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

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

$F_1(x)$ 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

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

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

Se $\epsilon_1 = \epsilon_2$

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

perché a e b sono arbitrari.

Se siamo nello spettro discreto

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

quindi

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

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

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

$\mathcal{K}$ costante. ψ_1 e ψ_2 rappresentano lo stesso stato.

Lo spettro discreto di sistema 1D NON è degenere

Nodi ed energie.

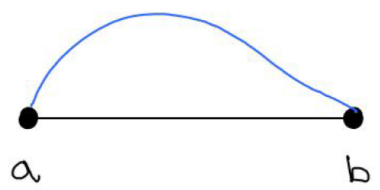
Ordiniamo le soluzioni secondo il valore delle energie.

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

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 ψ_{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 $V(x) \equiv V$

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

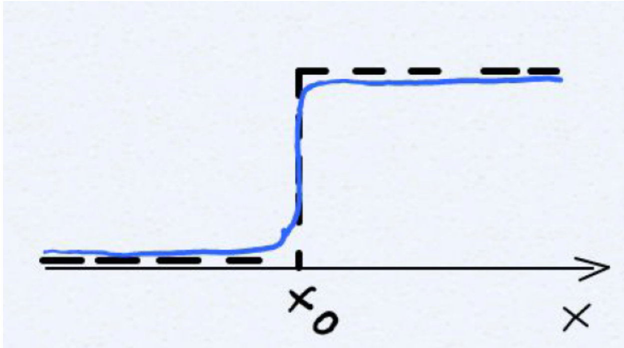
1) $E > V$ definisco $k^2 \equiv \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)$

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

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

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

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 $\epsilon \to 0$ 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.

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

Doppio limite.

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

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

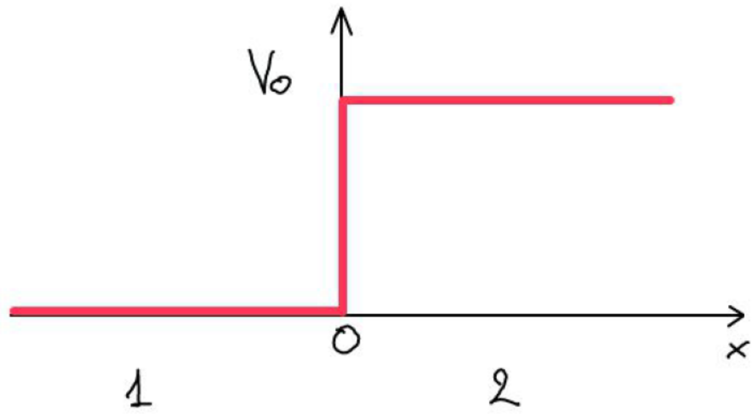
$$\lim_{\epsilon\to 0}\left[\frac{d}{dx}\psi_\epsilon(x)\Big|_{x=x_0+\eta} - \frac{d}{dx}\psi_\epsilon(x)\Big|_{x=x_0-\eta}\right] \longrightarrow 0$$

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_ϵ 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



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

A) Caso $E > V_0$

Definisco

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

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 1} \\ \psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad \text{zona 2} \end{aligned}$$

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

Il problema è stazionario. Bisogna pensare au 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 $x \to +\infty$ e si propaga verso $x \to -\infty$.
Ipotizzo che il flusso di particelle provenga solo da $x \to -\infty$, 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.

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \Longrightarrow A_1 + A_1' = A_2$$

$$\psi_1'(x)\Big|_{x=0} = \psi_2'(x)\Big|_{x=0} \Longrightarrow k_1(A_1 - A_1') = k_2 A_2$$

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 $e^{ik_1 x}$ rappresenta un'onda proveniente da $x \to -\infty$ con momento $p_1 = \hbar k_1$.
Il termine $e^{-ik_1 x}$ rappresenta un'onda riflessa con momento $p_1 = \hbar k_1$.
Il termine $e^{ik_2 x}$ rappresenta un'onda trasmessa con momento $p_2 = \hbar k_1$.

Calcolo la corrente nella zona 1.

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

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

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

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

B) Caso $E < V_0$

Definisco

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

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad \text{zona } 1 \\ \psi_2(x) &= B_2 e^{\rho_2 x} + B_2' e^{-\rho_2 x} \quad \text{zona } 2 \end{aligned}$$

La soluzione deve rimanere limitata anche per $x \to \infty$, 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

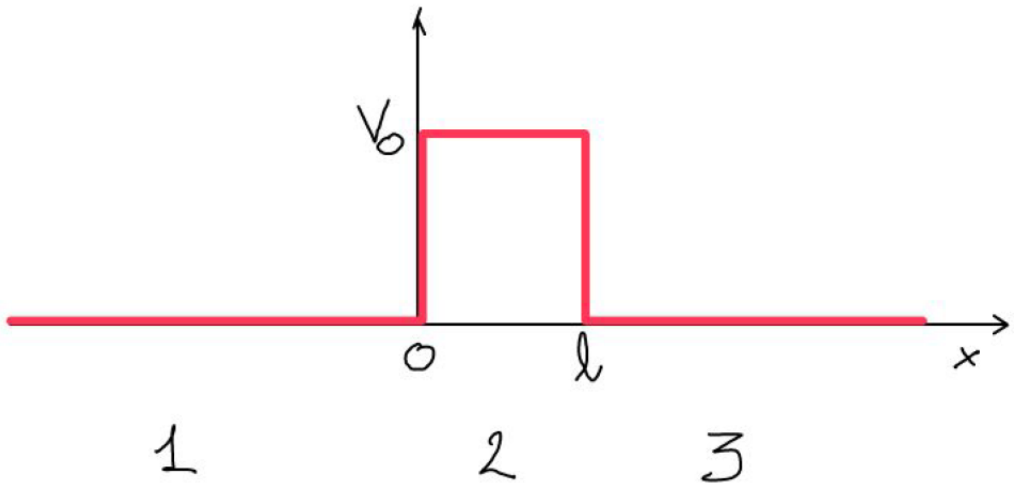
$$R = \frac{|A_1'|^2}{|A_1|^2} = \frac{(k_1 - i\rho_2)(k_1 + i\rho_2)}{(k_1 + i\rho_2)(k_1 - i\rho_2)} = 1$$

La corrente nella zona 2.

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

Il coefficiente di trasmissione $T = 0$.

Barriera di potenziale



$V(x) = 0$ per $x < 0$, $V(x) = V_0$ per $0 < x < l$, $V(x) = 0$ per $x > l$,

A) Caso $E > V_0$

Definisco

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

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 1} \\
\psi_2(x) &= A_2 e^{ik_2 x} + A_2' e^{-ik_2 x} \quad \text{zona 2} \\
\psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} \quad \text{zona 3}
\end{aligned}$$

Anche qui poniamo $A_3' = 0$.
Ci sono 5 costanti e 4 condizioni al contorno.
Esprimiamo tutto in funzione si 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:

$$\begin{aligned}
A_2 &= \frac{1}{2}\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1-k_2)l} A_3 \\
A_2' &= \frac{1}{2}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right) e^{i(k_1+k_2)l} A_3 \\
A_1 &= \left[\cos(k_2 l) - i\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin(k_2 l)\right] e^{ik_1 l} A_3 \\
A_1' &= \left[i\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin(k_2 l)\right] e^{ik_1 l} A_3
\end{aligned}$$

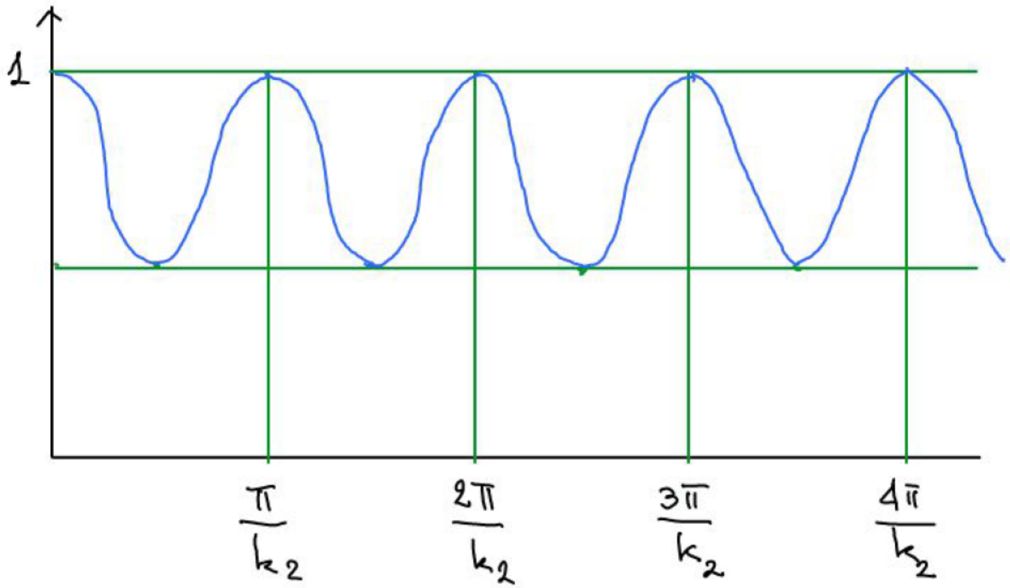
Il coefficiente di riflessione è

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

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 $T + R = 1$.



Sostuendo 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

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

Nella regione 2 la lunghezza d'onda si allarga $k_2 < k_1$ quindi $\lambda_2 = \frac{1}{k2} > \lambda_1 = \frac{1}{k1}$.

B) Caso $E < V_0$

Effetto tunnel. Definisco

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

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= A_1 e^{ik_1 x} + A_1' e^{-ik_1 x} && \text{zona } 1 \\
\psi_2(x) &= A_2 e^{\rho_2 x} + A_2' e^{-\rho_2 x} && \text{zona } 2 \\
\psi_3(x) &= A_3 e^{ik_1 x} + A_3' e^{-ik_1 x} && \text{zona } 3
\end{aligned}$$

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

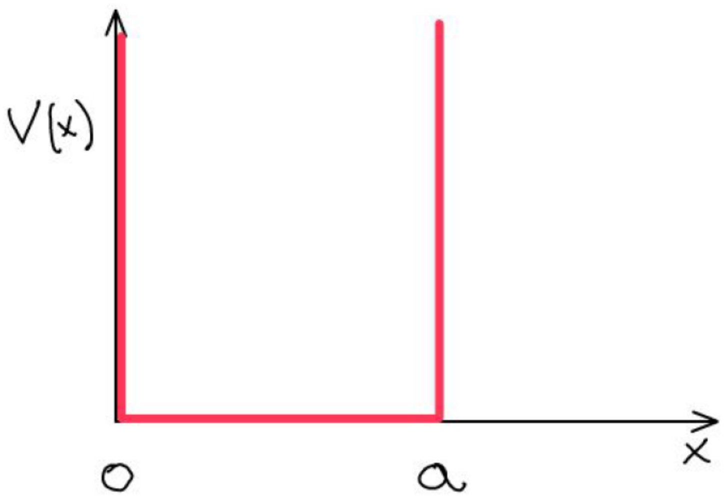
Il coefficiente di trasmissione è:

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

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



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

Per $0 \leq x \leq a$

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= Ae^{ik_1 x} + A' e^{-ik_1 x} = 2iA\sin(kx) \\
\psi(0) &= A + A' = 0 \Longrightarrow A = -A' \\
\psi(a) &= 2iA\sin(ka) = 0 \Longrightarrow k = \frac{n\pi}{a} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, 4
\end{aligned}
$$

Normalizzazione

$$
\int_0^a \psi^*(x)\psi(x)dx = 4A^2 \int_0^a \sin^2(kx)dx = \frac{4A^2}{k}\int_0^{ka} \sin^2(y)dy = 1
$$

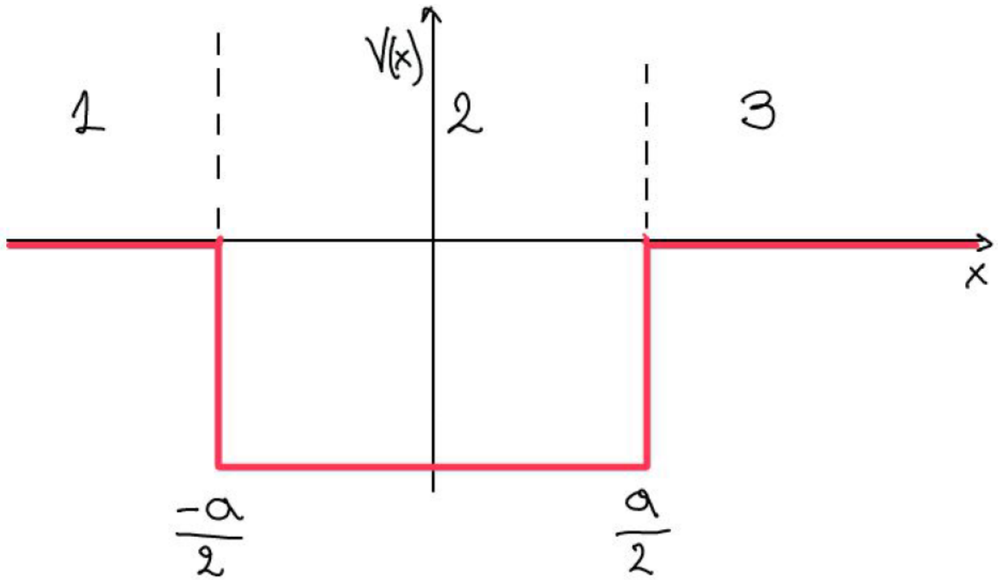
$$
= \frac{4A^2}{k}\left[-\frac{1}{2}\sin(y)\cos(y) + \frac{y}{2}\right]_0^{n\pi} = \frac{4A^2}{n\pi/a}\frac{n\pi}{2} = 1
$$

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

$$
\begin{aligned}
\psi(x) &= i\sqrt{\frac{2}{a}}\sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) && \text{per } 0 < x < a \\
\psi(x) &= 0 && \text{per } x \geq a \\
\psi(0) &= 0
\end{aligned}
$$

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

Buca di potenziale finita



$V(x) = 0$ per $x < -\frac{a}{2}$, $V(x) = -V_0$ per $-\frac{a}{2} < x < \frac{a}{2}$ $V(x) = 0$ 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 $E + V_0 > 0$.

$$\begin{aligned}
\psi_1(x) &= B_1 e^{\rho x} + B_1' e^{-\rho x} && \text{zona 1} \\
\psi_2(x) &= A_2 e^{ikx} + A_2' e^{-ikx} && \text{zona 2} \\
\psi_3(x) &= B_3 e^{\rho x} + B_3' e^{-\rho x} && \text{zona 3}
\end{aligned}$$

Perché la funzione d'onda sia limitata $B_1' = B_3 = 0$.

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

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

$$\begin{aligned} B_1 e^{-\rho\frac{a}{2}} &= A_2 e^{-ik\frac{a}{2}} + A_2' e^{ik\frac{a}{2}} \\ \rho B_1 e^{-\rho\frac{a}{2}} &= ikA_2 e^{-ik\frac{a}{2}} - ikA_2' e^{ik\frac{a}{2}} \end{aligned}$$

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 $x = a/2$.

$$\psi_3\Big(\frac{a}{2}\Big) = \psi_2\Big(\frac{a}{2}\Big) \quad ; \quad \psi_3'\Big(\frac{a}{2}\Big) = \psi_2'\Big(\frac{a}{2}\Big)$$

$$\begin{aligned} A_2 e^{ik\frac{a}{2}} + A_2' e^{-ik\frac{a}{2}} &= B_3' e^{-\rho\frac{a}{2}} \\ ik\left[A_2 e^{ik\frac{a}{2}} - A_2' e^{-ik\frac{a}{2}}\right] &= -\rho B_3' e^{-\rho\frac{a}{2}} \end{aligned}$$

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

$$B_3' = -\frac{\rho + ik}{\rho - ik} B_1 e^{ika}$$

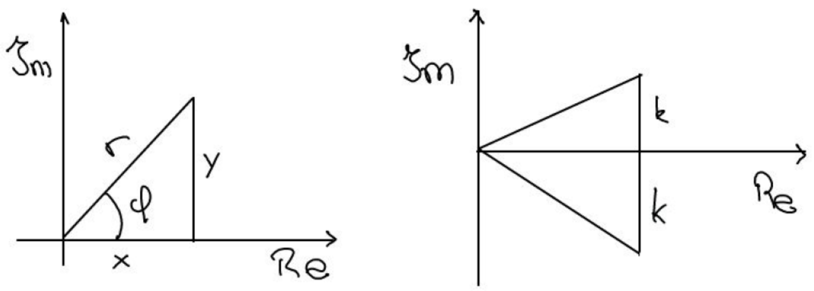
da cui

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

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

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

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, ϕ argomento.

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

$$\ln\xi = \ln|\xi| + i\text{arg}\xi = \ln|1| + i\text{arg}\xi$$

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

dato che $|\xi| = 1$

$$\text{arg}(\rho - ik) = -\text{arg}(\rho + ik)$$

quindi

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

quindi

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

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

quindi

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

Poiché

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

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

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

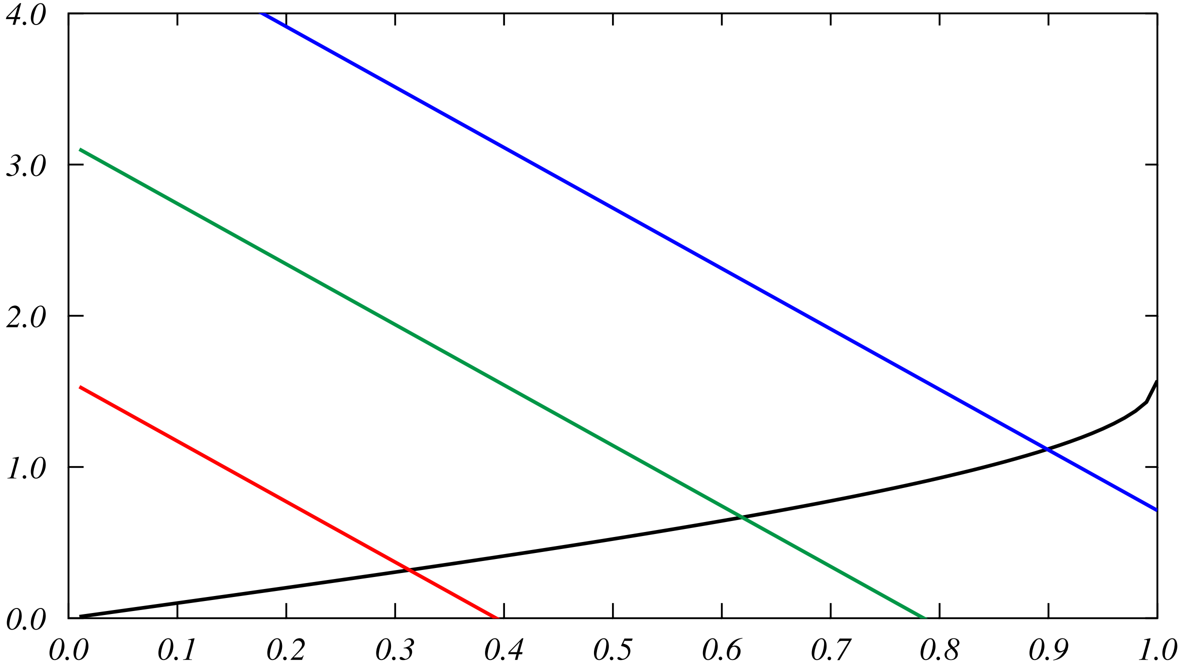
$$k\frac{a}{2} = -\mathrm{arcsin}(y) + n\frac{\pi}{2} = \frac{a}{2}y\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0+E)}$$

Definisco

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

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

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



4.0
3.0
2.0
1.0
0.0
0.0
0.1
0.2
0.3
0.4
0.5
0.6
0.7
0.8
0.9
1.0

Oscillatore armonico

Classicamente.

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

Schrödinger

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

Cambio variabile

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

Divido l'equazione di Schrödinger per α^2

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

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 $\xi \to \infty$ per avere una soluzione limitata.

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

Calcolo l'equazione per $\xi \to \infty$. 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

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

Questo implica che il termine tra parentesi quadre sia =0.
Per rendere questo termine indipendente da ξ 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

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

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

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

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

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

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

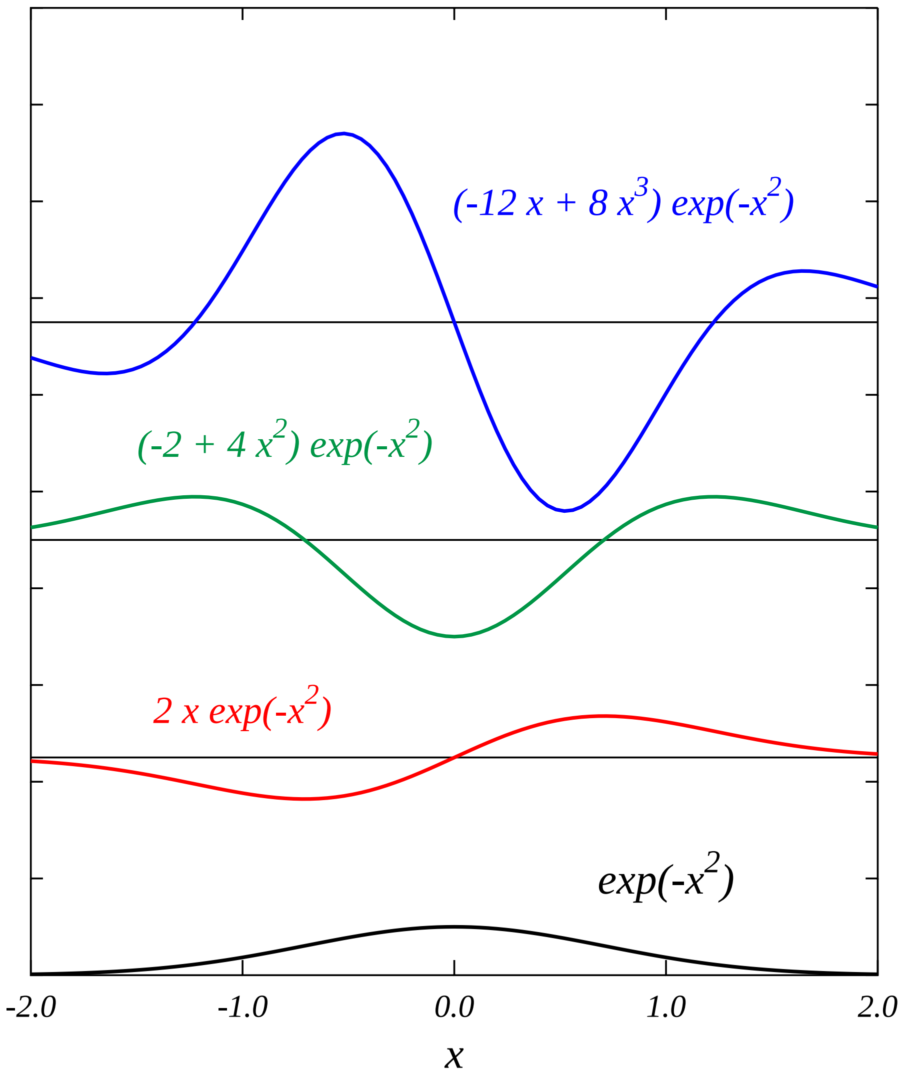
$$v_n(\xi) = \frac{1}{N_n} H_n(\xi)$$

N_n costante di normalizzazione.

Normalizzazione

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

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



(-12 x + 8 x3) exp(-x2)
(-2 + 4 x2) exp(-x2)
2 x exp(-x2)
exp(-x2)
-2.0
-1.0
0.0
1.0
2.0
x