

Capitolo 4

Alcuni problemi di MQ in una dimensione

4.1 Considerazioni generali

Consideriamo ora il caso di un moto unidimensionale (descritto da una coordinata x e dal tempo t) di una particella quantistica in un potenziale $V(x)$ non dipendente dal tempo. L'equazione di Schrödinger per questo tipo di problemi è

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x, t) + V(x) \Psi(x, t)$$

Poiché l'hamiltoniana non dipende esplicitamente dal tempo, possiamo fattorizzare la dipendenza temporale

$$\Psi(x, t) = \sum_E A_E e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi(x)$$

e studiare il problema agli autovalori

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

che nella fattispecie si legge

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

Nel seguito specificheremo alcuni potenziali $V(x)$ che simulano a vario livello sistemi fisici interessanti e ne studieremo le autofunzioni dell'energia.

Parlare di sistemi unidimensionali in senso stretto è quantisticamente un non-senso. Infatti le coordinate ortogonali a x sono da considerarsi, nel problema ora enunciato, strettamente nulle e così pure i relativi momenti coniugati: il principio di indeterminazione ne risulterebbe violato.

Non si pensi tuttavia che i problemi unidimensionali siano puramente esercizi accademici. A parte il fatto che molto possiamo imparare dalla soluzione di questi problemi semplificati, o come viene detto in inglese *toy models*, il vero motivo del loro interesse è che possono concorrere alla soluzione di problemi a più gradi di libertà ove siano presenti particolari simmetrie.

Se consideriamo per esempio una hamiltoniana di un sistema a N gradi di libertà che sia totalmente separabile nelle sue variabili

$$H(p, q) = \sum_{i=1}^N H_i(p_i, q_i)$$

l'equazione agli autovalori

$$H\psi(q) = E\psi(q)$$

si separa se poniamo

$$\psi(q) = \prod_{i=1}^N \psi_i(q_i)$$

dove i singoli fattori della funzione d'onda soddisfano le equazioni agli autovalori separate, ognuna dipendente da un solo grado di libertà e perciò unidimensionale

$$H_i(p_i, q_i)\psi_i(q_i) = E_i\psi_i(q_i)$$

con gli autovalori E_i connessi all'energia totale del sistema dalla ovvia relazione

$$E = \sum_{i=1}^N E_i$$

Dunque la soluzione di problemi unidimensionali può essere vista come la soluzione parziale di problemi a più gradi di libertà e il suo ruolo può essere quindi cruciale nella comprensione dei sistemi quantistici.

Vi sono alcune considerazioni generali da premettere per lo studio di problemi unidimensionali, che saranno molto utili nella successiva trattazione. Innanzitutto vale un cruciale

Teorema. *La parte discreta dello spettro dell'hamiltoniana in un problema unidimensionale è sempre non degenera.*

Infatti, si supponga che al medesimo autovalore E corrispondano due differenti autofunzioni ψ_1 e ψ_2 che, rappresentando stati legati, sono normalizzabili e tendenti a zero per $x \rightarrow \pm\infty$

$$\begin{aligned} H\psi_1 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_1}{dx^2} + V\psi_1 = E\psi_1 \\ H\psi_2 &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_2}{dx^2} + V\psi_2 = E\psi_2 \end{aligned}$$

moltiplicando la prima per ψ_2 e la seconda per ψ_1 e poi sottraendo membro a membro

$$\psi_2 \frac{d^2\psi_1}{dx^2} - \psi_1 \frac{d^2\psi_2}{dx^2} = 0$$

Ma questa combinazione di derivate si può riscrivere come

$$\frac{d}{dx} \left(\psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} \right) = 0$$

e quindi

$$\psi_2 \frac{d\psi_1}{dx} - \psi_1 \frac{d\psi_2}{dx} = \text{costante}$$

Questa costante può essere calcolata all'infinito, dove il limite delle ψ_1 e ψ_2 è zero e quindi è pari a zero. Ne consegue

$$\frac{1}{\psi_1} \frac{d\psi_1}{dx} = \frac{1}{\psi_2} \frac{d\psi_2}{dx} \quad \implies \quad \frac{d}{dx} \log \psi_1 = \frac{d}{dx} \log \psi_2$$

ovvero

$$\log \psi_1 = \log \psi_2 + C \quad \implies \quad \psi_1 = K\psi_2$$

con $K = e^C$ costante arbitraria. Pertanto ψ_1 è proporzionale a ψ_2 e rappresenta lo stesso stato non degenero.

◆

Un altro punto molto importante da sottolineare è quello delle proprietà di parità delle soluzioni di problemi unidimensionali.

Teorema. (della parità) *Se un sistema ha hamiltoniana pari, le sue autofunzioni hanno necessariamente parità definita, sono cioè o pari o dispari.*

Se l'hamiltoniana è un operatore pari e che quindi commuta con l'operatore di parità, il che si verifica ogni volta che il potenziale $V(x)$ è una funzione pari, visto che la parte cinetica $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ è pari, le autofunzioni non degeneri di H devono essere anche autofunzioni della parità, poiché operatori che commutano hanno lo stesso insieme di autofunzioni. Esse devono perciò essere o pari o dispari.

◆

Teorema. (del minimo) Se $V(x)$ ha un minimo assoluto V_{min} , allora tutti gli autovalori E dell'hamiltoniana

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

sono tali che $E \geq V_{min}$.

Per dimostrarlo, basta integrare l'equazione di Schrödinger moltiplicata per ψ^* su tutto l'asse reale

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

per rendersi conto che questa non è altro che la relazione

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle$$

dove $T = p^2/2m$ è l'energia cinetica. Ora se $V(x) \geq V_{min}$ il valor medio del potenziale è maggiore di

$$\langle V \rangle \geq \int_{-\infty}^{+\infty} V_{min} |\psi(x)|^2 dx = V_{min}$$

D'altro canto una integrazione per parti e l'annullarsi di $\psi(x)$ all'infinito mostrano che

$$\langle T \rangle = \frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{+\infty} \left| \frac{d}{dx} \psi(x) \right|^2 dx \geq 0$$

dunque

$$E = \langle T \rangle + \langle V \rangle \geq V_{min}$$

◆

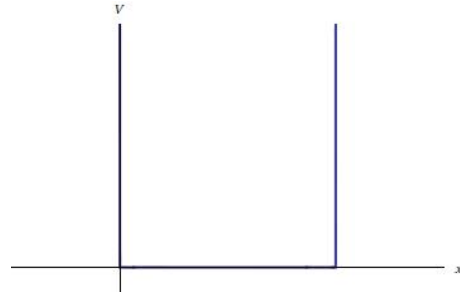
4.2 Buca di potenziale infinita

Il più semplice esempio di potenziale confinante è quello della buca di potenziale infinita, definita come (fig.4.1)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{per } x < 0 \text{ o } x > L \end{cases}$$

Nella regione esterna all'intervallo $[0, L]$ l'energia potenziale sarebbe infinita e quindi il sistema fisico non può esistere. La probabilità di trovarlo qui è nulla, e quindi anche la funzione d'onda deve annullarsi identicamente

$$\psi(x) = 0 \quad \text{per} \quad x < 0 \text{ o } x > L$$



Inoltre la funzione d'onda deve essere dappertutto continua, per evitare di avere probabilità a più valori nei punti di raccordo, e perciò la soluzione interna all'intervallo $[0, L]$ deve raccordarsi con continuità con la soluzione $\psi = 0$ esterna nei punti $x = 0, L$. Ciò implica le condizioni al contorno

Figura 4.1: *Buca di potenziale infinita*

$$\psi(0) = \psi(L) = 0$$

Nella regione interna, l'equazione agli autovalori per l'energia è

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

ovvero

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

con

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

La soluzione generale di questa equazione è

$$\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$$

La condizione di annullamento in $x = 0$ fornisce

$$\psi(0) = A \sin 0 + B \cos 0 = B = 0$$

Dunque $B = 0$ e la soluzione accettabile dal punto di vista fisico è

$$\psi(x) = A \sin kx$$

La condizione di annullamento in L comporta

$$\psi(L) = A \sin kL = 0$$

da cui, essendo evidentemente $A \neq 0$ (altrimenti la soluzione sarebbe identicamente nulla ovunque, ovvero non esisterebbe il sistema), discende la quantizzazione di k

$$k = k_n = \frac{\pi}{L}n \quad \text{con} \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Tuttavia, la soluzione con $n = 0$ va di nuovo esclusa, in quanto annullerebbe identicamente tutta la funzione d'onda. Le soluzioni con k negativo non fanno altro che duplicare quelle con k positivo e sono ridondanti (o meglio le potremmo vedere come una degenerazione di grado 2 rimuovibile affiancando all'energia un altro numero quantico, la parità definita come il segno di k). Quindi ci possiamo tranquillamente restringere alle soluzioni con $n = 1, 2, 3, \dots$ per le quali

$$k = k_n = \frac{\pi}{L}n \quad , \quad E = E_n = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2$$

Pertanto in questo sistema i livelli energetici risultano quantizzati. La funzione d'onda dell' n -simo stato stazionario va normalizzata calcolandone la norma quadrata

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = \int_0^L |A \sin \frac{\pi n}{L} x|^2 dx = 1$$

Con il cambiamento di variabile $y = \frac{n\pi}{L}x$ nell'integrale

$$\begin{aligned} 1 &= |A|^2 \frac{L}{n\pi} \int_0^{n\pi} \sin^2 y \, dy = |A|^2 \frac{L}{2n\pi} \int_0^{n\pi} (1 - \cos 2y) \, dy \\ &= |A|^2 \frac{L}{2n\pi} \left(n\pi - \frac{1}{2} [\sin 2y]_{y=0}^{y=n\pi} \right) = |A|^2 \frac{L}{2} \end{aligned}$$

da cui

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Perciò la funzione d'onda stazionaria normalizzata è (fig.4.2)

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x$$

È immediato verificare che tale sistema di funzioni è ortonormale e completo in $\mathbb{L}^2(0, L)$. L'ortogonalità si verifica calcolando l'integrale

$$\begin{aligned}\langle \psi_n | \psi_m \rangle &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{m\pi}{L} x dx \\ &= \frac{1}{L} \int_0^L \left(\cos \frac{(n-m)\pi x}{L} - \cos \frac{(n+m)\pi x}{L} \right) dx \\ &= \frac{1}{L} \left[\sin \frac{(n-m)\pi x}{L} \right]_0^L - \frac{1}{L} \left[\sin \frac{(n+m)\pi x}{L} \right]_0^L\end{aligned}$$

Questo integrale è evidentemente 0 se $n \neq m$. Se però $n = m$ il primo termine dell'integranda diventa $\cos \frac{(n-n)\pi x}{L} = 1$ e il suo integrale diventa L . In conclusione

$$\langle \psi_n | \psi_m \rangle = \delta_{m,n}$$

La completezza si ottiene verificando che

$$\frac{2}{L} \sum_{n=1}^{\infty} \sin \frac{n\pi}{L} x \sin \frac{n\pi}{L} x' = \delta(x - x')$$

cosa che si lascia al lettore come esercizio (Suggerimento: esprimere $\sin y$ in termini di esponenziali $e^{\pm i y}$).

Un generico stato $\Psi(x, t)$ si scriverà, in questa base, come

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} B_n \sin \frac{n\pi}{L} x e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

ovvero tramite una serie di Fourier delle ψ_n . Se si vuole sapere qual è il peso della componente n -sima della base nello stato Ψ bisognerà calcolare il prodotto scalare di Ψ con ψ_n

$$\langle \psi_n | \Psi \rangle = B_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}$$

La probabilità che, effettuando una misura di energia sul sistema preparato nello stato Ψ si ottenga E_n sarà

$$\frac{|\langle \psi_n | \Psi \rangle|^2}{|\langle \Psi | \Psi \rangle|^2} = \frac{|B_n|^2}{\sum_{m=1}^{\infty} |B_m|^2}$$

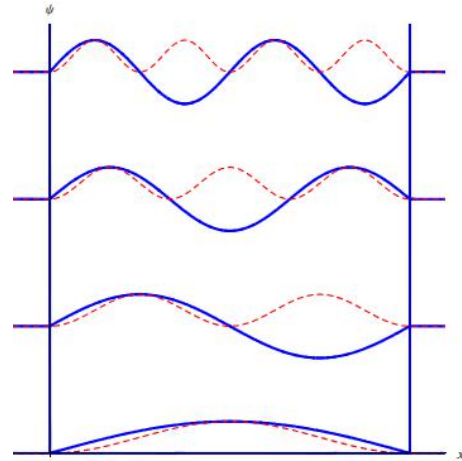


Figura 4.2: Funzioni d'onda ψ (curve blu continue) e densità di probabilità $|\psi|^2$ (curve rosse tratteggiate) per i primi 4 stati della buca di potenziale infinita.

Il valor medio $\langle x \rangle$ della posizione su uno stato stazionario è

$$\begin{aligned}\langle x \rangle &= \langle \psi_n | x | \psi_n \rangle = \frac{2}{L} \int_0^L x \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = \frac{2}{L} \left(\frac{L}{n\pi} \right)^2 \int_0^{n\pi} y \sin^2 y dy \\ &= \frac{L}{n^2 \pi^2} \int_0^{n\pi} y (1 - \cos 2y) dy = \frac{L}{n^2 \pi^2} \left(\frac{1}{2} [y^2]_0^{n\pi} - \int_0^{n\pi} y \cos 2y dy \right)\end{aligned}$$

L'integrale è valutabile per parti e fornisce

$$\langle x \rangle = \frac{L}{n^2 \pi^2} \left(\frac{n^2 \pi^2}{2} - \frac{1}{4} [\cos 2y]_0^{n\pi} - \frac{1}{2} [y \sin 2y]_0^{n\pi} \right) = \frac{L}{2}$$

cioè il valor medio della posizione della particella sta nel centro dell'intervallo ammesso e non cambia nel tempo.

4.3 Potenziale deltiforme

Si consideri una buca di potenziale molto stretta, ma anche molto profonda. Nel limite in cui la buca diventa infinitamente stretta e infinitamente profonda, il potenziale può essere simulato da una delta di Dirac

$$V(x) = -\alpha \delta(x)$$

con α costante positiva. Il segno meno davanti ad α sta a indicare che si tratta di un potenziale attrattivo. Ci chiediamo se questo potenziale ammetta stati legati (cioè nei quali il moto non può estendersi fino all'infinito) e quali siano le caratteristiche invece degli stati non legati (cioè quelli in cui il moto, provenendo dall'infinito può tornarvi per riflessione o essere trasmesso all'infinito nell'altra direzione).

L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo si scrive in questo caso

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \alpha \delta(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (4.1)$$

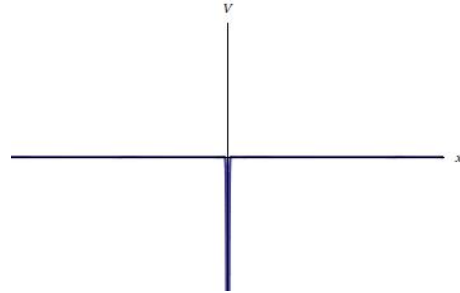


Figura 4.3: *Potenziale deltiforme attrattivo*

4.3.1 Stati legati

Cominciamo ad esaminarla per eventuali stati legati, che avremo per energie negative $E < 0$.

Per $x \neq 0$ il potenziale è identicamente nullo e l'equazione si riduce in questo caso a

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} - k^2\psi = 0$$

con

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

La soluzione generale di tale equazione è una combinazione lineare dei due esponenziali

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{-kx} + Be^{kx} & \text{per } x < 0 \\ Fe^{-kx} + Ge^{kx} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Le soluzioni fisicamente accettabili sono quelle che

- vanno a zero a $x \rightarrow \pm\infty$, perché la probabilità di trovare la particella legata al potenziale all'infinito deve essere nulla per uno stato legato, e ciò comporta $A = G = 0$.
- per le quali la funzione d'onda è continua in $x = 0$, il che comporta $B = F$.

Dunque la funzione d'onda per lo stato legato di questo sistema è

$$\psi(x) = Be^{-k|x|} = \begin{cases} Be^{kx} & \text{per } x < 0 \\ Be^{-kx} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

La normalizzazione si ottiene ponendo a 1 la norma quadrata data dall'integrale

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx = 2|B|^2 \int_0^{+\infty} e^{-2kx} dx = \frac{|B|^2}{k}$$

e quindi

$$B = \sqrt{k}$$

Perciò esiste uno e un solo stato legato del sistema con funzione d'onda normalizzata pari a

$$\psi(x) = \sqrt{k}e^{-k|x|}$$

Si noti come questa funzione sia ovunque continua e a quadrato sommabile, ma abbia derivata discontinua in $x = 0$. Ciò è dovuto al fatto che mentre la richiesta

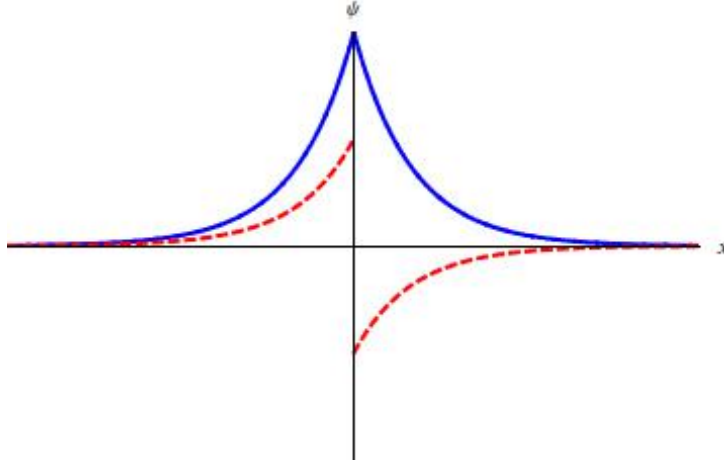


Figura 4.4: *Funzione d'onda dello stato legato nel potenziale deltiforme (curva blu continua) e sua derivata (curva rossa tratteggiata)*

di continuità per la funzione d'onda deve essere vera ovunque, per evitare che la probabilità destra in un punto sia diversa da quella sinistra, la derivata deve essere continua (per garantire una buona definizione della densità di corrente di probabilità) in tutti i punti tranne quelli in cui il potenziale è infinito, come appunto è nel nostro caso per $x = 0$.

Per elaborare meglio questo punto integriamo ambo i membri della (4.1) da $-\epsilon$ a $+\epsilon$ e poi facciamo tendere $\epsilon \rightarrow 0$

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi''(x) dx + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \delta(x) \psi(x) dx = -\frac{2mE}{\hbar^2} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \psi(x) dx$$

Il primo termine, una volta integrato, dà la derivata prima di ψ , nel secondo termine agisce la delta di Dirac e nel membro di destra avremo la primitiva di ψ , chiamiamola ϕ , che, come ψ , deve essere continua in $x = 0$

$$\psi'(\epsilon) - \psi'(-\epsilon) + \frac{2m\alpha}{\hbar^2} \psi(0) = k^2 [\phi(\epsilon) - \phi(-\epsilon)]$$

Nel limite $\epsilon \rightarrow 0$ il membro di destra si annulla, $\psi(0) = \sqrt{k}$ e

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \psi'(\pm\epsilon) = \psi'_{\pm}$$

dà le derivate destra e sinistra di ψ in $x = 0$. Quindi il salto Δ nella funzione ψ' nella sua discontinuità in $x = 0$ è dato da

$$\Delta = \psi'_+ - \psi'_- = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}\sqrt{k} \quad (4.2)$$

Se invece di avere un potenziale a delta avessimo avuto una qualunque funzione $V(x)$ finita, integrando da $-\epsilon$ a ϵ e poi mandando $\epsilon \rightarrow 0$ avremmo ottenuto, per il contributo del termine potenziale esattamente zero, il che ci avrebbe portato a dire che

$$\psi'_+ = \psi'_-$$

ovvero, ove il potenziale è finito la derivata destra e sinistra di ψ coincidono e dunque ψ è continua. Invece, nel punto da noi esaminato ora, il potenziale è infinito e la derivata della funzione d'onda presenta una discontinuità

$$\Delta = -2k\sqrt{k} \quad (4.3)$$

come si ottiene inserendo in questa espressione la forma esplicita della funzione d'onda. Comparando le (4.2) e (4.3) si ottiene

$$k = \frac{m\alpha}{\hbar^2}$$

e quindi l'esistenza di uno e un solo stato legato, qualunque sia il valore di $\alpha > 0$, avente energia

$$E = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2}$$

La densità di probabilità di trovare la particella legata in un punto x è data da

$$|\psi(x)|^2 = ke^{-2k|x|}$$

Essa decresce in modo esponenzialmente rapido man mano che x si allontana da zero, ove è massima e pari a k . Tuttavia essa non è del tutto nulla per $x \neq 0$, come ci si aspetterebbe classicamente. Rimane una certa possibilità per la particella di “tremolare” attorno alla posizione $x = 0$.

Esercizio. Calcolare $\langle x \rangle$ e $\langle p \rangle$ per questo stato. Calcolare anche Δx e Δp e verificare il principio di indeterminazione.

4.3.2 Stati del continuo

Prendiamo ora in considerazione stati in cui l'energia sia maggiore dell'energia potenziale all'infinito, cioè $E > 0$. Per $x \neq 0$ l'equazione (4.1) diventa

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

con

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} > 0$$

Essa ha soluzioni generali

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{per } x < 0 \\ Fe^{ikx} + Ge^{-ikx} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

che rappresentano onde monocromatiche procedenti da sinistra verso destra nel caso e^{ikx} e da destra verso sinistra nel caso opposto e^{-ikx} . Come sappiamo, tali onde non sono normalizzabili. Tuttavia, ricordando che l'interpretazione probabilistica sussiste per onde non normalizzabili in senso relativo, possiamo chiederci quale sia il rapporto tra un'onda incidente e una riflessa o trasmessa.

La richiesta di continuità in $x = 0$ si traduce in

$$F + G = \psi(0) = A + B$$

La derivata di questa funzione è

$$\psi'(x) = \begin{cases} ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) & \text{per } x < 0 \\ ik(Fe^{ikx} - Ge^{-ikx}) & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

e quindi

$$\Delta = ik(F - G - A + B)$$

La condizione (4.2) si traduce allora in

$$ik(F - G - A + B) = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}(A + B)$$

ovvero, posto $\beta = \frac{m\alpha}{\hbar^2 k}$

$$F - G = A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta)$$

Per fissare le idee immaginiamo un'onda piana che incida sul potenziale localizzato in $x = 0$ provenendo da sinistra (cioè da $x = -\infty$). Essa, interagendo col potenziale, può essere riflessa e tornare a $-\infty$, oppure può oltrepassare il punto $x = 0$ e procedere verso $+\infty$. In questo modello ovviamente $G = 0$, perché non consideriamo un'onda proveniente da destra, ma gli altri coefficienti sono tutti a priori diversi da zero e la precedenti condizioni diventano

$$\begin{aligned} F &= A + B \\ F &= A(1 + 2i\beta) - B(1 - 2i\beta) \end{aligned}$$

che, risolvendo in B e F danno

$$B = \frac{i\beta}{1 - i\beta}A \quad , \quad F = \frac{1}{1 - i\beta}A$$

Riassumendo, abbiamo un'onda incidente

$$\psi_{inc}(x) = Ae^{ikx}$$

un'onda riflessa

$$\psi_{rfl}(x) = Be^{-ikx}$$

e un'onda trasmessa oltre il potenziale

$$\psi_{tras}(x) = Fe^{ikx}$$

per le quali possiamo definire le densità di probabilità (in generale $\rho = |\psi|^2$)

$$\rho_{inc}(x) = |A|^2 \quad , \quad \rho_{rfl}(x) = |B|^2 \quad , \quad \rho_{tras}(x) = |F|^2$$

e le densità di correnti (o flussi) di probabilità (in generale $j = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*)$)

$$j_{inc}(x) = \frac{\hbar k}{m}|A|^2 \quad , \quad j_{rfl}(x) = \frac{\hbar k}{m}|B|^2 \quad , \quad j_{tras}(x) = \frac{\hbar k}{m}|F|^2$$

Definiamo **coefficiente di riflessione** il rapporto

$$R = \frac{j_{rfl}(x)}{j_{inc}(x)} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

del modulo quadro dell'onda riflessa rispetto a quella incidente. Questo rapporto misura che probabilità ha una particella di impulso definito $\hbar k$ (onda Ae^{ikx}) che

arriva sul potenziale deltiforme da $-\infty$ di essere riflessa indietro (onda Be^{-ikx}) verso $-\infty$.

Parimenti, definiamo **coefficiente di trasmissione** il rapporto

$$T = \frac{j_{tras}(x)}{j_{inc}(x)} = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

che misura la probabilità che la stessa particella sia invece in grado di superare il potenziale ed essere trasmessa nella regione $x > 0$ per procedere verso $+\infty$.

Grazie alle espressioni precedenti, questi due coefficienti possono essere calcolati nel potenziale deltiforme

$$R = \frac{\beta^2}{1 + \beta^2} \quad , \quad T = \frac{1}{1 + \beta^2}$$

e, ovviamente, $R + T = 1$ (l'onda incidente o è riflessa o è trasmessa).

Ricordando la legge dei grandi numeri, se invio verso un potenziale deltiforme un fascio di particelle, R darà la percentuale di quante di esse verranno riflesse indietro, mentre T ci dirà quante vengono trasmesse oltre il potenziale. Reinserendo i parametri originali al posto di β , le formule per i coefficienti di riflessione e di trasmissione per un potenziale deltiforme sono

$$R = \left(1 + \frac{2\hbar^2 E}{m\alpha^2}\right)^{-1} \quad , \quad T = \left(1 + \frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 E}\right)^{-1}$$

Si noti che il coefficiente di trasmissione cresce al crescere dell'energia.

4.4 Buca rettangolare simmetrica

Il problema di una buca unidimensionale rettangolare e simmetrica è molto importante in MQ. Molti sistemi di cui si hanno poche informazioni fisiche possono essere simulati in prima approssimazione con una tale buca. Ma essa è anche alla base della trattazione di parecchi problemi realistici, quali ad esempio le giunzioni PNP o NPN in semiconduttori, ove gli elettroni inizialmente in moto in un mezzo avente un certo potenziale di ambiente, passano in un altro materiale con potenziale diverso, per poi tornare nel mezzo iniziale. Queste applicazioni giustificano lo studio del presente modello, che ha anche una grande valenza didattica perché esemplifica molto bene cosa accade in presenza di potenziali attrattivi generici.

Si consideri dunque il potenziale definito come (fig.4.5)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } |x| \leq L \\ V_0 & \text{per } |x| > L \end{cases}$$

con V_0 costante positiva.

Il potenziale così definito è pari

$$V(x) = V(-x)$$

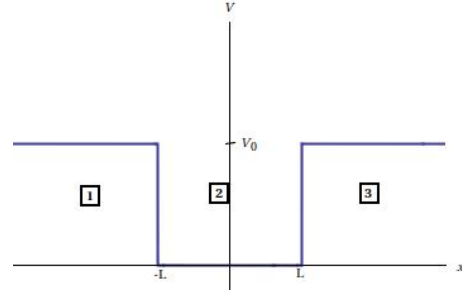


Figura 4.5: *Buca di potenziale rettangolare*

e quindi per il teorema della parità le soluzioni dovranno avere parità definita, cioè dovranno essere o pari o dispari.

4.4.1 Stati legati

Studiamo possibili stati legati, e cioè cerchiamo autovalori dell'energia che classicamente sarebbero confinati nella buca

$$0 < E < V_0$$

Come nella buca infinita, l'operatore parità attorno allo zero commuta con la hamiltoniana del sistema, quindi, poiché il problema è unidimensionale legato e perciò non degenera, le autofunzioni di H debbono essere anche autofunzioni della parità, il che implica che le soluzioni avranno parità definita (saranno funzioni pari o dispari). Separiamo lo spazio in tre regioni

$$\begin{aligned} \boxed{1} &= (-\infty, -L) \\ \boxed{2} &= (-L, L) \\ \boxed{3} &= (L, +\infty) \end{aligned}$$

Si troveranno le soluzioni dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo nelle tre regioni e si imporrà la continuità delle autofunzioni e delle loro derivate prime. L'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo è

$$\begin{aligned} \text{regioni } \boxed{1} \text{ e } \boxed{3} &\rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} - \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\psi = 0 \\ \text{regione } \boxed{2} &\rightarrow \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi = 0 \end{aligned}$$

ovvero, ponendo

$$\eta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad , \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$$\begin{array}{ll} \text{regioni } \boxed{1} \text{ e } \boxed{3} & \rightarrow \quad \psi'' - \eta^2 \psi = 0 \\ \text{regione } \boxed{2} & \rightarrow \quad \psi'' + k^2 \psi = 0 \end{array}$$

Le soluzioni generali sono

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ce^{\eta x} + De^{-\eta x} \\ \psi_2(x) &= A \cos kx + B \sin kx \\ \psi_3(x) &= Fe^{\eta x} + Ge^{-\eta x} \end{aligned}$$

La richiesta che lo stato sia legato, cioè che all'infinito le soluzioni si annullino porta a $D = F = 0$.

Poiché le soluzioni debbono essere pari o dispari, possiamo subito dividerle in due classi:

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$\psi_1(x) = Ce^{\eta x}$	$\psi_1(x) = -Ce^{\eta x}$
$\psi_2(x) = A \cos kx$	$\psi_2(x) = B \sin kx$
$\psi_3(x) = Ce^{-\eta x}$	$\psi_3(x) = Ce^{-\eta x}$

Si noti che abbiamo posto $G = C$ nel caso pari e $G = -C$ in quello dispari per rispettare la simmetria. Conseguentemente le derivate sono

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$\psi'_1(x) = C\eta e^{\eta x}$	$\psi'_1(x) = -C\eta e^{\eta x}$
$\psi'_2(x) = -Ak \sin kx$	$\psi'_2(x) = Bk \cos kx$
$\psi'_3(x) = -C\eta e^{-\eta x}$	$\psi'_3(x) = -C\eta e^{-\eta x}$

Imponiamo la continuità di ψ e di ψ' in $x = L$. In $x = -L$ avremo, per simmetria, le stesse condizioni

$$\begin{aligned} \psi_2(L) &= \psi_3(L) \\ \psi'_2(L) &= \psi'_3(L) \end{aligned}$$

che in pratica si traducono in

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$A \cos kL = Ce^{-\eta L}$	$B \sin kL = Ce^{-\eta L}$
$-Ak \sin kL = -C\eta e^{-\eta L}$	$Bk \cos kL = -C\eta e^{-\eta L}$

Dividendo tra loro queste condizioni si ha

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$\cot kL = \frac{k}{\eta} > 0$	$\tan kL = -\frac{k}{\eta} < 0$

Le disequaglianze vengono dal fatto che sia k che η sono positive per definizione. Per risolvere queste equazioni, conviene introdurre

$$\xi = kL$$

con il che, elevando al quadrato

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$\cot^2 \xi = \frac{\cos^2 \xi}{\sin^2 \xi} = \frac{k^2}{\eta^2}$	$\tan^2 \xi = \frac{\sin^2 \xi}{\cos^2 \xi} = \frac{k^2}{\eta^2}$

Ricordando le definizioni di k e η poi

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$\frac{\cos^2 \xi}{1 - \cos^2 \xi} = \frac{E}{V_0 - E}$	$\frac{\sin^2 \xi}{1 - \sin^2 \xi} = \frac{E}{V_0 - E}$

ovvero

<u>caso pari</u>	<u>caso dispari</u>
$\cos^2 \xi = \frac{E}{V_0}$	$\sin^2 \xi = \frac{E}{V_0}$

Poiché

$$\frac{E}{V_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2mV_0} = \frac{\hbar^2 (kL)^2}{2mV_0 L^2} = \alpha^2 \xi^2$$

dove la costante α vale

$$\alpha^2 = \frac{\hbar^2}{2mV_0 L^2}$$

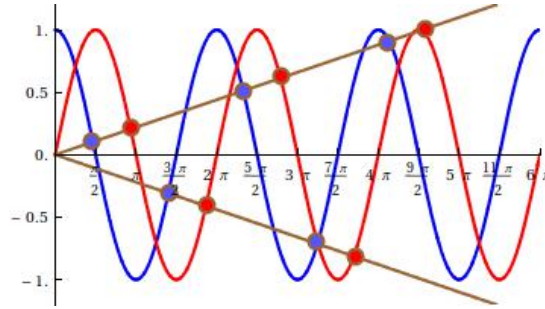


Figura 4.6: Soluzioni pari (blu) e dispari (rosso) per la buca rettangolare. Le intersezioni segnate da pallini sono quelle accettabili.

le equazioni diventano

caso pari

$$\cos^2 \xi = \alpha^2 \xi^2$$

caso dispari

$$\sin^2 \xi = \alpha^2 \xi^2$$

Si può ora estrarre la radice quadrata, ricordando però di togliere le radici spurie introdotte elevando al quadrato. Questo viene fatto tenendo conto delle richieste che $\cot \xi > 0$ e $\tan \xi < 0$.

caso pari

$$\cos \xi = \pm \alpha \xi$$

$$\cot \xi > 0$$

$$\text{ovvero } k\pi < \xi < (2k+1)\frac{\pi}{2}$$

$$\text{con } k = 0, 1, 2, \dots$$

caso dispari

$$\sin \xi = \pm \alpha \xi$$

$$\tan \xi < 0$$

$$\text{ovvero } (2k-1)\frac{\pi}{2} < \xi < k\pi$$

$$\text{con } k = 1, 2, 3, \dots$$

Le soluzioni di tali equazioni trascendenti possono essere trovate di solito solo numericamente. Non siamo qui interessati ai valori numerici precisi delle energie del sistema, piuttosto vogliamo sapere se e quanti stati legati ci sono. Una buona idea di cosa succede si può ottenere tracciando i grafici delle curve $\cos \xi$ e $\pm \alpha \xi$ nel caso pari e $\sin \xi$ e $\pm \alpha \xi$ in quello dispari e trovandone la loro intersezione (fig.4.6).

Da questi grafici si possono agevolmente contare il numero di soluzioni e perciò di stati legati del sistema. Mentre per $\alpha > \frac{2}{\pi}$, cioè per buche sufficientemente larghe e poco profonde, si può avere assenza di soluzioni dispari, una soluzione pari appare

sempre. Dunque la buca, per quanto poco pronunciata, ha sempre almeno uno stato legato.

Le soluzioni sono sempre alternativamente pari e dispari, cominciando dallo stato fondamentale (quello di energia più bassa) che è sempre pari. L'analisi grafica ci permette anche di comprendere che i possibili stati legati sono in numero finito. Infatti a un certo punto le rette $\pm\alpha\xi$ diventano rispettivamente maggiori di 1 o minori di -1 e perciò non possono più intersecare seni e coseni. Ciò dipende dalla pendenza di queste rette, cioè da α .

- Per α molto grande, cioè per

$$V_0 L^2 \ll \frac{\hbar^2}{2m}$$

(bucca più larga che profonda) le due rette sono molto pendenti e solo quella positiva sicuramente incontra il coseno una sola volta. Buche di questo tipo hanno un solo stato legato fondamentale pari.

- Viceversa, per α molto piccolo, cioè per

$$V_0 L^2 \gg \frac{\hbar^2}{2m}$$

(bucca più profonda che larga) le rette sono poco pendenti e intersecano seno e coseno moltissime volte prima di uscire dalla banda $(-1, 1)$. Al limite, le due rette diventano piatte e intersecano seno e coseno in tutti i loro zeri, selezionandone la metà per via delle restrizioni su tangente e cotangente. In questo limite si riproducono esattamente le formule della buca infinita.

Sia ξ_n una soluzione delle equazioni trascendenti, con parità $(-1)^n$. Immettendo questo valore nelle definizioni precedenti si ricavano i valori dei parametri

$$k_n = \frac{\xi_n}{L} \quad , \quad \eta_n = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n)}}{\hbar}$$

dove E_n sono i livelli energetici degli stati legati

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2mL^2} \xi_n^2$$

Le autofunzioni si ottengono fissando le costanti della soluzione generale grazie alla continuità in L

caso pari

$$A \cos k_n L = C e^{-\eta_n L}$$

$$\text{ovvero } C = A \cos k_n L \cdot e^{\eta_n L}$$

caso dispari

$$B \sin k_n L = C e^{-\eta_n L}$$

$$\text{ovvero } C = B \sin k_n L \cdot e^{\eta_n L}$$

Rimane una sola costante (A o B) che può essere fissata dalla normalizzazione.

4.4.2 Stati del continuo

Prendiamo ora in considerazione gli stati con $E > V_0$, che classicamente sarebbero gli stati non legati. In questo caso l'equazione di Schrödinger diventa

$$\begin{aligned} \text{nelle regioni } \boxed{1} \text{ e } \boxed{3} &\rightarrow \psi'' + q^2 \psi = 0 \\ \text{nella regione } \boxed{2} &\rightarrow \psi'' + k^2 \psi = 0 \end{aligned}$$

con

$$q = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

e ammette quindi in tutte e tre le regioni delle soluzioni oscillanti.

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{iqx} + B e^{-iqx} & \text{nella regione } \boxed{1} \\ C e^{ikx} + D e^{-ikx} & \text{nella regione } \boxed{2} \\ F e^{iqx} + G e^{-iqx} & \text{nella regione } \boxed{3} \end{cases}$$

Come già fatto nel caso del potenziale deltiforme, scegliamo una configurazione in cui una particella asintoticamente libera e di definito impulso $\hbar q$ incide sul potenziale provenendo da $x = -\infty$. Ciò significa che scegliamo $G = 0$ come condizione iniziale.

Come sempre, le onde piane non sono normalizzabili, ma ci interesseremo al calcolo dei coefficienti di riflessione e di trasmissione

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2}, \quad T = \frac{|F|^2}{|A|^2}$$

Le derivate delle ψ sono

$$\psi'(x) = \begin{cases} iq(A e^{iqx} - B e^{-iqx}) & \text{nella regione } \boxed{1} \\ ik(C e^{ikx} - D e^{-ikx}) & \text{nella regione } \boxed{2} \\ iq F e^{iqx} & \text{nella regione } \boxed{3} \end{cases}$$

e imponiamo le condizioni di continuità in $\pm L$ per ψ e ψ'

$$\psi_2(\pm L) = \psi_3(\pm L) \quad , \quad \psi_2'(\pm L) = \psi_3'(\pm L)$$

I conti che scaturiscono da queste condizioni sono piuttosto pesanti e quindi li omettiamo in questa trattazione. Citiamo tuttavia i risultati per il calcolo dei coefficienti di riflessione e trasmissione

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sin^2 2qL}{4E(E + V_0)}\right)^{-1} \quad , \quad R = \left(1 + \frac{4E(E + V_0)}{V_0^2 \sin^2 2qL}\right)^{-1}$$

Ovviamente $T + R = 1$. Si noti che quando $\sin 2qL = 0$, cioè per

$$q = q_n = \frac{n\pi}{2L}$$

il coefficiente di trasmissione diventa pari a 1 e non c'è riflessione. Per questi valori dell'impulso dell'onda incidente, essa viene totalmente trasmessa e non c'è per niente onda riflessa. Le energie corrispondenti a questi stati a trasmissione totale sono

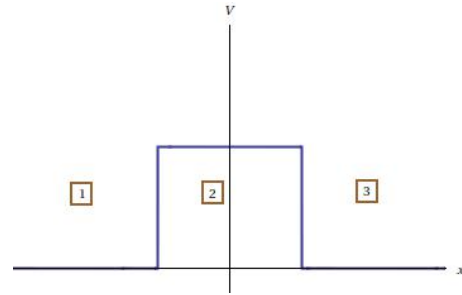
$$E_n = \frac{\hbar^2 q_n^2}{2m} - V_0 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8mL^2} - V_0$$

e costituiscono, in un certo senso, una continuazione dei livelli discreti della buca nella regione delle energie continue. Ad essi ci si riferisce talvolta come ai *livelli virtuali* della buca e i corrispondenti stati vengono detti *stati virtuali*.

4.5 Barriera di potenziale: l'effetto tunnel

Studiamo ora un problema analogo a quello della buca rettangolare, ma in un certo senso ad essa opposto: il problema della barriera finita di potenziale, ovvero di un potenziale (fig.4.7)

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } |x| > L \\ V_0 & \text{per } |x| \leq L \end{cases}$$



con $V_0 > 0$. Ovviamente in questo problema non ci aspettiamo stati legati e lo

Figura 4.7: Barriera di potenziale rettangolare

scopo è quello di calcolare i coefficienti di riflessione e trasmissione per onde incidenti.

Classicamente ci attendiamo che una particella proveniente da $x = -\infty$ può procedere verso $x = +\infty$ solo se la sua energia è $E > V_0$. In caso contrario la particella rimbalza contro la barriera di potenziale e viene riflessa verso $-\infty$. Ci chiediamo quale sia il comportamento quantistico di questo sistema. Nel caso $E > V_0$ non ci attendiamo grosse novità rispetto alle soluzioni del continuo della buca rettangolare: esisterà un fenomeno di trasmissione e riflessione parziale delle onde. Il caso interessante qui è invece quello, che andremo a studiare in dettaglio, di $0 < E < V_0$, cioè di quelle energie che classicamente non permetterebbero alla particella proveniente dalla regione $\boxed{1}$ di procedere nella regione $\boxed{3}$.

Per $E < V_0$ l'equazione di Schrödinger diventa

$$\begin{aligned} \text{regioni } \boxed{1} \text{ e } \boxed{3} &\rightarrow \psi'' + k^2\psi = 0 \\ \text{regione } \boxed{2} &\rightarrow \psi'' - \eta^2\psi = 0 \end{aligned}$$

con

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad , \quad \eta = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Le soluzioni sono dunque funzioni oscillanti nelle regioni $\boxed{1}$ e $\boxed{3}$ e come nei casi precedenti prendiamo l'onda incidente proveniente da $-\infty$. Nella regione $\boxed{2}$ avremo invece soluzioni esponenziali smorzate. La soluzione che ci interessa è dunque

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{nella regione } \boxed{1} \\ Ce^{\eta x} + De^{-\eta x} & \text{nella regione } \boxed{2} \\ Fe^{ikx} & \text{nella regione } \boxed{3} \end{cases}$$

e la sua derivata prima

$$\psi'(x) = \begin{cases} ik(Ae^{ikx} - Be^{-ikx}) & \text{nella regione } \boxed{1} \\ \eta(Ce^{\eta x} - De^{-\eta x}) & \text{nella regione } \boxed{2} \\ ikFe^{ikx} & \text{nella regione } \boxed{3} \end{cases}$$

Imponendo la continuità di ψ e ψ' in $x = L$ troviamo

$$\begin{aligned} Ce^{\eta L} + De^{-\eta L} &= Fe^{ikL} \\ \eta(Ce^{\eta L} - De^{-\eta L}) &= ikFe^{ikL} \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} C &= \frac{F}{2} \left(1 + \frac{ik}{\eta} \right) e^{(ik-\eta)L} \\ D &= \frac{F}{2} \left(1 - \frac{ik}{\eta} \right) e^{(ik+\eta)L} \end{aligned}$$

mentre la continuità in $-L$ fornisce

$$\begin{aligned} Ae^{-ikL} + Be^{ikL} &= Ce^{-\eta L} + De^{\eta L} \\ ik(Ae^{-ikL} - Be^{ikL}) &= \eta(Ce^{-\eta L} - De^{\eta L}) \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} A &= \frac{C}{2} \left(1 + \frac{ik}{\eta} \right) e^{(ik-\eta)L} + \frac{D}{2} \left(1 - \frac{ik}{\eta} \right) e^{(ik+\eta)L} \\ B &= \frac{C}{2} \left(1 - \frac{ik}{\eta} \right) e^{(-ik-\eta)L} + \frac{D}{2} \left(1 + \frac{ik}{\eta} \right) e^{(-ik+\eta)L} \end{aligned}$$

Sostituendo poi a C e D in queste ultime espressioni i loro valori ottenuti dalla continuità in L si ottiene

$$\begin{aligned} A &= \frac{F}{4ik\eta} e^{2ikL} [(\eta + ik)^2 e^{-2\eta L} - (\eta - ik)^2 e^{2\eta L}] \\ B &= \frac{F}{2ik\eta} (\eta^2 + k^2) \sinh 2\eta L \end{aligned}$$

È ora possibile calcolare il modulo quadro di A e B

$$\begin{aligned} |A|^2 &= \frac{|F|^2}{4\sigma^2} [4\sigma^2 + (1 + \sigma^2)^2 \sinh^2 2\eta L] \\ |B|^2 &= \frac{|F|^2}{4\sigma^2} (1 + \sigma^2)^2 \sinh^2 2\eta L \end{aligned}$$

in cui si è posto

$$\sigma^2 = \frac{\eta^2}{k^2} = \frac{V_0 - E}{E}$$

Da qui è immediato trovare i coefficienti di riflessione e trasmissione

$$\begin{aligned} R &= \frac{(1 + \sigma^2)^2 \sinh 2\eta L}{4\sigma^2 + (1 + \sigma^2)^2 \sinh^2 2\eta L} \\ T &= \frac{4\sigma^2}{4\sigma^2 + (1 + \sigma^2)^2 \sinh^2 2\eta L} \end{aligned}$$

Come al solito, $R + T = 1$.

Il risultato qui ottenuto è sorprendente e importantissimo. Contrariamente alla fisica classica, la particella in MQ può passare attraverso la barriera di potenziale anche se la sua energia non sarebbe sufficiente a superarla! Il coefficiente di trasmissione è molto sensibile al valore di

$$\eta L = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} L$$

che lega insieme i valori fisici in gioco, cioè la massa m della particella, il dislivello di energia $V_0 - E$, la larghezza $2L$ della barriera e la costante di Planck \hbar .

Un banale conto con quantità macroscopiche mostra quale sia l'effettiva incidenza del coefficiente di trasmissione nei fenomeni della fisica quotidiana. Prendiamo per esempio

- $m \sim 10^6 \text{g}$ = massa di una automobile
- $2L \sim 100 \text{m} = 10^5 \text{cm}$ = larghezza e $a = 50 \text{m} = 5 \cdot 10^3 \text{cm}$ = altezza di una collina che schematizziamo come una barriera di potenziale gravitazionale rettangolare, perciò con $V_0 = mga = 981 \cdot 5 \cdot 10^9 \text{g} \cdot \text{cm}^2/\text{s}^2 \sim 5 \cdot 10^{12} \text{erg}$.
- $E = \frac{1}{2}mv^2 \sim 5 \cdot 10^{12} \text{erg}$ di energia cinetica dell'auto che si suppone viaggiare a $100 \text{Km/h} \sim 3 \cdot 10^3 \text{cm/s}$, quindi dello stesso ordine di grandezza del potenziale. Supponiamo che l'auto arrivi quasi in cima alla collina ma non riesca a superarla per un'inezia, diciamo $V_0 - E \sim 1 \text{ erg}$.

ricordando $\hbar \sim 10^{-27} \text{erg} \cdot \text{s}$ e inserendo i dati nella formula per T si ottiene

$$T \sim 10^{-6 \cdot 10^{33}}$$

dunque la totale impossibilità pratica che una automobile riesca a superare la collina sebbene le manchi solo una quantità risibile (1 erg) di energia.

Invece se si inseriscono dati tipici di un sistema quantistico, per esempio di un elettrone, cioè

- massa $m \sim 10^{-27} \text{g}$
- larghezza della buca di dimensioni atomiche $\sim 10^{-8} \text{cm}$
- potenziali dell'ordine di $\sim 10 \text{eV}$, come quelli di ionizzazione atomici, con per esempio $V_0 - E \sim 1 \text{eV}$

la probabilità che la particella attraversi la barriera è

$$T \approx \frac{2}{3}$$

La probabilità che ha un elettrone di superare la barriera, sebbene la sua energia sia di $1/10$ inferiore a quella necessaria per superare classicamente la barriera, risulta in questo caso doppia della probabilità che esso sia riflesso.

Questo fenomeno, noto come **effetto tunnel** è forse a tutt'oggi il più sfruttato della MQ in applicazioni tecnologiche. Esso sta infatti alla base di applicazioni nel campo dell'elettronica che sono venute a far parte della nostra vita quotidiana, come la realizzazione di componenti elettronici quali per esempio i *diodi*. Che ci sia della MQ dentro ogni nostro computer, televisore o telefonino è uno dei grandi trionfi di questa difficile ma utilissima teoria.

4.6 Oscillatore armonico

L'oscillatore armonico è il moto unidimensionale di un punto materiale di massa m in un potenziale della forma

$$V(x) = \frac{1}{2}kx^2$$

e quindi soggetta a una forza descritta dalla legge di Hooke delle forze elastiche

$$F = -\frac{dV}{dx} = -kx$$

e infatti nacque come modello per lo studio di molle e pendoli.

Il moto classico, descritto dall'equazione di Newton

$$m\ddot{x} + kx = 0$$

è noto corrispondere a un andamento oscillatorio

$$x(t) = A \sin(\omega t + \beta)$$

di frequenza

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$$

e ampiezza A legata all'energia totale E del sistema

$$A = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

Esso riveste grande importanza in meccanica classica a causa del fatto che qualunque moto di un sistema lagrangiano nell'intorno di una posizione di equilibrio stabile è approssimabile proprio da un oscillatore armonico. È dunque naturale domandarsi come questo sistema si comporti in presenza della quantizzazione.

L'oscillatore armonico quantistico riveste una importanza ancora maggiore di quello classico. Esso è infatti alla base di una enorme quantità di problemi quantistici. Basti pensare a tutte le “piccole vibrazioni” attorno a posizioni di equilibrio stabile che si possono avere in MQ: atomi che si muovono attorno alla loro posizione di equilibrio in molecole (per esempio le vibrazioni relative dei due nuclei della molecola H_2) oppure degli atomi attorno alla loro posizione di equilibrio in un cristallo (fononi).

Il formalismo degli operatori di innalzamento e abbassamento, che nasce nella trattazione operatoriale dell'oscillatore armonico, ha aperto la strada alla trattazione operatoriale di moltissimi sistemi, portando alla fondazione della Teoria dei campi quantistici, che è la base di spiegazione di tutti i fenomeni di fisica particellare oggi noti e sperimentabili.

Insomma, siamo di fronte al primo vero modello quantistico di ampio respiro che si possa risolvere esattamente in MQ.

L'hamiltoniana dell'oscillatore armonico unidimensionale è dunque

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

oppure, in forma realizzata sullo spazio delle coordinate

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Si tratta di una hamiltoniana pari e perciò le sue soluzioni sono pari o dispari. Esse dovranno annullarsi all'infinito ove il potenziale diverge e pertanto proibisce la presenza della particella. Ci aspettiamo dunque che gli stati dell'oscillatore armonico siano tutti legati e quindi non degeneri e discreti. Inoltre, per il teorema del minimo, gli autovalori dell'hamiltoniana saranno tutti positivi.

Ci sono almeno due modi di studiare la quantizzazione di un oscillatore armonico. Data la loro rilevanza li esamineremo entrambi.

4.6.1 Metodo algebrico

Il primo metodo è di importanza cruciale per gli sviluppi relativi alla teoria dei campi e a buona parte della fisica moderna e fa uso degli operatori e stati astratti nello spazio di Hilbert.

Consideriamo dunque l'equazione agli autovalori

$$H|\nu\rangle = E_\nu|\nu\rangle$$

dove $|\nu\rangle$ saranno gli autovettori, che sappiamo già essere in numero discreto e non degeneri (dunque non c'è bisogno di altro numero quantico all'infuori di E_ν per identificarli univocamente). Essi saranno, per note proprietà degli operatori hermitiani tutti ortogonali tra loro e li supporremo ortonormalizzati

$$\langle\nu|\nu'\rangle = \delta_{\nu,\nu'}$$

È conveniente introdurre nuovi operatori adimensionali

$$\tilde{p} = \frac{p}{\sqrt{m\hbar\omega}} \quad , \quad \tilde{x} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$$

per i quali le relazioni di commutazione canoniche $[x, p] = i\hbar$ diventano

$$[\tilde{x}, \tilde{p}] = i$$

e l'hamiltoniana può essere posta nella forma

$$H = \hbar\omega\tilde{H}$$

con

$$\tilde{H} = \frac{1}{2}(\tilde{p}^2 + \tilde{x}^2)$$

e l'equazione agli autovalori diventa

$$\tilde{H}|\nu\rangle = \varepsilon_\nu|\nu\rangle$$

con $E_\nu = \hbar\omega\varepsilon_\nu$.

Si definiscano ora gli operatori (non hermitiani)

$$a = \frac{\tilde{x} + i\tilde{p}}{\sqrt{2}} \quad , \quad a^\dagger = \frac{\tilde{x} - i\tilde{p}}{\sqrt{2}i}$$

o, in forma inversa

$$\tilde{x} = \frac{a^\dagger + a}{\sqrt{2}} \quad , \quad \tilde{p} = \frac{a^\dagger - a}{\sqrt{2}}$$

Un semplice calcolo mostra che

$$[a, a^\dagger] = 1$$

Inoltre possiamo calcolare $\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$

$$\mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} = \frac{1}{2}(\tilde{x} - i\tilde{p})(\tilde{x} + i\tilde{p}) = \frac{1}{2}(\tilde{x}^2 + i[\tilde{x}, \tilde{p}] + \tilde{p}^2) = \tilde{H} - \frac{1}{2}$$

perciò possiamo riscrivere l'hamiltoniana adimensionale semplicemente in termini di questi operatori come

$$\tilde{H} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} + \frac{1}{2}$$

Introduciamo ora l'ulteriore operatore hermitiano

$$\mathbf{N} = \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a}$$

con il quale l'hamiltoniana diventa semplicemente

$$\tilde{H} = \mathbf{N} + \frac{1}{2}$$

\mathbf{N} commuta ovviamente con \tilde{H} . I commutatori di \mathbf{N} con \mathbf{a} e \mathbf{a}^\dagger sono particolarmente interessanti

$$\begin{aligned} [\mathbf{N}, \mathbf{a}] &= -\mathbf{a} \\ [\mathbf{N}, \mathbf{a}^\dagger] &= \mathbf{a}^\dagger \end{aligned}$$

Consideriamo l'equazione agli autovalori per \mathbf{N} . Poiché esso commuta con l'hamiltoniana, può essere diagonalizzato simultaneamente ad essa e ha gli stessi autovettori

$$\mathbf{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

e una volta trovati gli autovalori di \mathbf{N} quelli dell'hamiltoniana sono

$$\varepsilon_\nu = \nu + \frac{1}{2} \quad \Longrightarrow \quad E_\nu = \hbar\omega \left(\nu + \frac{1}{2} \right)$$

Per risolvere l'equazione agli autovalori e determinare lo spettro di \hat{N} si procede con un insieme di osservazioni che conduce necessariamente al risultato:

1. Lo spettro ν è tutto positivo o al più nullo. Infatti

$$\nu = \langle \nu | \mathbf{N} | \nu \rangle = \langle \nu | \mathbf{a}^\dagger \mathbf{a} | \nu \rangle$$

ma, detto $|\psi\rangle = \mathbf{a}|\nu\rangle$ questo coincide con la norma quadrata $\langle \psi | \psi \rangle \geq 0$ e quindi

$$\nu \geq 0$$

2. In particolare, detto $|0\rangle$ un eventuale autovettore di \mathbf{N} per $\nu_0 = 0$

$$\mathbf{N}|0\rangle = 0|0\rangle = 0$$

(da non confondersi col vettore nullo) avremo che $\mathbf{a}|0\rangle = 0$. Infatti

$$\|\mathbf{a}|0\rangle\|^2 = \langle 0|\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}|0\rangle = \langle 0|\mathbf{N}|0\rangle = 0$$

e l'unico vettore in \mathcal{H} a norma nulla è il vettore nullo. Viceversa, sia $|\phi\rangle$ un vettore tale che $\mathbf{a}|\phi\rangle = 0$. Moltiplicando a sinistra per \mathbf{a}^\dagger avremo $\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}|\phi\rangle = \mathbf{N}|\phi\rangle = 0$ e perciò $|\phi\rangle$ è autovettore di \mathbf{N} con autovalore 0: $|\phi\rangle \propto |0\rangle$.

3. Lo stato $\mathbf{a}|\nu\rangle$ appartiene all'autospazio di $\nu - 1$. Infatti consideriamo l'azione di \mathbf{N} su $|\psi\rangle = \mathbf{a}|\nu\rangle$, utilizzando il commutatore $[\mathbf{N}, \mathbf{a}] = -\mathbf{a}$

$$\mathbf{N}|\psi\rangle = \mathbf{N}\mathbf{a}|\nu\rangle = \mathbf{a}\mathbf{N}|\nu\rangle - \mathbf{a}|\nu\rangle = (\nu - 1)|\psi\rangle$$

Dunque, poiché ci aspettiamo che gli autostati dell'oscillatore armonico siano non degeneri, avremo necessariamente

$$\mathbf{a}|\nu\rangle \propto |\nu - 1\rangle$$

Supponendo che sia $|\nu\rangle$ che $|\nu - 1\rangle$ siano normalizzati, avremo che

$$\|\mathbf{a}|\nu\rangle\| = \sqrt{\langle \nu|\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}|\nu\rangle} = \sqrt{\langle \nu|\mathbf{N}|\nu\rangle} = \sqrt{\nu}$$

e dunque

$$\boxed{\mathbf{a}|\nu\rangle = \sqrt{\nu}|\nu - 1\rangle}$$

4. Analogamente, $|\chi\rangle = \mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle$ appartiene all'autospazio di $\nu + 1$

$$\mathbf{N}|\chi\rangle = \mathbf{N}\mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle = \mathbf{a}^\dagger\mathbf{N}|\nu\rangle + \mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle = (\nu + 1)|\chi\rangle$$

e quindi

$$\mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle \propto |\nu + 1\rangle$$

Calcolando la norma

$$\|\mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle\| = \sqrt{\langle \nu|\mathbf{a}\mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle} = \sqrt{\langle \nu|\mathbf{a}^\dagger\mathbf{a}|\nu\rangle + \langle \nu|\nu\rangle} = \sqrt{\nu + 1}$$

perveniamo in questo caso a

$$\boxed{\mathbf{a}^\dagger|\nu\rangle = \sqrt{\nu + 1}|\nu + 1\rangle}$$

5. Supponiamo per assurdo che esista un autovalore ν di \mathbf{N} non intero

$$\mathbf{N}|\nu\rangle = \nu|\nu\rangle$$

Chiamiamo n la parte intera di ν : $[\nu] = n$. Applicando \mathbf{a} ottengo un vettore proporzionale a $|\nu-1\rangle$, che avrà autovalore $\nu-1$ e così via, dopo n applicazioni

$$\mathbf{a}^n|\nu\rangle \propto |\nu-n\rangle$$

Ora se applico nuovamente \mathbf{a} a questo vettore, ottengo un vettore proporzionale a un autovettore con autovalore negativo, il che è escluso poiché deve essere $\nu \geq 0$. Dunque abbiamo dimostrato per assurdo che lo spettro di \mathbf{N} è costituito da interi non negativi.

6. Se \mathbf{N} non è l'operatore nullo, avrà allora almeno un autovalore intero n diverso da 0. Prendendo questo e applicando ripetutamente \mathbf{a} , si generano nuovi stati proporzionali ad autovettori di \mathbf{N} con autovalori $n-1, n-2, \dots$ fino ad arrivare a 0, sul quale una ulteriore applicazione di \mathbf{a} crea il vettore nullo e quindi tronca la sequenza. Dunque l'autovettore $|0\rangle$ esiste ed è quello con autovalore di \mathbf{N} più basso possibile. Ripartendo ora da $|0\rangle$ con applicazioni ripetute di \mathbf{a}^\dagger possiamo ricostruire l'intero spettro di \mathbf{N} che è evidentemente costituito da tutti gli interi n . Gli autospazi corrispondenti a tali autovalori n , che indicheremo con $|n\rangle$, sono tutti non-degeneri, perciò la soluzione dell'equazione agli autovalori di \mathbf{N} è

$$\mathbf{N}|n\rangle = n|n\rangle \quad \text{con} \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Ora che abbiamo stabilito lo spettro di \mathbf{N} è banale tornare all'originale problema dello spettro dell'hamiltoniana

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \left(\mathbf{N} + \frac{1}{2} \right)$$

e affermare che gli autovalori possibili per l'hamiltoniana sono

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$$

Lo stato fondamentale $|0\rangle$ (detto spesso stato di **vuoto**, per un motivo che sarà chiaro tra breve) ha dunque una energia non nulla, che sarà chiamata **energia del vuoto**

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega$$

il che potrebbe sembrare sorprendente dal punto di vista classico, ma non se si tiene conto del principio di indeterminazione: una particella con energia 0 sarebbe infatti costretta a giacere esattamente sul minimo di potenziale $x = 0$, dunque avrebbe una posizione perfettamente stabilita e non dovrebbe presentare alcuna vibrazione, quindi dovrebbe avere energia cinetica e velocità nulla. Il suo impulso dunque sarebbe anch'esso ben definito $p = 0$, il che contraddice in principio di indeterminazione, che si salva invece proprio grazie all'esistenza di una energia non nulla per lo stato fondamentale.

Dalla formula per gli autovalori è immediato rendersi conto che gli stati successivi a $|0\rangle$ sono tutti tra loro separati per l'aggiunta di un quanto di energia $\hbar\omega$. Da qui il nome a prima vista curioso di **operatore di creazione** per a^\dagger , che innalza dallo stato $|n\rangle$ allo stato $|n+1\rangle$, ovvero “crea” un quanto $\hbar\omega$ da aggiungere all'energia di $|n\rangle$ per ottenere quella di $|n+1\rangle$.

Analogamente l'operatore a “toglie” un quanto $\hbar\omega$ a uno stato $|n\rangle$ per ottenere l'energia dello stato $|n-1\rangle$ e per questo motivo viene chiamato **operatore di distruzione**.

L'operatore $N = a^\dagger a$ applicato a uno stato $|n\rangle$ ci dice il numero n di quanti $\hbar\omega$ che esso contiene in aggiunta all'energia del vuoto. Seguendo Planck, possiamo pensare a questi quanti come a particelle create dall'operatore a^\dagger a partire da uno stato fondamentale che ne contiene 0 e che per questo motivo viene chiamato “vuoto” (sebbene abbia una energia residua per non violare il principio di indeterminazione, appunto l'energia del vuoto). All'operatore N viene spesso dato il nome di **operatore numero di quanti**.

4.6.2 Metodo analitico

Scriviamo l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo nello spazio delle coordinate

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi = E\psi$$

Convieni introdurre, analogamente a quanto fatto nel metodo algebrico, una opportuna variabile adimensionale

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$$

e introdurre la costante $\varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}$, anch'essa adimensionale, con il che l'equazione diventa

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} = (\xi^2 - \varepsilon)\psi \quad (4.4)$$

Questa equazione non è fuchsiana a causa della singolarità essenziale all'infinito. Tuttavia possiamo studiare meglio questo comportamento all'infinito considerando l'equazione asintotica in cui ξ è considerato molto grande cosicché ε possa essere trascurato rispetto a ξ^2

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} \approx \xi^2\psi \quad (4.5)$$

Proviamo a scrivere la soluzione asintotica come

$$\psi(\xi) \approx Ae^{a\xi^2}\xi^\rho [1 + O(\xi^{-1})]$$

Calcolando le derivate

$$\begin{aligned} \psi' &= 2Aa\xi e^{a\xi^2}\xi^\rho [1 + O(\xi^{-1})] \\ \psi'' &= A(2a + (2a\xi)^2) e^{a\xi^2}\xi^\rho [1 + O(\xi^{-1})] = (2a + (2a\xi)^2) \psi \end{aligned}$$

e inserendo nella (4.5), otteniamo

$$2a + 4a^2\xi^2 = \xi^2$$

da cui la condizione (si ricordi che siamo sempre in regime $\xi \rightarrow \infty$ e quindi il termine $2a$ è trascurabile rispetto agli altri due)

$$4a^2 = 1$$

che determina $a = \pm 1/2$, mentre A resta come costante arbitraria. Quindi la soluzione generale della (4.5) è

$$\psi \approx Ae^{-\frac{\xi^2}{2}} + Be^{\frac{\xi^2}{2}}$$

La soluzione $\psi = e^{\xi^2/2}$ non è accettabile perché diverge all'infinito, mentre noi vogliamo funzioni d'onda che si annullino all'infinito per descrivere stati legati. Perciò assumiamo che asintoticamente la soluzione sia del tipo

$$\psi \approx Ae^{-\xi^2/2}$$

e che quindi la soluzione dell'equazione completa (4.4) sia

$$\psi(\xi) = Ae^{-\xi^2/2}H(\xi)$$

con $H(\xi)$ che ha l'andamento asintotico

$$H(\xi) \approx \xi^\rho [1 + O(\xi^{-1})] \quad (4.6)$$

Tenendo presente che

$$\begin{aligned}\psi'(\xi) &= A(-\xi H + H')e^{-\xi^2/2} \\ \psi''(\xi) &= A(\xi^2 H - 2\xi H' - H + H'')e^{-\xi^2/2}\end{aligned}$$

sostituendo nella (4.4) si ottiene l'equazione per $H(\xi)$

$$\frac{d^2 H}{d\xi^2} - 2\xi \frac{dH}{d\xi} + (\varepsilon - 1)H = 0 \quad (4.7)$$

Di questa dobbiamo cercare soluzioni che si comportino, per $\xi \rightarrow \infty$, secondo la (4.6).

La (4.7) è una equazione regolare in $\xi = 0$, così come in qualunque altro punto finito del piano complesso. Quindi può essere rappresentata, attorno a $\xi = 0$, da una serie di potenze avente raggio di convergenza infinito

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k \xi^k$$

L'andamento asintotico di $H(\xi)$ può quindi essere di tipo potenza solo se la serie si tronca a un polinomio

$$H(\xi) = \sum_{k=0}^n a_k \xi^k \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} a_n \xi^n + O(\xi^{n-1})$$

ovvero $\rho = n = 1, 2, 3, \dots$. Sostituendo questo comportamento asintotico di H nella (4.7) e tenendo conto solo dei termini dominanti, otteniamo la condizione

$$(-2n + \varepsilon - 1)\xi^n + O(\xi^{n-1}) = 0$$

da cui $\varepsilon = 2n + 1$, che, ritradotto nei parametri dell'oscillatore armonico fornisce

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$

L'equazione (4.7) si riscrive dunque

$$H'' - 2\xi H' + 2nH = 0$$

Nell'appendice ?? questa equazione compare come l'equazione le cui soluzioni polinomiali sono i polinomi ortogonali di Hermite $H_n(\xi)$. Dunque, oltre ad aver rivisto

la quantizzazione degli stati dell'oscillatore armonico, siamo ora in grado di scrivere esplicitamente le funzioni d'onda stazionarie

$$\psi_n(\xi) = A e^{-\xi^2/2} H_n(\xi)$$

Esse sono ovviamente ortogonali, grazie all'ortogonalità generalizzata dei polinomi di Hermite

$$\int_{-\infty}^{+\infty} H_n(\xi) H_{n'}(\xi) e^{-\xi^2} d\xi = \sqrt{\pi} 2^n n! \delta_{n,n'}$$

nella quale compare proprio il fattore $e^{-\xi^2}$ necessario per tener conto della parte esponenziale della ψ_n in modo da ottenere

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(\xi) \psi_{n'}(\xi) d\xi = N_n \delta_{n,n'}$$

dove N_n sarà la normalizzazione di ψ_n da calcolare. Ripristinati gli originari parametri fisici e variabili dell'oscillatore armonico e calcolata N_n potremo esprimere la funzione d'onda stazionaria dell'autostato n -simo di energia $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ come

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{1}{2^n n!}} \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} e^{-\frac{m\omega x^2}{2\hbar}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right)$$

Grazie a questa formula è possibile calcolare i valori medi delle grandezze più significative $\langle x \rangle, \langle p \rangle$

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x \psi_n(x)^2 dx \quad , \quad \langle p \rangle = -i\hbar \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_n(x) \frac{d}{dx} \psi_{n'}(x) dx$$

ecc... Questo compito è lasciato al lettore come esercizio (per fare il conto conviene sempre passare dalle x alle ξ e poi sfruttare le regole di ortogonalità e le proprietà dei polinomi di Hermite).