Primo punto

Introduzione teorica

Si vuole studiare il problema agli autovalori:

$$-\nabla^2\psi + V(x)\psi = E\psi$$

dove si è posto $\hbar = 1$ e $m = 1$. Il potenziale è assegnato da:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < -b \\ 4/b^2 & \text{se } -b \leq x \leq b \\ 0 & \text{se } x > b \end{cases}$$

Siano:

$$\begin{cases} \text{ZonaI} & = \{x < -b\} \\ \text{ZonaII} & = \{-b \leq x \leq b\} \\ \text{ZonaIII} & = \{x > b\} \end{cases}$$

Sia $k^2 = 2E$ e sia $q^2 = 2(E - V0)$. La soluzione analitica più generale è data da:

$$\psi_k(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{in ZonaI} \\ f(x) & \text{in ZonaII} \\ Ce^{ikx} + De^{-ikx} & \text{in ZonaIII} \end{cases}$$

Non siamo per il momento interessati alla ZonaII, quindi indichiamo con $f(x)$ la $\psi_k(x)$ in tale zona, che a rigore sarebbe

$$f(x) = Ee^{iqx} + Fe^{-iqx}$$

Le costanti A, B, C, D sono determinate dalle condizioni di raccordo di continuità della funzione d'onda e della sua derivata nei punti $x = \pm b$.
Si osserverà che dalla diagonalizzazione della versione discreta della Hamiltoniana (vedi sezione apposita) risultano autofunzioni a parità definita (pari o dispari). Allora, senza perdita di generalità, si pone la ulteriore condizione di simmetria alle ψ_k, che porta:

$$A = D \text{ se funzioni, e } A = -D \text{ se funzioni dispari}$$

Per la conservazione del flusso di probabilità, si possono riscrivere nella seguente forma:

$$\begin{pmatrix} C \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau & \rho \\ \rho & \tau \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix} = \quad (S) \cdot \begin{pmatrix} A \\ D \end{pmatrix}$$

Ove la matrice S è una matrice unitaria, ossia che verifica le condizioni:

$$\tau\rho^* + \tau^*\rho = 0 \quad , \quad |\tau|^2 + |\rho|^2 = 1$$

(Si è indicato con z^* il numero complesso coniugato di z). Segue immediatamente che:

$$|\tau \pm \rho|^2 = |\tau|^2 + |\rho|^2 + \tau\rho^* + \tau^*\rho = |\tau|^2 + |\rho|^2 + 0 = 1$$

Cioè $\tau \pm \rho$ differiscono per una fase:

$$|\tau \pm \rho|^2 = 1 \Rightarrow (\tau \pm \rho) = e^{2i\theta_\pm}$$

Si osservi che poichè A, B, C, D dipendono dagli autostati ψ_k, anche le fasi $\theta_\pm$ dipenderanno dall'autovalore k.
Si vuole quindi cercare una stima numerica di $\theta\pm$ per determinare τ da:

$$(\tau \pm \rho) = e^{2i\theta_\pm} \Rightarrow \tau = 1/2(e^{2i\theta_+} + e^{-2i\theta_-})$$

$$\Rightarrow \tau^2 = sin^2(\theta_+ - \theta_-)$$

(due conti per dimostrarlo plis)
Il coefficiente di trasmissione sarà qundi dato da:

$$T = \tau^2$$

Discretizzazione numerica

questioni sulla grid, cazzi e mazzi.