

1 SISTEMI A UN GRADO DI LIBERTA'

1.1 Equazione agli autovalori dell'hamiltoniana

Si consideri una particella unidimensionale con hamiltoniana $H = P^2/2m + V(X)$. In rappresentazione [X], l'equazione agli autovalori di questa hamiltoniana è:

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

ovvero

$$\psi''_E(x) + (\epsilon - U(x))\psi_E(x) = 0$$

dove $\epsilon = \frac{2m}{\hbar^2}E$, $U(x) = \frac{2m}{\hbar^2}V(x)$. Dal punto di vista matematico la

$$\psi''(x) + (\epsilon - U(x))\psi(x) = 0 \tag{1}$$

è una equazione differenziale del secondo ordine, lineare e reale che quindi ammette due soluzioni reali, linearmente indipendenti, per esempio $u(x)$ e $v(x)$, scelte imponendo le condizioni iniziali

$$u(0) = 1 \quad u'(0) = 0$$

$$v(0) = 0 \quad v'(0) = 1$$

La soluzione generale $w(x)$ tale che $w(0) = a$ e $w'(0) = b$ sarà $w(x) = au(x) + bv(x)$. Alternativamente come soluzioni indipendenti si possono prendere la soluzione complessa $\psi(x)$ e la sua complessa coniugata $\psi^*(x)$.

Tuttavia in Meccanica Quantistica sono accettabili come autofunzioni o autofunzioni generalizzate solo quelle soluzioni che o sono funzioni modulo quadro integrabili (spettro discreto) o sono distribuzioni temperate (spettro continuo). Soluzioni che all'infinito crescono esponenzialmente non sono nè modulo quadro integrabili nè distribuzioni temperate e quindi devono essere scartate.

Prima di discutere il problema dello spettro di H, cioè per quali valori di E la (1) ammetta soluzioni accettabili, ricordiamo il teorema del Wronskiano:

Teorema del Wronskiano: Date due soluzioni $\psi(x)$ e $\phi(x)$ della (1) il Wronskiano è definito da $W(x) = \phi'(x)\psi(x) - \psi'(x)\phi(x)$. Il teorema del Wronskiano afferma che $W(x)$ è costante cioè non dipende da x.

Dimostrazione:

$\frac{d}{dx}W(x) = \phi''(x)\psi(x) - \psi''(x)\phi(x)$ e usando la (1) per ψ'' e l'analoga di (1) per ϕ'' si ottiene $\frac{d}{dx}W(x) = 0$.

Alcune conseguenze del teorema del Wronskiano sono:

- i) Due soluzioni sono linearmente indipendenti se e solo se il loro Wronskiano è diverso da zero.

Infatti se il Wronskiano è nullo, dalla definizione di Wronskiano si ha

$$\frac{\phi'(x)}{\phi(x)} = \frac{\psi'(x)}{\psi(x)} \quad (2)$$

e quindi integrando tale equazione si ha che $\phi(x)$ e $\psi(x)$ sono proporzionali. Viceversa se $\phi(x)$ e $\psi(x)$ sono proporzionali prendendo la derivata del loro logaritmo segue la (2) e quindi l'annullarsi del Wronskiano. In particolare se due soluzioni si annullano nello stesso punto il loro Wronskiano è nullo e quindi esse sono linearmente dipendenti (proporzionali).

- ii) Data una soluzione reale se ne può costruire un'altra linearmente indipendente mediante una quadratura.

Infatti, con riferimento alle soluzioni $u(x)$ e $v(x)$ definite sopra, il loro Wronskiano è

$$v'(x)u(x) - u'(x)v(x) = v'(0)u(0) - u'(0)v(0) = 1 \quad (3)$$

e quindi dato $u(x)$ si può costruire $v(x)$ mediante la

$$v(x) = u(x) \int_0^x \frac{dy}{u(y)^2} \quad (4)$$

(per dimostrarlo basta derivare la (4) e confrontare il risultato con (3)).

1.2 Spettro ed eventuale degenerazione

Supponiamo che il potenziale $V(x)$ sia regolare e per $x \rightarrow \pm\infty$ tenda rapidamente a valori costanti $V(x) \rightarrow V(\pm\infty)$ e inoltre che sia limitato inferiormente: $\inf[V(x)] = V_0$ (vedi figura). Non è restrittivo supporre $V(-\infty) \geq V(+\infty)$. (Se fosse l'opposto basterebbe cambiare x in $-x$).

Teorema: Se $V(x)$ è inferiormente limitato $\inf[V(x)] = V_0$ lo spettro di H è contenuto nel semiasse $E > V_0$.

Dimostrazione: consideriamo il valor medio di H in un generico stato ψ :

$$\langle H \rangle_\psi = \frac{\frac{1}{2m} \|P\psi\|^2}{\|\psi\|^2} + \frac{(\psi V \psi)}{\|\psi\|^2} > \frac{(\psi V \psi)}{\|\psi\|^2} > V_0.$$

Se ammettiamo per assurdo che esista un autovalore discreto E_0 con $E_0 < V_0$ e/o un intervallo Δ di autovalori generalizzati $E \leq V_0$, il valor medio di H sull'autostato relativo all'autovalore

E_0 o su uno stato dato dalla sovrapposizione di autofunzionali relativi agli autovalori $E \in \Delta$ violerebbe tale diseuguaglianza.

Convieni suddividere il semiasse $E > V_0$ in tre regioni:

- *regione I:* $V(-\infty) < E$
- *regione II:* $V(+\infty) < E < V(-\infty)$
- *regione III:* $V_0 < E < V(+\infty)$

Asintoticamente per $x \rightarrow \pm\infty$ l'equazione (1) diventa

$$\psi''_{as} + k_{\pm}^2 \psi_{as} = 0$$

dove

$$k_{\pm}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\pm\infty))$$

la cui soluzione generale è

$$\psi_{as} = ae^{ik_{\pm}x} + be^{-ik_{\pm}x}.$$

Se $k_{\pm}^2 > 0$, k_{\pm} sono reali e le soluzioni si comportano asintoticamente come esponenziali oscillanti (come seni e coseni). In tal caso le soluzioni sono accettabili come vettori dello spazio delle distribuzioni temperate. Se $k_{+}^2 \equiv -\chi_{+}^2 < 0$ (o $k_{-}^2 \equiv -\chi_{-}^2 < 0$), k_{+} (o k_{-}) è immaginario puro cioè χ_{+} (o χ_{-}) è reale e asintoticamente le soluzioni si comportano come esponenziali crescenti e decrescenti. Le soluzioni che divergono esponenzialmente per $x \rightarrow +\infty$ e/o per $x \rightarrow -\infty$ cioè rispettivamente $e^{\chi_{+}x}$ e $e^{-\chi_{-}x}$ (assumendo χ_{\pm} positivi) non sono accettabili.

Allora:

- *regione I.*

In tale regione k_{+} e k_{-} sono entrambe reali e come soluzioni linearmente indipendenti possiamo scegliere quelle che asintoticamente vanno come $e^{ik_{-}x}$ ed $e^{-ik_{-}x}$ per $x \rightarrow -\infty$

$$e^{ik_{-}x} \longleftarrow \psi^I(x) \longrightarrow a^I e^{ik_{+}x} + b^I e^{-ik_{+}x} \quad (5)$$

e

$$e^{-ik_{-}x} \longleftarrow \phi^I(x) \longrightarrow c^I e^{ik_{+}x} + d^I e^{-ik_{+}x} \quad (6)$$

che sono entrambe ammissibili come autofunzionali per ogni $E > V(-\infty)$ e quindi nella regione I lo spettro è continuo e per ogni $E > V(-\infty)$ ci sono due autovettori generalizzati linearmente indipendenti (spettro doppiamente degenere).

- *regione II.*

In tale regione k_+ è reale ma $k_- \equiv i\chi_-$ è immaginario puro e come soluzioni linearmente indipendenti possiamo scegliere

$$e^{+\chi_-x} \longleftarrow \psi^{II}(x) \longrightarrow a^{II}e^{ik_+x} + b^{II}e^{-ik_+x} \quad (7)$$

e

$$e^{-\chi_-x} \longleftarrow \phi^{II}(x) \longrightarrow c^{II}e^{ik_+x} + d^{II}e^{-ik_+x} \quad (8)$$

dove χ_- è reale e non è restrittivo assumere che sia positivo. In tal caso la prima soluzione è accettabile per ogni valore di E in questa regione ma la seconda diverge esponenzialmente e quindi non va accettata (se χ_- fosse negativo sarebbe il viceversa). Dunque in tale regione lo spettro è continuo e c'è una sola soluzione per ogni valore di E in tale regione (spettro non degenerare).

- *regione III.* In tale regione $k_+ \equiv i\chi_+$ e $k_- \equiv i\chi_-$ sono entrambi immaginari puri e dunque come soluzioni linearmente indipendenti possiamo scegliere

$$e^{+\chi_+x} \longleftarrow \psi^{III}(x) \longrightarrow a^{III}e^{+\chi_+x} + b^{III}e^{-\chi_+x} \quad (9)$$

e

$$e^{-\chi_+x} \longleftarrow \phi^{III}(x) \longrightarrow c^{III}e^{+\chi_+x} + d^{III}e^{-\chi_+x} \quad (10).$$

(χ_{\pm} reali e positivi). Per $x \rightarrow -\infty$ la prima soluzione è accettabile mentre la seconda diverge esponenzialmente. Inoltre per $x \rightarrow +\infty$ entrambe le soluzioni contengono genericamente termini che divergono esponenzialmente. Dunque genericamente nella regione III entrambe le soluzioni vanno scartate. Tuttavia bisogna tenere conto che i coefficienti a, b, c, d delle (5) - (10) dipendono dall'energia E e può capitare che per certi valori E_n di E $a^{III}(E_n)$ si annulli. In tal caso la prima soluzione decresce esponenzialmente per $x \rightarrow \pm\infty$ ed è modulo quadro integrabile; gli E_n sono autovalori dello spettro discreto (stati legati) e per ogni E_n vi è un solo autovettore (spettro non degenerare). Naturalmente per determinare tali autovalori e le corrispondenti autofunzioni (spesso in modo approssimato) è necessario conoscere la forma esplicita del potenziale $V(x)$.

Osservazioni

1. Nelle (5) -(10) \longleftarrow sottointende "nel limite $x \rightarrow -\infty$ " e \longrightarrow sottointende "nel limite $x \rightarrow +\infty$ ".

2. Per convincersi che le soluzioni (5),(6) (o le (7),(8) o le (9),(10)) sono linearmente indipendenti basta calcolare il loro Wronskiano per $x \rightarrow -\infty$.

3. Naturalmente:

- a) Se $V(+\infty) = V_0$ manca la regione III degli stati legati. Esempio: barriera di potenziale.
- b) Se $V(+\infty) = V(-\infty) < \infty$ manca la regione II. Questo è il caso, frequente, in cui il potenziale si annulla per $x \rightarrow \pm\infty$. (d'altronde, in questo caso b), ci si può sempre ricondurre al caso in cui $V(\pm\infty) = 0$ facendo una traslazione dell'asse dell'energia).
- c) Se $V(-\infty) = +\infty$ manca la regione I.
- d) Se $V(-\infty) = V(+\infty) = +\infty$ manca sia la regione I che la regione II e lo spettro è puramente discreto . Esempi : buca infinita, oscillatore armonico.

1.3 Potenziali costanti a tratti

Un caso interessante in cui l'equazione agli autovalori di H (l'equazione stazionaria di Schroedinger) é esattamente risolvibile é quello dei potenziali costanti a tratti, con un numero finito di discontinuitá di prima specie nei punti $x_j, j = 1, \dots, N$ con

$$-\infty \equiv x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_{N+1} \equiv +\infty$$

I punti $x_j, j = 1, \dots, N$ dividono l'asse reale in $N - 1$ intervalli aperti Δ_i e due semiassi $\Delta_{\pm\infty}$ dove

$$\Delta_i = [x_{i-1}, x_i] \quad i = 2, \dots, N$$

e

$$\Delta_{-\infty} \equiv \Delta_1 = [-\infty, x_1] \quad \Delta_{+\infty} \equiv \Delta_{N+1} = [x_N, +\infty]$$

Il potenziale $V(x)$ é definito da

$$\begin{aligned} V(x) &= V_i, & x \in \Delta_i \\ V(x) &= V_{\pm\infty}, & x \in \Delta_{\pm\infty} \end{aligned}$$

con V_i e $V_{\pm\infty}$ costanti.

Si noti che qualunque potenziale $V(x)$, regolare, inferiormente limitato, e che per $x \rightarrow \pm\infty$ tenda rapidamente a valori costanti $V(x) \rightarrow V(\pm\infty)$ puó essere approssimato con un potenziale costante a tratti e quindi, con l'aiuto di un computer, si possono trovare soluzioni approssimate dell'equazione agli autovalori di H per ogni punto del suo spettro .

Nel tratto Δ_i , $i = 1, 2, \dots, N, N + 1$ l'equazione stazionaria di Schroedinger (1) diventa

$$\psi''_{k_i} + k_i^2 \psi_{k_i} = 0 \quad (11)$$

dove

$$\hbar k_i = \sqrt{2M(E - V_i)} \quad (12)$$

Se $E \geq V_i$, k_i é reale e la soluzione generale della (11) é

$$\psi_{k_i}(x) = c_i^+ e^{+ik_i x} + c_i^- e^{-ik_i x} \quad (13)$$

mentre se $E < V_i$, $k_i = i\chi_i$ é immaginaria pura e la soluzione generale é

$$\psi_{k_i}(x) = c_i^+ e^{\chi_i x} + c_i^- e^{-\chi_i x}. \quad (14)$$

Nel primo caso, puó anche essere utile scegliere la soluzione nella forma

$$\psi_{E\kappa_i}(x) = \tilde{c}_i^+ \cos(k_i x) + \tilde{c}_i^- \sin(k_i x) \quad (15)$$

Tuttavia perché la soluzione sia accettabile devono essere soddisfatte due condizioni:

- 1) La soluzione deve comportarsi “bene” all’infinito, cioè se $E < V_{\pm\infty}$ deve essere polinomialmente limitata e se $E > V_{\pm\infty}$ deve essere una distribuzione temperata.
- 2) La soluzione, anche nei punti di discontinuitá del potenziale, deve essere continua con derivata prima continua (*condizioni di raccordo*).

Per capire la necessitá della condizione 2), osserviamo che nei punti dello spettro discreto la soluzione, modulo quadro integrabile, deve appartenere al dominio di H , e in particolare di P^2 , e quindi deve essere continua con derivata prima continua. Nei punti dello spettro continuo la soluzione é una distribuzione temperata e P^2 (cioé la derivata seconda) puó, nel senso delle distribuzioni, agire anche su funzioni con una discontinuitá in x_i o con derivata prima discontinua in x_i . Tuttavia P^2 agendo su una funzione discontinua in x_i produce termini proporzionali alle distribuzioni $\delta(x - x_i)$ e $\delta'(x - x_i)$, o agendo su una funzione con derivata prima discontinua in x_i produce un termine proporzionale a $\delta(x - x_i)$.¹ Ora però tali termini, proporzionali alle distribuzioni δ o δ' prodotti dalla derivata seconda in (11), non possono essere compensati dal

¹si noti che una funzione $f(x)$, continua a parte una discontinuitá di prima specie in x_o puó, come distribuzione temperata, essere scritta nella forma $f(x) = f_1(x)\theta(x_o - x) + f_2(x)\theta(x - x_o)$ e quindi la sua derivata (nel senso delle distribuzioni) é $f'(x) = f'_1(x)\theta(x_o - x) + f'_2(x)\theta(x - x_o) + (f_2(x_o) - f_1(x_o))\delta(x - x_o)$

secondo termine a primo membro della (11) e quindi una funzione discontinua e/o con derivata prima discontinua non può essere soluzione della (11), nel senso delle distribuzioni.

Per quanto riguarda la condizione 1), essa non pone restrizioni alla soluzione negli $N - 1$ intervalli Δ_i , $i = 2, \dots, N$: perciò poiché, come si è detto, possiamo scegliere che le soluzioni siano reali, le soluzioni, date da (14), se $E < V_i$, o da (15), se $E > V_i$, dipendono da 2 parametri reali per ogni intervallo. (Se invece, nel caso $E > V_i$ si sceglie la soluzione (13) e si richiede che sia reale, si trova $c_i^{(+)*} = c_i^{(-)}$, ancora due parametri reali!). In tutto, le soluzioni in questi $N - 1$ intervalli dipendono da $2(N-1)$ parametri reali.

Invece per le soluzioni nei due semiasse $\Delta_{\pm\infty}$ bisogna distinguere le tre regioni

regione I: $E > V_{-\infty}$;

regione II $V_{-\infty} > E > V_{+\infty}$;

regione III $V_{+\infty} > E > V_0$.

In accordo con la discussione della sezione precedente, nella regione I, le soluzioni accettabili, nei semiasse $\Delta_{\pm\infty}$, sono del tipo (13) (o (15)) e dunque dipendono da 4 parametri reali. Nella regione II la soluzione accettabile è ancora del tipo (13)(o (15)) in $\Delta_{+\infty}$ (due parametri reali), ma in $\Delta_{-\infty}$ solo la soluzione ²

$$\psi_{k_-}(x) = c_{-\infty}^{(+)} e^{\chi_- x} \quad (16)$$

è accettabile (in tutto tre parametri reali). Infine nella regione III la soluzione accettabile in $\Delta_{-\infty}$ è della forma(16) mentre quella in $\Delta_{+\infty}$ è

$$\psi_{k_+}(x) = c_{+\infty}^{(-)} e^{-\chi_+ x} \quad (17)$$

(due parametri reali) ($\chi_{\pm} \equiv \chi_{\pm\infty}$ reali e positivi). Dunque, in base alla condizione 1) la soluzione dipende da $2N + 2$ parametri reali nella regione I, da $2N + 1$ parametri reali nella regione II e da $2N$ parametri reali nella regione III.

Tuttavia un parametro può essere assorbito dalla condizione di normalizzazione e fissato arbitrariamente: la soluzione, nelle tre regioni, dipende dunque da $2N + 1$, $2N$, $2N - 1$ parametri reali rispettivamente.

Per quanto riguarda la condizione 2) (condizione di raccordo), questa impone due condizioni per ogni punto di discontinuità, x_i , $i = 1, \dots, N$, e cioè la condizione di continuità per la funzione

$$\psi_{k_i}(x_i) = \psi_{k_{i+1}}(x_i)$$

e per la sua derivata prima

$$\psi'_{k_i}(x_i) = \psi'_{k_{i+1}}(x_i)$$

²Per comodità tipografica, seguendo le notazioni della sezione precedente, scriveremo k_{\pm} al posto di $k_{\pm\infty}$ e, se $E < V_{\pm\infty}$ per cui k_{\pm} sono immaginari scriveremo $k_{\pm} = i\chi_{\pm}$.

ovvero

$$c_i^+ e^{+ik_i x_i} + c_i^- e^{-ik_i x_i} = c_{i+1}^+ e^{+ik_{i+1} x_i} + c_{i+1}^- e^{-ik_{i+1} x_i} \quad (18)$$

e

$$ik_i [c_i^+ e^{+ik_i x_i} - c_i^- e^{-ik_i x_i}] = ik_{i+1} [c_{i+1}^+ e^{+ik_{i+1} x_i} - c_{i+1}^- e^{-ik_{i+1} x_i}] \quad (19)$$

(Si noti che nelle (18) e (19) le k_i (e k_{i+1}) sono reali o immaginarie pure a seconda che $E > V_i$ o $E < V_i$ (e $E > V_{i+1}$ o $E < V_{i+1}$).

Per ogni $i = 1, \dots, N$, le (18),(19) sono due equazioni lineari e omogenee nelle incognite $c_{i+1}^{(\pm)}$, che sono indipendenti perché il determinante dei coefficienti é diverso da zero (vale $2ik_i$) e dunque permettono di determinare le $c_{i+1}^{(\pm)}$ in funzione delle $c_i^{(\pm)}$ (o viceversa considerando le $c_i^{(\pm)}$ come incognite). In tutto abbiamo $2N$ condizioni.

Perció nella regione I la soluzione dipende da un parametro reale ($(2N + 1) - 2N = 1$), cioè per ogni valore di E si hanno due soluzioni indipendenti. Queste, per esempio, si possono trovare, una partendo dalla soluzione $\cos(k_- x)$ in $\Delta_{-\infty}$, risolvendo passo per passo le condizioni di raccordo, in x_1 per determinare $c_1^{(\pm)}$, in x_2 per determinare $c_2^{(\pm)}$ eccetera fino ad arrivare in $\Delta_{+\infty}$ alla soluzione di tipo (15), che é accettabile; l'altra soluzione si puó trovare con lo stesso procedimento partendo dalla soluzione $\sin(k_- x)$ in $\Delta_{-\infty}$.

Nella regione II, il numero di parametri é $2N - 2N = 0$ e per ogni valore di E in questa regione vi é un'unica soluzione che puó essere determinata partendo dalla soluzione $e^{\chi-x}$ in $\Delta_{-\infty}$, e procedendo come nel caso precedente.

Nella regione III il numero di parametri é $2N - 1 - 2N = -1$ e dunque per un generico valore di E , il sistema delle $2N$ condizioni di raccordo non ha soluzione. A riprova di ciò, se si parte dalla soluzione accettabile $e^{\chi-x}$ in $\Delta_{-\infty}$ e si procede come prima si arriva in $\Delta_{+\infty}$ alla soluzione

$$\psi_{k_+}(x) = c_{+\infty}^{(+)} e^{\chi+x} + c_{+\infty}^{(-)} e^{-\chi+x}$$

che non é accettabile perché contiene un termine $c_{+\infty}^{(+)} e^{\chi+x}$ che diverge esponenzialmente. Tuttavia i coefficienti $c_i^{(\pm)}$ dipendono dall'energia e se per certi valori E_n dell'energia si ha che

$$c_{+\infty}^{(+)}(E_n) = 0 \quad (20)$$

per tali valori la soluzione esiste ed é una funzione modulo quadro integrabile. I punti E_n sono i punti dello spettro discreto.

Questa analisi conferma, nel caso concreto e esattamente risolubile dei potenziali costanti a tratti, la discussione generale fatta nella sezione precedente.

1.4 Pacchetti Incidenti, Trasmessi e Riflessi

Consideriamo il moto di una particella unidimensionale, di energia positiva E , che si muove in un potenziale $V(x)$ che tende rapidamente a zero per $x \rightarrow \pm\infty$. Con riferimento alla discussione del paragrafo 1.2, poichè $E > 0$, ci troviamo nella regione I dove ci sono, per ogni E , due soluzioni indipendenti (equazioni (5) e (6)). Ora $k_+ = k_- \equiv k$ dove $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$. Consideriamo la combinazione lineare delle (5),(6) che per $x \rightarrow +\infty$ tende a e^{ikx} e chiamiamo $\psi_k^{in}(x)$ tale autofunzionale. Abbiamo dunque

$$e^{ikx} + \rho(k)e^{-ikx} \longleftarrow \psi_k^{in}(x) \longrightarrow \tau(k)e^{ikx} \quad (21)$$

dove abbiamo sfruttato l'arbitrarietà della normalizzazione di ψ_k^{in} per porre uguale a 1 il coefficiente di fronte al fattore e^{ikx} nell'andamento per $x \rightarrow -\infty$ della ψ_k^{in} .

Per essere concreti e per fare le cose semplici, supponiamo ora che $V(x)$ addirittura si annulli per $x \leq -a$ e per $x \geq +a$. Allora la

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_k^{in} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi_k^{in} = 0 \quad (22)$$

nelle regioni $|x| \geq a$ diventa

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_k^{in} + k^2\psi_k^{in} = 0$$

e dunque in tali regioni è esattamente risolubile. La soluzione a cui siamo interessati è data proprio dagli andamenti asintotici per $x \rightarrow \pm\infty$ della (21). Supponiamo inoltre di avere risolto in qualche modo la (22) per $|x| \leq a$. La soluzione generale in tale regione sarà data dalla combinazione lineare di due soluzioni linearmente indipendenti ϕ_{1k} e ϕ_{2k} (che supponiamo note). Abbiamo dunque:

$$\psi_k^{in}(x) = e^{ikx} + \rho(k)e^{-ikx} \quad x \leq -a \quad (23)$$

$$\psi_k^{in}(x) = A(k)(\phi_{1k}(x) + \gamma(k)\phi_{2k}(x)) \quad -a \leq x \leq a \quad (24)$$

$$\psi_k^{in}(x) = \tau(k)e^{ikx} \quad x \geq a \quad (25)$$

dove la normalizzazione $A(k)$, il parametro $\gamma(k)$ e le funzioni, interessanti $\rho(k)$ e $\tau(k)$ sono determinate imponendo le condizioni di raccordo nei punti $\pm a$, che sono:

$$\frac{ik(e^{-ika} - \rho(k)e^{ika})}{e^{-ika} + \rho(k)e^{ika}} = \frac{u'_k(-a)}{u_k(-a)} \quad (26)$$

$$e^{-ika} + \rho(k)e^{ika} = u_k(-a) \quad (27)$$

$$ik = \frac{u'_k(a)}{u_k(a)} \quad (28)$$

e

$$\tau(k)e^{ika} = u_k(a) \quad (29)$$

avendo posto

$$u_k(x) = A(k)(\phi_{1k}(x) + \gamma(k)\phi_{2k}(x)).$$

La (28) determina γ ; poi la (26) determina ρ ; quindi la (27) determina A e infine la (29) determina τ .

Qual'è il significato fisico della soluzione $\psi_k^{in}(x)$? Per capirlo costruiamo con gli autofunzionali $\psi_k^{in}(x)$ un pacchetto e facciamolo evolvere nel tempo.

Come funzione ausiliaria per costruire il pacchetto scegliamo una funzione reale e positiva $f(q)$ con un massimo pronunciato in $q = 0$ e essenzialmente diversa da zero in un piccolo intorno di $q = 0$. Supponiamo che anche la sua trasformata di Fourier

$$g(x) = \int f(q)e^{iqx} dq$$

sia sostanzialmente diversa da zero in un piccolo intorno di $x = 0$, ovviamente nei limiti della condizione $\Delta x \Delta q \geq \frac{1}{2}$ (si noti che se $f(q)$ è reale il valor medio di x per la sua trasformata di Fourier $g(x)$ è nullo). Per fissare le idee possiamo pensare che $f(q)$ sia una gaussiana centrata in $q = 0$ oppure la funzione $\theta(q)_\Delta$ dove Δ è un intervallo con centro in $q = 0$. Allora al tempo $t = 0$ il pacchetto è:

$$\psi^{in}(x) = \int f(k - k_0)\psi_k^{in}(x) dk$$

e quindi al tempo t è:

$$\psi^{in}(x, t) = \int f(k - k_0)\psi_k^{in}(x)e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk$$

(si ricordi che abbiamo posto $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E$ e quindi $\frac{E}{\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m}$). Allora, per $x \leq -a$, usando (27) abbiamo

$$\psi^{in}(x, t) = \phi^{(I)}(x, t) + \phi^{(R)}(x, t) \quad (30)$$

dove

$$\phi^{(I)}(x, t) = \int f(k - k_0)e^{ikx}e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk \quad (31)$$

$$\phi^{(R)}(x, t) = \int f(k - k_0)\rho(k)e^{-ikx}e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk \quad (32)$$

mentre, per $x \geq a$, usando (23) si ha:

$$\psi^{in}(x, t) \equiv \phi^{(T)}(x, t) = \int f(k - k_0)\tau(k)e^{ikx}e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} dk \quad (33)$$

$f(k - k_0)$ è reale e positiva ma $\rho(k)$ e $\tau(k)$ a priori sono funzioni complesse, diciamo $\rho(k) = |\rho(k)|e^{i\alpha(k)}$ e $\tau(k) = |\tau(k)|e^{i\beta(k)}$ ($\alpha(k)$ e $\beta(k)$ reali).

Se k_1 e k_2 sono rispettivamente i punti di massimo di $|f(k - k_0)\rho(k)|$ e $|f(k - k_0)\tau(k)|$ (a priori diversi da k_0) possiamo definire le funzioni reali e positive $f_R(k - k_1)$ e $f_T(k - k_2)$ ponendo

$$f(k - k_0)\rho(k) = |f(k - k_0)\rho(k)|e^{i\alpha(k)} \equiv f_R(k - k_1)e^{i\alpha(k)} \quad (34)$$

e

$$f(k - k_0)\tau(k) = |f(k - k_0)\tau(k)|e^{i\beta(k)} \equiv f_T(k - k_2)e^{i\beta(k)} \quad (35)$$

Se $\rho(k)$ e $\tau(k)$ non sono troppo irregolari intorno a k_0 anche $f_R(k - k_1)$ e $f_T(k - k_2)$ saranno sostanzialmente diversi da zero solo in un intorno piccolo di k_1 e k_2 (che oltretutto saranno vicini a k_0)

Per capire il significato fisico di $\phi^{(I)}$, $\phi^{(R)}$ e $\phi^{(T)}$ facciamo una approssimazione detta approssimazione geometrica, molto usata in ottica. Supponiamo di volere calcolare l'integrale $\int w(k - k_0)e^{i\epsilon(k)}$ dove $w(k - k_0)$ è una funzione reale e positiva, piccata intorno a k_0 e $\epsilon(k)$ è reale. L'approssimazione consiste nello sviluppare $\epsilon(k)$ intorno a k_0 e nel tenere solo il termine d'ordine zero e quello del primo ordine dello sviluppo. L'approssimazione è giustificata dal fatto che $w(k - k_0)$, essendo piccata intorno a k_0 , deprime nell'esponente i contributi dei grandi valori di $k - k_0$. Nel nostro caso l'approssimazione consiste nell'effettuare nelle (31),(32) e (33) le seguenti sostituzioni

$$k = k_n + q$$

$$k^2 \rightarrow k_n^2 + 2qk_n \quad (\text{in } e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t})$$

$$\alpha(k) \rightarrow \alpha(k_1) + \alpha'(k_1)q$$

e

$$\beta(k) \rightarrow \beta(k_2) + \beta'(k_2)q$$

dove k_n sta per k_0 , k_1 e k_2 rispettivamente in (31),(32),(33) e $q = k - k_n$. Allora, se usiamo l'approssimazione geometrica per le (31),(32),(33) (tenendo conto di (34),(35)), le funzioni

$$\gamma_I(k) = kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t$$

$$\gamma_R(k) = -kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t + \alpha(k)$$

$$\gamma_T(k) = kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t + \beta(k)$$

che compaiono a esponente delle (31),(32),(33), diventano

$$\gamma_I(k) \approx \gamma_I(k_n) + q(x - v_0 t)$$

$$\gamma_R(k) \approx \gamma_R(k_n) - q(x + v_1 t - \alpha')$$

$$\gamma_T(k) \approx \gamma_T(k_n) + q(x - v_2 t + \beta')$$

dove $v_n = \frac{\hbar k_n}{m}$ ($k_n \equiv (k_0, k_1, k_2)$) e le (31),(32),(33) diventano

$$\psi^{(I)}(x, t) \approx e^{i\gamma_I(k_0)} \int f(q) e^{iq(x-v_0 t)} dq \equiv e^{i\gamma_I} g(x - v_0 t) \quad (36)$$

$$\psi^{(R)}(x, t) \approx e^{i\gamma_R(k_1)} \int f_R(q) e^{-iq(x+v_1 t-\alpha'(k_1))} dq \equiv e^{i\gamma_R} g_R^*(x + v_1 t - \alpha') \quad (37)$$

$$\psi^{(T)}(x, t) \approx e^{i\gamma_T(k_2)} \int f_T(q) e^{i(x-v_2 t+\beta'(k_2))} dq \equiv e^{i\gamma_T} g_T(x - v_2 t + \beta'). \quad (38)$$

Inoltre $g(x)$, $g_R(x)$ e $g_T(x)$ sono le trasformate di Fourier di $f(x)$, $f_R(x)$ e $f_T(x)$ cioè

$$g_Y(x) = \int f_Y(q) e^{iqx} dq$$

con $f_Y(q) \equiv (f(q); f_R(q); f_T(q))$ e $g_Y(x) \equiv (g(x); g_R(x); g_T(x))$. Poichè $f_Y(q)$ sono reali, le loro trasformate di Fourier $g_Y(x)$ sono simmetriche per lo scambio di x in $-x$ e dunque il valor medio di x per le g_Y è nullo. Inoltre poichè le $f_Y(q)$ sono positive e hanno un massimo intorno a $q=0$, possiamo assumere che anche le $g_Y(x)$ abbiano un massimo intorno a $x=0$ e siano praticamente diverse da zero solo in un intorno di $x=0$, (compatibilmente con la condizione $\Delta x \Delta q \geq \frac{1}{2}$). Allora da (36), (37), (38) segue che:

- i) $\psi^I(x, t)$ rappresenta un pacchetto che si propaga nella regione $x \leq -a$, da sinistra a destra con velocità v_0 (pacchetto incidente).
- ii) ψ_R rappresenta un pacchetto che si propaga nella regione $x \leq -a$ da destra a sinistra con velocità $-v_1$ (pacchetto riflesso).
- iii) ψ_T rappresenta un pacchetto che si propaga nella regione $x \geq a$ da sinistra a destra con velocità v_2 (pacchetto trasmesso).

$\rho(k)$ si chiama ampiezza di riflessione, $\tau(k)$ ampiezza di trasmissione.

$R = |\rho(k)|^2$ e $T = |\tau(k)|^2$ sono rispettivamente le probabilità di riflessione e trasmissione per una particella di energia E . Vale la seguente importante identità :

$$T + R = 1 \quad (37)$$

che rappresenta la conservazione della probabilità per la particella nel potenziale considerato. Per dimostrarla basta applicare il teorema del Wronskiano per la $\psi_k^{in}(x)$, definita in (27),(28),(29), e la sua complessa coniugata $\psi_k^{in*}(x)$ in due punti $x_+ \geq a$ e $x_- \leq -a$: il teorema ci dice che $W(x_+) = W(x_-)$. Fatti i calcoli, abbiamo $W(x_+) = T$ e $W(x_-) = 1 - R$.

Osservazioni

- 1. Notiamo che l'approssimazione geometrica, benchè utile per farci capire il significato fisico della soluzione $\psi_k^{in}(x)$, tuttavia non può catturare e quindi rende invisibile una proprietà importante della propagazione dei pacchetti liberi, cioè il fenomeno dell'allargamento dei pacchetti.
- 2. Notiamo che, (supponendo che il potenziale $V(x)$ abbia un massimo assoluto, positivo, V_{max} nella regione $-a \leq x \leq a$) la particella quantistica, a differenza di quella classica, ha una probabilità non nulla di essere trasmessa anche se $E \leq V_{max}$ (*effetto tunnel*) e viceversa ha una probabilità non nulla di essere riflessa anche se $E \geq V_{max}$ (anche la buca riflette).

1.5 Esempi

- 1. **Gradino di potenziale** vedi testo di Sartori
- 2. **Barriera di potenziale** vedi testo di Sartori
- 3. **Buca rettangolare** vedi testo di Sartori
- 4. **Buca infinita** vedi testo di Sartori
- 5. **Oscillatore armonico** vedi testo di Sartori (cap.20)

fig. 1: Esempio di potenziale $V(x)$