 l) \right] e^{ik_1 l} A_3$$

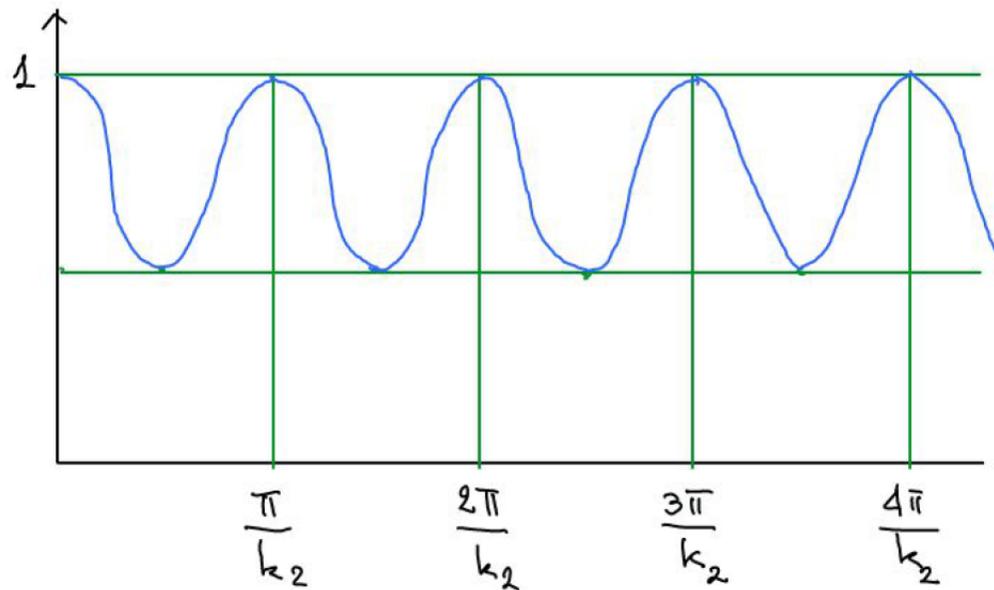
Il coefficiente di riflessione è

$$R = \frac{|A'_1|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)}$$

Il coefficiente di trasmissione è

$$T = \frac{|A_3|^2}{|A_1|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{4k_1^2 k_2^2 + (k_1^2 - k_2^2)^2 \sin^2(k_2 l)}$$

Si vede immediatamente che  $T + R = 1$ .



Sostituendo la definizione di  $k_1$  e  $k_2$  si ha che

$$T = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2 \sin^2 \left[ \sqrt{2m(E - V_0)} \frac{l}{\hbar} \right]}$$

Al variare di  $l$  il coefficiente  $T$  varia tra 1 e il valore minimo

$$T_{\min} = \frac{4E(E - V_0)}{4E(E - V_0) + V_0^2}$$

Nella regione 2 la lunghezza d'onda si allarga  $k_2 < k_1$  quindi  $\lambda_2 = \frac{1}{k_2} > \lambda_1 = \frac{1}{k_1}$ .

## B) Caso $E < V_0$

Effetto tunnel. Definisco

$$k_1^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad ; \quad \rho_2^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)$$

$$\psi_1(x) = A_1 e^{ik_1 x} + A'_1 e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 1}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{\rho_2 x} + A'_2 e^{-\rho_2 x} \quad \text{zona 2}$$

$$\psi_3(x) = A_3 e^{ik_1 x} + A'_3 e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 3}$$

Anche in questo caso è possibile sostituire  $k_2$  con  $i\rho_2$ .

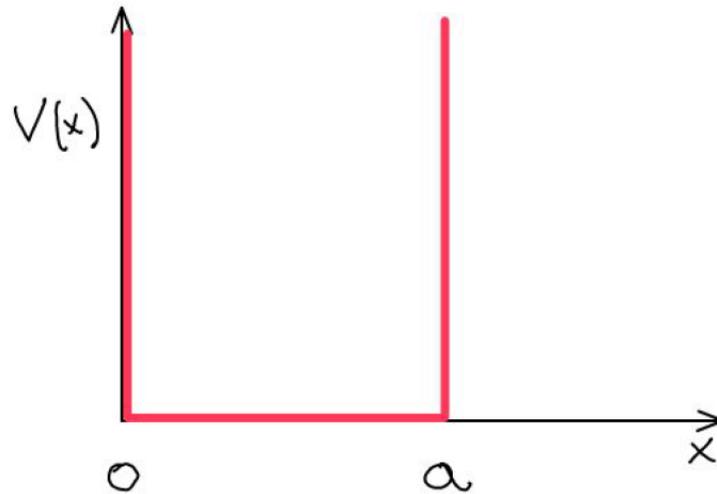
Il coefficiente di trasmissione è:

$$\begin{aligned} T = \frac{J_3}{J_I} &= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \sinh^2(\rho_2 l)} \\ &= \frac{4E(V_0 - E)}{4E(V_0 - E) + V_0^2 \left[ \frac{1}{2}(e^{\rho_2 l} - e^{-\rho_2 l}) \right]^2} \end{aligned}$$

Per  $\rho_2 l \gg 1$

$$T \simeq \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2 \left( \frac{1}{2} e^{\rho_2 l} \right)^2} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2\rho_2 l} \neq 0$$

# Buca di potenziale infinita



$$V(x) = 0 \text{ per } x < a, \quad V(x) = \infty \text{ per } x > a$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Condizioni al contorno  $\psi(0) = 0$  e  $\psi(a) = 0$ .

Due modi di giustificare.

a) Si può considerare  $V(a)$  finito e poi prendere il limite  $V(a) \rightarrow \infty$ .

b) L'eq. di Schrödinger ha significato fisico in ogni punto dello spazio, quindi  $V\psi$  è sempre finito. Se  $V(a) \rightarrow \infty$  allora  $\psi(a) \rightarrow 0$ .

Per  $0 \leq x \leq a$

$$\psi(x) = Ae^{ik_1x} + A'e^{-ik_1x} = 2iA \sin(kx)$$

$$\psi(0) = A + A' = 0 \implies A = -A'$$

$$\psi(a) = 2iA \sin(ka) = 0 \implies k = \frac{n\pi}{a} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, 4$$

Normalizzazione

$$\begin{aligned} \int_0^a \psi^*(x)\psi(x)dx &= 4A^2 \int_0^a \sin^2(kx)dx = \frac{4A^2}{k} \int_0^{ka} \sin^2(y)dy = 1 \\ &= \frac{4A^2}{k} \left[ -\frac{1}{2} \sin(y) \cos(y) + \frac{y}{2} \right]_0^{n\pi} = \frac{4A^2}{n\pi/a} \frac{n\pi}{2} = 1 \end{aligned}$$

$A = \sqrt{\frac{1}{2a}}$  quindi

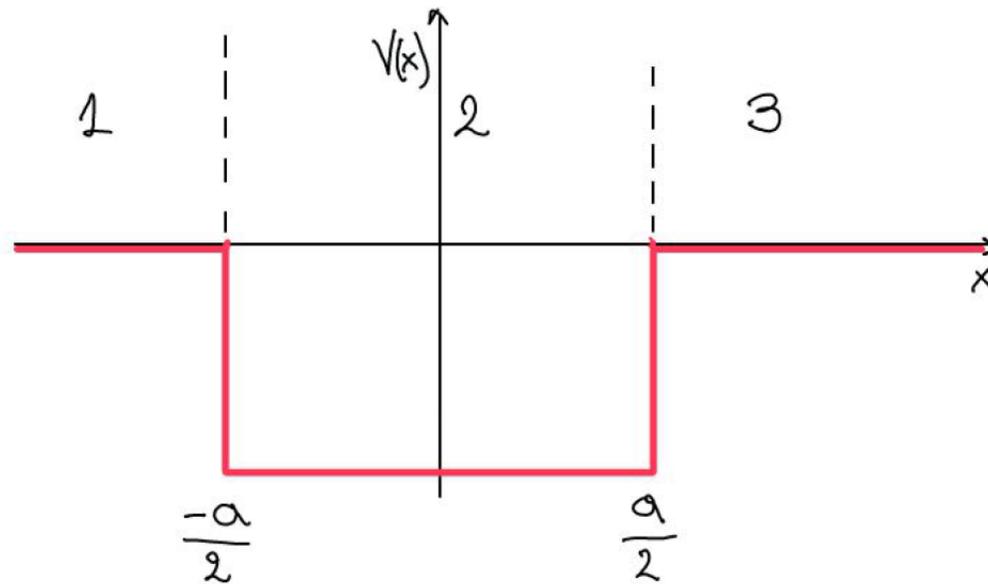
$$\psi(x) = i\sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \quad \text{per } 0 < x < a$$

$$\psi(x) = 0 \quad \text{per } x \geq a$$

$$\psi(0) = 0$$

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{n^2\pi^2}{a^2}$$

# Buca di potenziale finita



$$V(x) = 0 \text{ per } x < -\frac{a}{2}, \quad V(x) = -V_0 \text{ per } -\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}, \quad V(x) = 0 \text{ per } x > \frac{a}{2}$$

A) Caso  $E > 0$

Analogo alla barriera di potenziale

B) Caso  $-V_0 < E < 0$

Definisco

$$\rho = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0 \quad ; \quad k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}$$

Equazione di Schrödinger nelle zone 1 e 3

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad ; \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} E\psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} |E| \psi(x)$$

Equazione di Schrödinger nella zona 2.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) - V_0 \psi(x) = E\psi(x) \quad ; \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2} (E + V_0) \psi(x)$$

$E < 0$ ,  $V_0 > 0$  e  $E + V_0 > 0$ .

$$\psi_1(x) = B_1 e^{\rho x} + B'_1 e^{-\rho x} \quad \text{zona 1}$$

$$\psi_2(x) = A_2 e^{ikx} + A'_2 e^{-ikx} \quad \text{zona 2}$$

$$\psi_3(x) = B_3 e^{\rho x} + B'_3 e^{-\rho x} \quad \text{zona 3}$$

Perché la funzione d'onda sia limitata  $B'_1 = B_3 = 0$ .

Condizioni al contorno in  $x = -a/2$ .

$$\psi_1\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi_2\left(-\frac{a}{2}\right) \quad ; \quad \psi_1'\left(-\frac{a}{2}\right) = \psi_2'\left(-\frac{a}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} B_1 e^{-\rho \frac{a}{2}} &= A_2 e^{-ik \frac{a}{2}} + A_2' e^{ik \frac{a}{2}} \\ \rho B_1 e^{-\rho \frac{a}{2}} &= ik A_2 e^{-ik \frac{a}{2}} - ik A_2' e^{ik \frac{a}{2}} \end{aligned}$$

Ricavando  $A_2$  dalla prima equazione ed inserendolo nella seconda ottengo

$$\begin{aligned} A_2' &= -\frac{\rho - ik}{2ik} B_1 e^{-(\rho + ik) \frac{a}{2}} \\ A_2 &= \frac{\rho + ik}{2ik} B_1 e^{-(\rho + ik) \frac{a}{2}} \end{aligned}$$

Condizioni al contorno in  $x = a/2$ .

$$\psi_3\left(\frac{a}{2}\right) = \psi_2\left(\frac{a}{2}\right) \quad ; \quad \psi'_3\left(\frac{a}{2}\right) = \psi'_2\left(\frac{a}{2}\right)$$

$$\begin{aligned} A_2 e^{ik\frac{a}{2}} + A'_2 e^{-ik\frac{a}{2}} &= B'_3 e^{-\rho\frac{a}{2}} \\ ik \left[ A_2 e^{ik\frac{a}{2}} - A'_2 e^{-ik\frac{a}{2}} \right] &= -\rho B'_3 e^{-\rho\frac{a}{2}} \end{aligned}$$

Ricavo  $A_2$  dalla prima equazione e lo sostituisco nella seconda. Considero l'espressione di  $A'_2$  ottenuta per  $x = -a/2$ . Ottengo

$$B'_3 = -\frac{\rho - ik}{\rho + ik} B_1 e^{-ika}$$

Ripeto il calcolo ricavando prima  $A'_2$  e poi il resto. Ottengo

$$B'_3 = -\frac{\rho + ik}{\rho - ik} B_1 e^{ika}$$

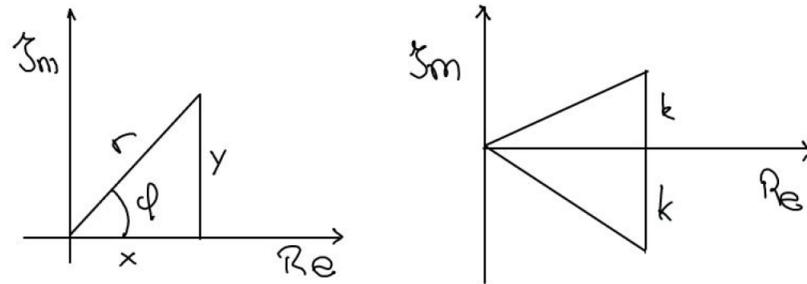
da cui

$$-\frac{\rho - ik}{\rho + ik} B_1 e^{-ika} = -\frac{\rho + ik}{\rho - ik} B_1 e^{ika} \implies e^{i2ka} = \left( \frac{\rho - ik}{\rho + ik} \right)^2 \equiv \xi$$

$|\xi| = 1$ . Prendo il logaritmo

$$2ika = \ln \xi + i2n\pi \quad \text{con } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Si può sempre moltiplicare a sinistra per un fattore  $e^{i2n\pi}$  a sinistra e l'equazione rimane valida.



Rappresentazione geometrica dei numeri complessi

$$a = x + iy = r \cos \phi + ir \sin \phi = re^{i\phi}$$

$r$  modulo,  $\phi$  argomento.

$$\ln a = \ln r + i\phi ; \quad r^2 = x^2 + y^2 ; \quad r = |a|$$

$$\ln \xi = \ln |\xi| + i \arg \xi = \ln |1| + i \arg \xi$$

$$\xi = \left( \frac{e^{i \arg(\rho - ik)}}{e^{i \arg(\rho + ik)}} \right)^2$$

dato che  $|\xi| = 1$

$$\arg(\rho - ik) = -\arg(\rho + ik)$$

quindi

$$\xi = e^{i4 \arg(\rho - ik)} \quad ; \quad \arg(\xi) = 4 \arg(\rho - ik) = -4 \arctan \left( \frac{k}{\rho} \right)$$

quindi

$$2ika = \ln \xi + i2n\pi = i \left[ -4 \arctan \left( \frac{k}{\rho} \right) \right] + i2n\pi$$

$$\arctan\left(\frac{x}{y}\right) = \arcsin\left(\frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}\right)$$

quindi

$$\arctan\left(\frac{k}{\rho}\right) = \arcsin\left(\frac{k}{\sqrt{\rho^2 + k^2}}\right)$$

Poiché

$$\frac{k}{\sqrt{\rho^2 + k^2}} = \frac{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}{\sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}E + \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}} = \sqrt{\frac{V_0 + E}{V_0}} \equiv y$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}y$$

$$2ka = -4\arcsin(y) + 2n$$

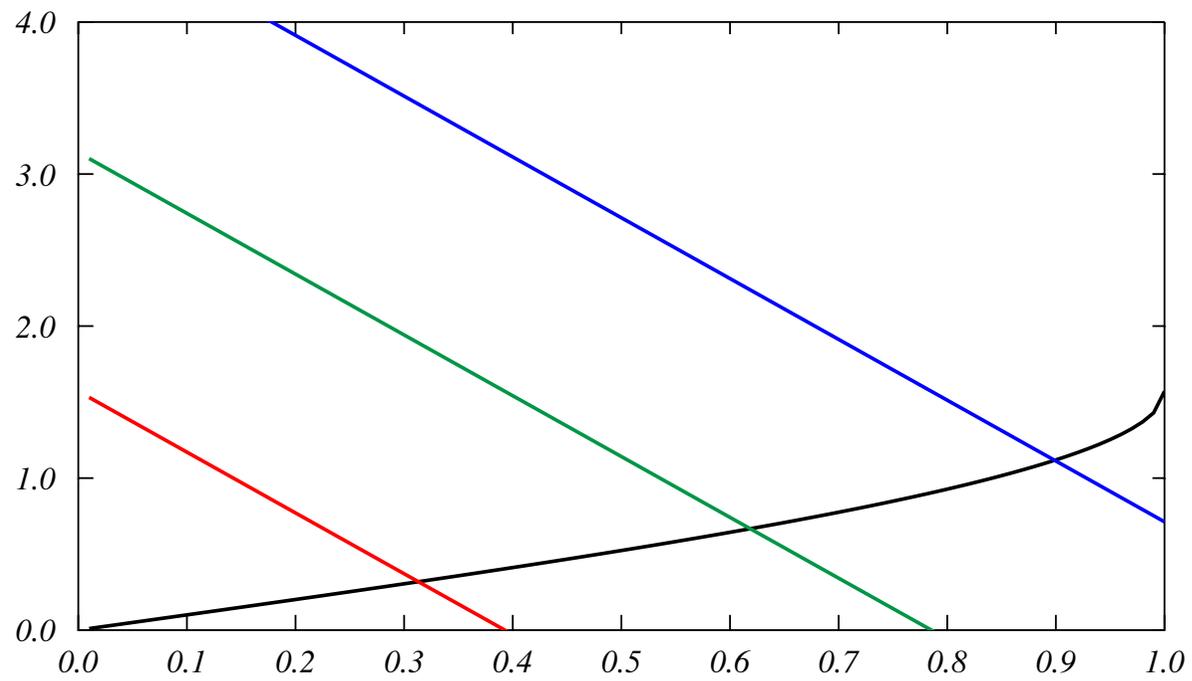
$$k\frac{a}{2} = -\arcsin(y) + n\frac{\pi}{2} = \frac{a}{2}y\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + E)}$$

Definisco

$$\Lambda(E) = \frac{a}{2} \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 + E)}$$

$$y\Lambda(E) = -\arcsin(y) + n\frac{\pi}{2} \quad ; \quad \arcsin(y) = n\frac{\pi}{2} - y\Lambda(E)$$

Le soluzioni sono ottenute dalle intersezioni della retta  $n\pi/2 - \Lambda y$  con la curva  $\arcsin(y)$ . Autovalori di energia discreti.



# Oscillatore armonico

Classicamente.

$$F = -Kx \quad ; \quad \omega = \sqrt{\frac{K}{m}} = 2\pi\nu \quad ; \quad H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2$$

Schrödinger

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad ; \quad \left[ \frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left( E - \frac{1}{2}m\omega^2x^2 \right) \right] = 0$$

Cambio variabile

$$x \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x = \alpha x \equiv \xi \quad ; \quad d\xi = \alpha dx \quad ; \quad \frac{1}{\alpha^2} = \frac{\hbar}{m\omega}$$

Divido l'equazione di Schrödinger per  $\alpha^2$

$$\frac{d^2}{\alpha^2 dx^2} + \left[ \frac{\hbar}{m\omega} \frac{2m}{\hbar^2} E - \frac{1}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} \frac{2m}{\hbar^2} m\omega^2 x^2 \right] \psi(\xi) = \left[ \frac{d^2}{d\xi^2} + \epsilon - \xi^2 \right] \psi(\xi) = 0$$

Con  $\epsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$

Cerco una soluzione del tipo

$$\psi(\xi) = e^{-\lambda\xi^2} v(\xi)$$

con  $\lambda > 0$  e  $v(\xi)$  che è circa costante per  $\xi \rightarrow \infty$  per avere una soluzione limitata.

$$\begin{aligned}\psi(\xi) &= e^{-\lambda\xi^2} v(\xi) \\ \psi'(\xi) &= (-2\lambda\xi)e^{-\lambda\xi^2} v(\xi) + e^{-\lambda\xi^2} v'(\xi) \\ \psi''(\xi) &= e^{-\lambda\xi^2} [4\lambda^2\xi^2 v(\xi) - 2\lambda v(\xi) - 4\xi\lambda v'(\xi) + v''(\xi)]\end{aligned}$$

Calcolo l'equazione per  $\xi \rightarrow \infty$ . Se ipotizzo che  $v'(\xi)$  e  $v''(\xi)$  tendano a zero in questo limite, posso trascurare vari termini nell'equazione precedente e quindi nel limite l'equazione di Schrödinger diventa

$$e^{-\lambda\xi^2} [4\lambda^2\xi^2 - 2\lambda + \epsilon - \xi^2] v(\xi) = e^{-\lambda\xi^2} [(4\lambda^2 - 1)\xi^2 - 2\lambda - \epsilon] v(\xi) = 0$$

Questo implica che il termine tra parentesi quadre sia  $=0$ .

Per rendere questo termine indipendente da  $\xi$  si deve avere  $4\lambda^2 - 1 = 0$  che implica  $\lambda = 1/2$ ,  $\lambda > 0$ .

Usando  $\lambda = 1/2$  nell'equazione di Schrödinger si ha

$$e^{-\lambda\xi^2} \left[ 4\lambda^2\xi^2v(\xi) - 2\lambda v(\xi) - 4\xi\lambda v'(\xi) + v''(\xi) + \epsilon v(\xi) - \xi^2v(\xi) \right] = 0$$

che implica

$$v''(\xi) - 2\xi v'(\xi) + (\epsilon - 1)v(\xi) = 0$$

Cerco una soluzione polinomiale.

$$v(\xi) = \sum_{r=0}^{\infty} a_r \xi^r \quad ; \quad v'(\xi) = \sum_{r=1}^{\infty} a_r r \xi^{r-1}$$

$$v''(\xi) = \sum_{r=2}^{\infty} a_r r(r-1) \xi^{r-2} = \sum_{r=0}^{\infty} a_{r+2} (r+2)(r+1) \xi^r$$

$$-2\xi v'(\xi) = -2 \sum_{r=0}^{\infty} a_r r \xi^r$$

poiché il termine  $r = 0$  è nullo.

L'equazione diventa

$$\sum_{r=0}^{\infty} \left[ (r+2)(r+1)a_{r+2} + (\epsilon - 1 - 2r)a_r \right] \xi^r = 0$$

Il termine tra parentesi è nullo quando

$$a_{r+2} = \frac{2r + 1 - \epsilon}{(r + 2)(r + 1)} a_r$$

Questa equazione mette in relazione un coefficiente con quello che lo precede di DUE posizioni.

Due soluzioni indipendenti sono:

$a_0 \neq 0$  insieme con  $a_1 = 0$  oppure

$a_0 = 0$  insieme con  $a_1 \neq 0$ . Qualunque soluzione può essere espressa come combinazione lineare di queste due.

La soluzione non diverge quando uno dei coefficienti  $a_{r+2} = 0$ . Tutti i coefficienti  $a_s$  con  $s > r + 2$  sono nulli.

Perché  $a_{r+2} = 0$  è necessario che

$$\epsilon_n = 2n + 1 ; \quad \frac{2E_n}{\hbar\omega} = 2n + 1 ; \quad E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Nello stato fondamentale, l'energia di punto zero è  $E_0 = \hbar\omega/2$ .

# AUTOSTATI

Per  $\epsilon_n = 2n + 1$  si ha

$$a_{r+2} = \frac{2(n-r)}{(r+2)(r+1)} a_r$$

Se  $r$  è pari soluzioni di potenze pari  $a_0 \neq 0$   $a_1 = 0$ .

Se  $r$  è dispari soluzioni di potenze dispari  $a_0 = 0$   $a_1 \neq 0$ .

Polinomi di Hermite

$$\frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} = (-1)^n H_n(\xi) e^{-\xi^2}$$

$$H_0 = 1 ; H_1 = 2\xi ; H_2 = -2 + 4\xi^2 ; H_3 = -12\xi + 8\xi^3$$

$$v_n(\xi) = \frac{1}{N_n} H_n(\xi)$$

$N_n$  costante di normalizzazione.

Normalizzazione

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\xi)|^2 \frac{1}{\alpha} d\xi = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \frac{1}{N_n^2} \int_{-\infty}^{\infty} H_n^2(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = 1$$

$$N^2 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} (2^n n!) \sqrt{\pi}$$

