Una osservabile classica è funz. $F(p, q)$, $q = X$.

In MQ sostituita da operatore $F(\hat{p}, \hat{X})$. Ma questa def non è ben posta. Ora $\hat{P}$ e $\hat{X}$ sono operatori e in generale non commutano. Vediamo.

$$[\hat{X}, \hat{P}] \cdot \psi(x) = -i\hbar \left(x \frac{d}{dx} - \frac{d}{dx} \cdot x \right) \psi(x) =$$

$$= -i\hbar x \psi'(x) + \underbrace{i\hbar \frac{d}{dx} \left(x \psi(x) \right)}_{i\hbar x \psi'(x) + i\hbar \psi(x)} = i\hbar \, \psi(x)$$

$$\Rightarrow [\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbb{1}$$

In questo corso studieremo osservabili dove questa ambiguità non c'è.

In 3 dim. $\psi(\bar{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$ $\quad \tilde{\psi}(\bar{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3x \, e^{-i\bar{p}\cdot\bar{x}/\hbar} \psi(\bar{x})$

$$\hat{\vec{X}} \psi(x) = \vec{x} \psi(\bar{x}) \qquad [\hat{X}_i, \hat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij}$$

$$\hat{\vec{P}} \psi(x) = -i\hbar \vec{\nabla} \psi(x) \qquad [\hat{X}_i, \hat{X}_j] = 0 = [\hat{P}_i, \hat{P}_j]$$

Es.:

1) Particella in pot. $V(\bar{x})$. Hamiltoniana $H = \frac{\bar{p}^2}{2m} + V(\bar{x}) \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2m} + V(\hat{x})$

$\Rightarrow$ Eq. di Sch. si scrive come

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\bar{x}, t) = \left(\frac{\bar{\nabla}^2}{2m} + V(\bar{x}) \right) \Psi(\bar{x}, t) = \left(\frac{\bar{P}^2}{2m} + V(\hat{X}) \right) \Psi(\bar{x}, t) = \hat{H} \Psi$$

2) Mom. ang. $\bar{l} = \bar{x} \wedge \bar{p} \rightarrow \bar{L} = \hat{X} \wedge \hat{P}$ $\quad \hat{L}_j = \sum_{k,e=1}^{3} \epsilon_{jke} \hat{X}_k \hat{P}_e$

EQ. SCHRÖDINGER

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\psi(\bar{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{x})\right)\psi(\bar{x},t) \qquad (*)$$

Cerchiamo soluzioni $\psi(x,t) = \psi(\bar{x})\varphi(t)$

Allora $(*) \Rightarrow i\hbar\,\psi(\bar{x})\,\dot{\varphi}(t) = \varphi(t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{x})\right)\psi(\bar{x})$

$$\Rightarrow \underbrace{i\hbar\frac{\dot{\varphi}(t)}{\varphi(t)}}_{\text{non dip. da } x} = \underbrace{\frac{1}{\psi(\bar{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{x})\right)\psi(\bar{x})}_{\text{non dip da } t} \rightarrow = \text{cost. } E$$

→ separazione delle variabili

$$\dot{\varphi} = \frac{E}{i\hbar}\varphi \Rightarrow \varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

$\langle x|\hat{H}|\psi\rangle = E\langle x|\psi\rangle$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\bar{x})\right)\psi(\bar{x}) = E\psi(\bar{x}) \rightarrow \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{X})\right)\psi = E\psi \rightarrow$$

$\rightarrow \hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \rightsquigarrow$ eq. autovalori per $\hat{H}$

Solut. particolare: $\psi(\bar{x},t) = \psi_E(x)\,e^{-iEt/\hbar}$

Solut. generale: $\psi(\bar{x},t) = \sum_E a_E\,\psi_E(\bar{x})\,e^{-iEt/\hbar}$

$$|\psi\rangle_t = \sum_E a_E|E\rangle e^{-iEt/\hbar} = \sum_E a_E e^{-i\hat{H}t/\hbar}|E\rangle = e^{-i\hat{H}t/\hbar}|\psi\rangle_0$$

$\text{Prob}(E_0) = |\langle E_0|\psi\rangle_t|^2 = |a_E|^2$.

- Per risolvere eq. di Sch. si devono trovare autovalori e autovettori dell'operatore $\hat{H}$.
- Op. $\hat{H}$ genera le traslazioni temporali (flusso Hamiltoniano)

POSTULATI DELLA MECCANICA QUANTISTICA

1) Lo <u>stato</u> del sistema è associato a un vettore in UNO SPAZIO DI HILBERT $\mathcal{H}$ (in realtà $\{\alpha|\psi\rangle \mid \alpha \in \mathbb{C}\}$)

2) A ogni grandezza <u>osservabile</u> è associato un OPERATORE LINEARE AUTOAGGIUNTO che agisce su $\mathcal{H}$. I possibili risultati di una misura sono dati dagli autovalori dell'operatore.

3) Se un sistema fisico si trova in uno stato $|\psi\rangle$, la probabilità di misurare un autovalore a_i di A è $|\langle a_i|\psi\rangle|^2$ se $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.

4) Se una misura dà come risultato a_i, lo stato $|\psi\rangle$ collassa nello stato $|a_i\rangle$
(Se autovalore è degenere, dopo aver misurato a, $|\psi\rangle$ collassa a $\sum_{\substack{i \text{ t.c.} \\ a_i = a}} \langle a_i|\psi\rangle\, |a_i\rangle$)

5) L'evoluzione temporale di uno stato è data dall'eq. di Schrödinger (H indip. da t)

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle_t = H|\psi\rangle_t$$

cioè generata da op. $e^{-itH/\hbar}$.

Prendiamo $\Psi(\bar{x},t)$ funz. d'onda normalizzata a uno, di una particella di massa m in un campo di forze descritto da $V(\bar{x})$.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\bar{\nabla}^2 + V(\bar{x}) \right)\Psi(\bar{x},t)$$

Calcoliamoci la variaz. nel tempo della probab. di trovare la particella in un volume Σ.

$$\frac{d}{dt}\mathcal{P}(t) = \frac{d}{dt}\int_\Sigma d^3x\, |\Psi(\bar{x},t)|^2 = \int_\Sigma d^3x \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}(\bar{x},t)\,\Psi(\bar{x},t) + \Psi^*(\bar{x},t)\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\bar{x},t) \right) =$$

$$\underset{\text{eq. Sch.}}{=} \int_\Sigma d^3x \left\{ \left[\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\bar{\nabla}^2 + V(\bar{x}) \right)\Psi(\bar{x},t) \right]^* \Psi(\bar{x},t) + \right.$$

$$\left. + \Psi^*(\bar{x},t)\left[\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\bar{\nabla}^2 + V(\bar{x}) \right)\Psi(\bar{x},t) \right] \right\}$$

Termini che moltiplicano $V(\bar{x})$ si elidono, per realtà di $V(\bar{x})$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_\Sigma d^3x \left\{ \underbrace{(\bar{\nabla}^2\Psi^*)\,\Psi}_{\bar{\nabla}\cdot[(\bar{\nabla}\Psi^*)\Psi] - \bar{\nabla}\Psi^*\cdot\bar{\nabla}\Psi} - \Psi^*(\bar{\nabla}^2\Psi) \right\} = -\frac{i\hbar}{2m}\int_\Sigma d^3x\, \bar{\nabla}\cdot\left[(\bar{\nabla}\Psi^*)\Psi - \Psi^*\bar{\nabla}\Psi \right]$$

$$= -\int_\Sigma d^3x\, \bar{\nabla}\cdot\bar{J}_t \underset{\text{TEOREMA DELLA DIVERGENZA}}{=} -\int_{\partial\Sigma} dS\, \bar{n}\cdot\bar{J}$$

"densità di corrente di probab."

$$\bar{J}(\bar{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\Psi^*\bar{\nabla}\Psi - \Psi\bar{\nabla}\Psi^* \right)$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\Psi^*\hat{\bar{p}}\Psi + \Psi\hat{\bar{p}}\Psi^* \right)$$

EQ. DI CONTINUITÀ

quantità di prob. che esce dalla superficie $\partial\Sigma$ è uguale alla diminuzione della probab. di trovare la particella in Σ.

- teorema della divergenza,
  a volte detto impropriamente teorema di Gauss (congetturato da Gauss)

$V \subset \mathbb{R}^3$ $\qquad \bar{F}$ campo vettoriale differenziabile con continuità

$$\int_V \bar{\nabla}\cdot\bar{F}\,dV = \oint_{\partial V} \bar{F}\cdot d\bar{S}$$

anche teorema di Stokes

Integriamo $\bar{J}(x,t)$

$$\int d^3x\, \bar{J}(x,t) = \frac{1}{2m}\int d^3x \left(\psi^* \bar{\hat{P}}\psi + \psi \bar{\hat{P}}\psi^*\right) =$$

$$= \frac{1}{2m}\left(\langle \psi, \bar{\hat{P}}\psi\rangle + \langle \bar{\hat{P}}\psi, \psi\rangle\right) =$$

$$= \langle \psi, \frac{\bar{\hat{P}}}{m}\psi\rangle = \langle \bar{v}\rangle$$

valor medio della velocità

Avvalora interpretazione di $\bar{J}(\bar{x},t)$ come densità di corrente di probabilità

EQ. SCHRÖDINGER per sist. 1-dim.

Come visto sopra, eq. Sch. può essere scritta come

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,t) = \hat{H} \cdot \Psi(x,t)$$

Se $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{X}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$, ho

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

Cerchiamo soluz. $\Psi(x,t) = \psi(x)\,\phi(t)$

Metodo di SEPARAZIONE delle VARIABILI.

$$\underbrace{i\hbar \frac{\dot{\phi}(t)}{\phi(t)}}_{\text{indip. da } x} = \underbrace{\frac{1}{\psi(x)}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x)\right)\psi(x)}_{\text{indip. da } t}$$

$\Rightarrow$ cost. E

$$\Rightarrow \begin{cases} i\hbar \frac{d}{dt}\phi(t) = E\,\phi(t) \rightarrow \phi(t) = e^{-iEt/\hbar} \\ \hat{H}\,\psi(x) = E\,\psi(x) \rightarrow \text{interpretata come eq. agli autovalori per } \hat{H}. \end{cases}$$

condiz. inid. $\phi(0) = 1$

per risolvere, si cercano autofunz. di $\hat{H}$.

$$\hat{H}\psi(x) = E(x)$$

$$\Updownarrow$$

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

cioè

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

Eq. diff. lin. 2° ord.
$\Downarrow$
soluz. si scrivono come combin. lin. (a coeff complessi) di <u>due</u> soluz indip.

Le due soluz indip $\longrightarrow$ ψ, ψ^* $\rightarrow$ siccome eq. a coeff reali se ψ è sol anche ψ^* è sol.

$\searrow$ due ψ_1, ψ_2 reali

Se $V(x)$ è inf. lim., cioè $V(x) \geq V_0$, allora

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{\langle \hat{P}^2 \rangle}{2m} + \langle V(\hat{X}) \rangle =$$

$$= \frac{\langle \hat{P}\psi, \hat{P}\psi \rangle}{2m\,\|\psi\|^2} + \frac{1}{\|\psi\|^2}\int V(x)\,|\psi(x)|^2 dx =$$

$$= \frac{\|\hat{P}\psi\|^2}{2m\,\|\psi\|^2} + \frac{1}{\|\psi\|^2}\int (V(x) - V_0)\,|\psi(x)|^2 dx + V_0 > V_0$$

$\Rightarrow$ spettro di $\hat{H}$ contenuto in semiretta $]V_0, +\infty[$

PARTICELLA LIBERA

$$H = \frac{p^2}{2m} \longrightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m}$$

Onde piane sono autofunz. μ $\hat{p}$ $\qquad \hat{p}\, e^{+ipx/\hbar} = p\, \underbrace{e^{+ipx/\hbar}}$

in realtà sono distribuzioni

Quindi $\quad \hat{H} \cdot e^{ipx/\hbar} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\equiv E} e^{ipx/\hbar}$

Dato E, $\quad p = \pm\sqrt{2mE} \longrightarrow$ due autofunz. indip. $e^{\pm ipx/\hbar}$

Queste non sono funz. L^2 (tipico di variabili a spettro continuo.)

$\hookrightarrow$ possiamo costruire wave packet che sia L^2 e quindi una buona funz. d'onda

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp \; e^{ipx/\hbar}\, \tilde{\varphi}(p)\, e^{-ip^2\frac{t}{2m\hbar}}$$

con $\int dp\, |\tilde{\varphi}(p)|^2 = 1$

Dovremo risolvere equazioni del tipo

$$\psi''(x) + (\mathcal{E} - v(x))\,\psi(x) = 0 \qquad \psi''(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(x))\psi(x) = 0$$

$$\frac{2m}{\hbar^2}E = \frac{p^2}{\hbar^2}$$

Per PARTICELLA LIBERA abbiamo semplicem.

$$\psi''(x) + \mathcal{E}\,\psi(x) = 0 \qquad (\ast)$$

Interessano le soluz. nel senso delle distribuzioni temperate.
(Poi da comb. lin. di qte si costruiscono vere e proprie f.d.o. L^2)

$(\ast)$: Eq. diff. a coeff. cost. $\xRightarrow{\text{teoria delle distrib.}}$ fund. simboliche delle distrib. temp.
che risolvono $(\ast)$ sono formate
da funzioni (complesse)
CONTINUE e DERIVABILI,
con derivata continua (su tutto dominio)
e polinomialm. lim. all'∞.

$(\ast)$ è eq. di oscill. armonico. Due soluz. indp. sono

$$e^{\pm ipx/\hbar} \qquad \text{con} \qquad p = \hbar k = \hbar\sqrt{\mathcal{E}} = \sqrt{2ME}$$

$v(x)$

$(+)$ $\quad \psi'' = (v - \mathcal{E})\psi$ $\qquad$ $\psi(x)$ è continua in x_0

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi''(x)\,dx = \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} (v(x) - \mathcal{E})\psi(x)\,dx = \psi(x_0)\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}(v(x) - \mathcal{E})\,dx$$

$$\psi'(x_0+\epsilon) - \psi'(x_0-\epsilon) = \psi(x_0)\left(\left(v(x_0+\epsilon) - \mathcal{E}\right)\epsilon + \left(v(x_0-\epsilon) - \mathcal{E}\right)\epsilon\right)$$

$$= 2\psi(x_0)\cdot\epsilon\left[\frac{1}{2}\Delta v - \mathcal{E} + v(x_0-\epsilon)\right]$$

Se RHS $= \epsilon \cdot$ finito, allora ψ' continua in x_0.
Se RHS $= \epsilon \cdot \infty$, allora non abbiamo condiz. su ψ', lim. è indeterminato

Caso $E \geq 0$

In questo caso $p = \sqrt{2ME}$ è reale $\rightarrow$ soluz. sono funz. complesse

Soluz. $\psi_E(x) = c_+ e^{ipx/\hbar} + c_- e^{-ipx/\hbar}$ $\quad c_\pm \in \mathbb{C}$

↳ accettabili come soluz. in distrib. temp.

Caso $E < 0$

$p = i\sqrt{2M|E|}$ è immaginario $\rightarrow$ soluz. reali

↳ $\psi_E(x) = c_+ e^{-\sqrt{2M|E|}\,x/\hbar} + c_- e^{+\sqrt{2M|E|}\,x/\hbar}$

↳ NON è accettabile in quanto diverge più velocemente di pol. a ∞

→ non ci sono quindi soluz. relative a $E<0$, che quindi non appartengono allo spettro

⇒ Spettro di en. per particella libera è $E \in [0, \infty[$

POTENZIALI A GRADINO

$V(x)$ funz. costante a tratti, con numero finito di discontinuità nei pt. x_j, $j=1,\dots,N$

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

$R_j =]x_{j-1}, x_j[\quad j=1,\dots,N+1$

$\hookrightarrow V(x) = V_j$ per $x \in R_j$.

⇝ Casi limite di potenziali "realistici" definiti da funz. continue, con variaz. molto rapide in intervalli di lunghezza molto piccola.
Quando la lunghezza di questi intervalli è molto più piccola delle grandezze in gioco nel problema (in particolare quella dell'onda associata alla particella), pot. a gradino è buona approx.

Prop. Soluz. del problema agli autovalori per H di una part. in pot. unidim. a gradini si possono trovare tutte tra le soluz. (complesse) dell'eq. diff. associata, che sono CONTINUE e DERIVABILI con derivata continua su tutto asse reale, e polinomialm. lim. (+) pag. 23

"Dim". Una funz. che non sia di classe C^1 non può essere soluz. per due motivi:
1) non nel senso delle funz. perché sua derivata non def. ovunque.
2) " " " " distrib. perché la sua derivata seconda contiene termini prop. alla Delta di Dirac che non possono essere cancellati da $(V(x)-E)\psi(x)$.

Es. $\theta(x)$ $\langle \theta'(x), \phi \rangle = -\langle \theta, \phi' \rangle = -\int_0^\infty \phi'(x)dx = \phi(0) = \langle \delta_0, \phi \rangle$.

→ Risolviamo eq. separatam. in ogni intervallo R_j

$$\psi''(x) + \underbrace{(\mathcal{E} - V_j)}_{\equiv \mathcal{E}_j \,=\, \frac{2M}{\hbar^2}(E - V_j) \,=\, \frac{2M}{\hbar^2} E_j} \psi(x) = 0 \qquad x \in R_j$$

↓

Stessa forma di part. libera:

$$\psi_E^{(j)}(x) = c_j^+ e^{i p_j x/\hbar} + c_j^- e^{-i p_j x/\hbar}$$

$$p_j = \hbar\sqrt{\mathcal{E}_j} = \sqrt{2M(E - V_j)}$$

→ Andam. oscillante per $p_j \in \mathbb{R}$ $\qquad E \geq V_j$

→ " esponenziale per $p_j \in i\mathbb{R}$ $\qquad E < V_j$

Soluz. generale

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \psi_E^{(1)}(x) & x \in R_1 \\ \vdots & \\ \psi_E^{(N+1)}(x) & x \in R_{N+1} \end{cases}$$

t.c.

1) sono di classe C^1 anche nei pti x_j $\quad j = 1, \dots, N$

2) sono polinomiali lim. a $\pm\infty$

$\psi_E^{(j)}$ dip da 2 param. → ψ_E dip. da $2N+2$ param.

$2 \times N$ condit. di raccordo → 2 param.

Normalizzaz. di ψ arbitraria (eq. lin. omogenea)

Condiz. raccordo in x_j $(j=1,\dots,N)$

$$\begin{cases} \psi_E^{(j)}(x_j) = \psi_E^{(j+1)}(x_j) \\ \psi_E'^{(j)}(x_j) = \psi_E'^{(j+1)}(x_j) \end{cases}$$

cioè

$$\begin{cases} c_j^+ e^{+ip_j x_j/\hbar} + c_j^- e^{-ip_j x_j/\hbar} = c_{j+1}^+ e^{ip_{j+1}x_j/\hbar} + c_{j+1}^- e^{-ip_{j+1}x_j/\hbar} \\ p_j \left(c_j^+ e^{ip_j x_j/\hbar} - c_j^- e^{-ip_j x_j/\hbar} \right) = p_{j+1} \left(c_{j+1}^+ e^{ip_{j+1}x_j/\hbar} - c_{j+1}^- e^{-ip_{j+1}x_j/\hbar} \right) \end{cases}$$

$\hookrightarrow$ Sistemi di eq. lineari non-omogenee in $2N$ costanti (delle $2N+2$).

$\updownarrow$

$2N$ eq. in $2(N+1)$ costanti

A $\pm\infty$ vincoli su andamento di ψ_E, possono dare ulteriori condizioni su E.

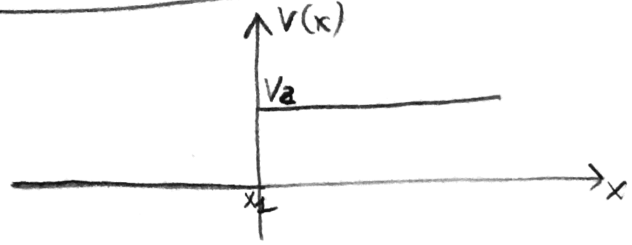
GRADINO DI POTENZIALE

1 discontinuità $\quad R_1, R_2$

$x_1 = 0 \qquad x_0 = -\infty, \quad x_2 = +\infty$

$V_1 = 0$

$V_2 \neq 0$



$$\psi'' + \frac{2M}{\hbar^2}(E - V_j)\psi = 0$$

$$p_j = \hbar k_j = \hbar\sqrt{\varepsilon_j} = \sqrt{2M(E-V_j)}$$

R_1: $x \leq 0$ $\qquad \psi_1'' + \overbrace{\frac{2M}{\hbar^2}E}^{k_1^2}\psi_1 = 0$

$$\psi_1''(x) = -k_1^2\psi_1(x)$$

$$\psi_1(x) = c_1^+ e^{ik_1x} + c_1^- e^{-ik_1x}$$

$$\psi_1'(x) = ik_1c_1^+ e^{ik_1x} - ik_1c_1^- e^{-ik_1x}$$

R_2: $x \geq 0$ $\qquad \psi_2'' = -k_2^2\psi_1(x) \qquad k_2^2 = \frac{2M(E-V_2)}{\hbar^2}$

$$\psi_2(x) = c_2^+ e^{ik_2x} + c_2^- e^{-ik_2x}$$

$$\psi_2'(x) = c_2^+ ik_2 e^{ik_2x} - c_2^- ik_2 e^{-ik_2x}$$

2 condiz.

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \longrightarrow c_1^+ + c_1^- = c_2^+ + c_2^-$$

$$\psi_1'(0) = \psi_2'(0) \rightarrow k_1(c_1^+ - c_1^-) = k_2(c_2^+ - c_2^-)$$

Soluz. particolare: $c_2^- = 0$. Interpretazione: particella che arriva da $x = -\infty$ e viaggia verso destra rimbalzando sulla barriera, o venendo trasmessa.

$$\hookrightarrow \quad c_1^- = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}c_1^+ \qquad c_2^+ = \frac{2k_1}{k_1+k_2}c_1^+$$

ampiezza di onda che arriva da $x = -\infty$

$$\psi_E(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + \dfrac{k_1-k_2}{k_1+k_2}\, e^{-ik_1x} & x \leq 0 \\[2ex] \dfrac{2k_1}{k_1+k_2}\, e^{ik_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Abbiamo fissato la normalizzazione a $c_1^+ = 1$

Caso $E \geq V_2$

- ψ_1 e ψ_2 hanno entrambe andamento oscillante
- ψ_E e ψ_E^* sono due soluz. particolari indip. entrambe limitate a $\pm\infty$
- Non si annullano a $\pm\infty$ $\to$ non sono L^2.
  $\hookrightarrow$ $E \geq V_2$ appartengono a spettro continuo di $\hat{H}$ e sono doppiamente degeneri.
- Soluz. stat. di eq. di Schrödinger corrispondente a ψ_E è

$$\psi_E(x,t) = e^{-iEt/\hbar}\, \psi_E(x) = \begin{cases} e^{i(-Et+p_1x)/\hbar} + \dfrac{p_1-p_2}{p_1+p_2}\, e^{-i(+Et+p_1x)/\hbar} & x \in R_1 \\[2ex] \dfrac{2p_1}{p_1+p_2}\, e^{i(-Et+p_2x)/\hbar} & x \in R_2 \end{cases}$$

In R_1) Sovrapposiz. di onda piana che si propaga nel verso positivo dell'asse x con velocità di fase E/p_1 (ONDA INCIDENTE) e di un'onda piana che si propaga nel verso negativo delle x con stessa vel. di fase (ONDA RIFLESSA)

In R_2) Onda piana in verso positivo di asse x con velocità di fase E/p_2 (ONDA TRASMESSA)

Densità di corrente di probab.:

$$\bar{J}(\bar{x},t) = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\Psi^* \bar{\nabla}\Psi - \Psi\bar{\nabla}\Psi^*\right)$$

Nel caso unidim.

densità di corrente incidente — riflessa

$$J(x,t) = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\psi_E^* \psi_E' - \psi_E'^* \psi_E\right) = \begin{cases} \frac{P_1}{M}\left(|c_1^+|^2 - |c_1^-|^2\right) \\ |c_2^+|^2\left(\frac{i k_2 \hbar}{2Mi} - (-i)\frac{k_2\hbar}{2Mi}\right) = |c_2^+|^2 \frac{P_2}{M} \end{cases}$$

Coeff. di RIFLESSIONE

$$R = \left|\frac{c_1^-}{c_1^+}\right|^2 = \left(\frac{P_1 - P_2}{P_1 + P_2}\right)^2$$

Coeff. di TRASMISSIONE

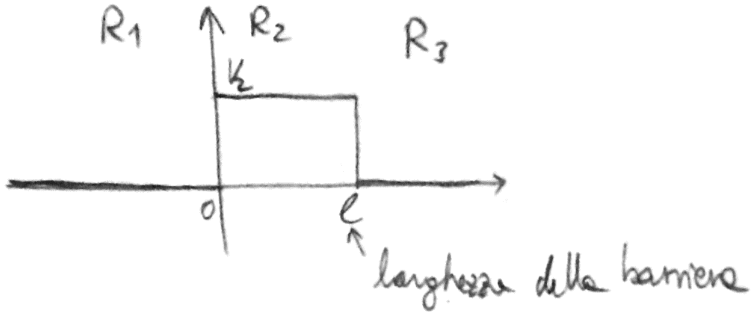
$$T = \frac{P_2 |c_2^+|^2}{P_1 |c_1^+|^2} = \frac{4 P_1 P_2}{(P_1 + P_2)^2}$$

$R + T = 1$!

BARRIERA DI POTENZIALE

$V_1 = V_3 = 0$

$V_2 > V_1 = V_3 = 0$



Caso $E > V_2$

- ψ_E è oscillante in tutte le regioni $R_j \Rightarrow$ limitata a $\pm\infty$.
- Ogni $\psi_E^{(j)}$ dip. da 2 cost. arbitrarie $\to 6$
- 4 condiz. di raccordo $\Longrightarrow$ 2 soluz. lin. indip., ma non si annullano all'∞ $\Rightarrow$ non sono L^2 $\Rightarrow$ spettro CONTINUO (doppiam. degenere)

$$\psi_E^{(1)}(x) = c_1^+ e^{ik_1x} + c_1^- e^{-ik_1x} \qquad k_1 = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}$$

$$\psi_E^{(2)}(x) = c_2^+ e^{ik_2x} + c_2^- e^{-ik_2x} \qquad k_2 = \sqrt{\frac{2M(E-V_2)}{\hbar^2}}$$

$$\psi_E^{(3)}(x) = c_3^+ e^{ik_1x} + \cancel{c_3^- e^{-ik_1x}} \qquad \text{dove abbiamo usato } k_3 = k_1$$

Prendiamo $c_3^- = 0$: soluz. di particella che viene da sinistra

↳ SOLUZIONE PARTICOLARE

Condiz. di raccordo 1-2:

$$\psi_E^{(1)}(0) = \psi_E^{(2)}(0) \qquad c_1^+ + c_1^- = c_2^+ + c_2^-$$

$$\psi_E'^{(1)}(0) = \psi_E'^{(2)}(0) \qquad k_1(c_1^+ - c_1^-) = k_2(c_2^+ - c_2^-)$$

Condiz. raccordo 2-3:

$$\psi_E^{(2)}(l) = \psi_E^{(3)}(l) \qquad c_2^+ e^{ik_2l} + c_2^- e^{-ik_2l} = c_3^+ e^{ik_1l}$$

$$\psi_E'^{(2)}(l) = \psi_E'^{(3)}(l) \qquad k_2 c_2^+ e^{ik_2l} - k_2 c_2^- e^{-ik_2l} = k_1 c_3^+ e^{ik_1l}$$

Mφ33

2-3 ⇒ $$c_2^+ = \frac{1}{2} c_3^+ e^{i(k_1-k_2)l}\left(1+\frac{k_1}{k_2}\right)$$

$$c_2^- = \frac{1}{2} c_3^+ e^{i(k_1+k_2)l}\left(1-\frac{k_1}{k_2}\right)$$

1-2 ⇒ $$c_1^+ = \frac{1}{2} c_2^+\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right) + \frac{1}{2} c_2^-\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right) =$$

$$= \frac{1}{4} c_3^+ \left\{ e^{i(k_1-k_2)l}\left(2+\frac{k_2}{k_1}+\frac{k_1}{k_2}\right) + e^{i(k_1+k_2)l}\left(2-\frac{k_1}{k_2}-\frac{k_2}{k_1}\right)\right\}$$

$$= \frac{1}{4} c_3^+ e^{ik_1 l}\left\{ 2\left(e^{-ik_2 l}+e^{ik_2 l}\right) + \frac{k_1^2+k_2^2}{k_1 k_2}\left(e^{-ik_2 l}-e^{ik_2 l}\right)\right\}$$

$$= c_3^+ e^{ik_1 l}\left\{ \cos k_2 l - i\,\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\,\mathrm{sen}\, k_2 l\right\}$$

$$c_1^- = \frac{1}{2} c_2^+\left(1-\frac{k_2}{k_1}\right) + \frac{1}{2} c_2^-\left(1+\frac{k_2}{k_1}\right)$$

$$= \frac{1}{4} c_3^+ \left\{ e^{i(k_1-k_2)l}\left(\frac{k_1}{k_2}-\frac{k_2}{k_1}\right) + e^{i(k_1+k_2)l}\left(\frac{k_2}{k_1}-\frac{k_1}{k_2}\right)\right\}$$

$$= c_3^+ e^{ik_1 l}\, i\,\frac{k_1^2-k_2^2}{2k_1k_2}\,\mathrm{sen}\, k_2 l$$

(Una soluz. indip. è data da ψ_E^*.)

c_3^+ è coeff. dell'onda trasmessa. $c_3^+ \neq 0$ se si vuole $\psi_E \neq 0$.

Possiamo calcolare coeff. di riflessione e trasmissione

$$J = \frac{\hbar}{2Mi}\left(\psi_E^{*}\psi_E' - \psi_E^{*\prime}\psi_E\right) = \begin{cases} \frac{P_1}{M}\left(|C_1^+|^2 - |C_1^-|^2\right) \\ \\ \frac{P_2}{M}\left(|C_2^+|^2 - |C_2^-|^2\right) \\ \\ \frac{P_1}{M}|C_3^+|^2 \end{cases}$$

$P_i = \hbar K_i$

$$R = \left|\frac{C_1^-}{C_1^+}\right|^2 = \frac{(P_1^2 - P_2^2)^2 \sin^2(P_2 l/\hbar)}{4P_1^2P_2^2 + (P_1^2 - P_2^2)^2 \sin^2(P_2 l/\hbar)}$$

$$T = \left|\frac{C_3^+}{C_1^+}\right|^2 = \frac{4P_1^2P_2^2}{4P_1^2P_2^2 + (P_1^2 - P_2^2)^2 \sin^2(P_2 l/\hbar)} = \frac{4E(E-V_2)}{4E(E-V_2) + V_2^2 \sin^2\left(\frac{l}{\hbar}\sqrt{2M(E-V_2)}\right)}$$

$\Rightarrow$ risonanza quando il denominatore è min, cioè quando $\sin = 0$, che avviene per

$$l = \frac{n\pi\hbar}{P_2} \qquad n \in \mathbb{N}^*$$

- Si può dim. che, per valori di l che danno risonanza, un pacchetto d'onde di un certo tipo rimane tempo relativam. lungo in R_2 $\rightsquigarrow$ "scattering risonante"

Caso $0 < E < V_2$

- Andam. esponenziale in R_2, oscillante altrimenti $\Rightarrow$ limitata a $\pm\infty$

  $\Rightarrow$ non limita numero di cost. arbitrarie
  (come invece avveniva in scalino).

- $c_3^- = 0$
- Stesse condiz. di raccordo, solo che ora $k_2 = i|k_2| \Rightarrow$ $\begin{matrix} \text{sen} \to \text{senh} \\ \cos \to \cosh \end{matrix}$
- Ancora spettro continuo, doppiam. deg.
- In particolare

$$T = \frac{4E(V_2-E)}{4E(V_2-E) + V_2^2 \,\text{senh}^2\left(\frac{\ell}{\hbar}\sqrt{2M(V_2-E)}\right)}$$

- Nel caso classico la particella rimbalza indietro.
  Nel caso quantistico, invece, la particella ha probab. $\neq 0$ di essere rilevata a destra $\longrightarrow$ <u>EFFETTO TUNNEL</u>

se $|p_2 \ell|/\hbar \gg 1$

$$\Rightarrow \quad \text{senh}\,\frac{|p_2|\ell}{\hbar} \sim e^{|p_2|\ell/\hbar} \gg 4E(V_2-E)$$

$$\Rightarrow \quad T \sim \frac{16\,E(V_2-E)}{V_2^2}\, e^{-2|p_2|\ell/\hbar}$$

Per elettrone con $E = 1eV$ e barriera larga $1\,Å$ e alta $2eV$
$\hookrightarrow T = 0.78$

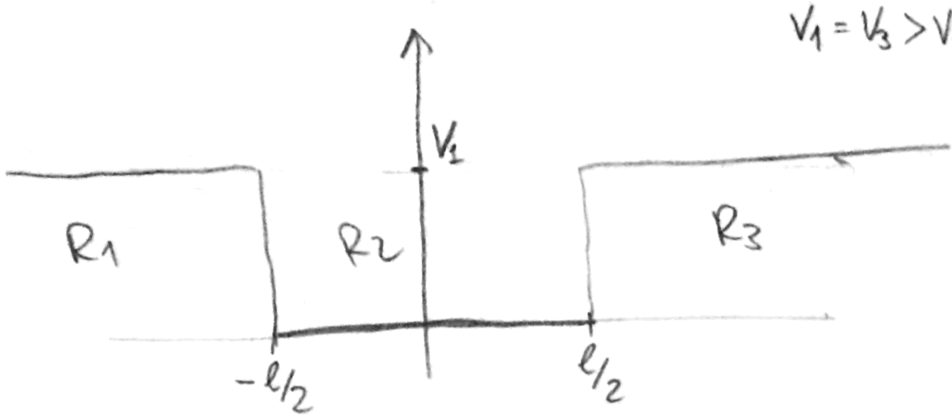
" protone in situaz. analoga $\hookrightarrow T = 4 \cdot 10^{-19}$

" oggetti macroscopici $\to$ irrilevanti

BUCA RETTANGOLARE

$V_1 = V_3 > V_2 = 0$ $\quad x_1 = -x_2$

$x_2 - x_1 = \ell$



ℓ = larghezza della buca

Caso $E > V_1$

Si ottengono stessi risultati della barriera di pot.

$$K_1 = K_3 = \sqrt{\frac{2M(E-V_1)}{\hbar^2}} \qquad K_2 = \sqrt{\frac{2ME}{\hbar^2}}$$

Stessi conti. Cambia solo quando sostituisco $p_i = K_i \hbar$ con K_i

Per es. $$T = \frac{4p_1^2p_2^2}{4p_1^2p_2^2 + (p_1^2-p_2^2)^2 \operatorname{sen}^2(p_2\ell/\hbar)} = \frac{4(E-V_1)E}{4(E-V_1)E + V_1^2 \operatorname{sen}^2\left(\frac{\ell}{\hbar}\sqrt{2ME}\right)}$$

Caso $0 < E < V_1$

- Andam. esponenziale in R_1 e R_3 e oscillante in R_2

Condiz. di finitezza a $\pm\infty$ richiede
$$c_1^+ = 0 = c_3^-$$

$$\Rightarrow \quad \psi_E^{(1)}(x) = c_1^- e^{|p_1|x/\hbar}$$
$$\psi_E^{(2)}(x) = c_2^+ e^{ip_2x/\hbar} + c_2^- e^{-ip_2x/\hbar}$$
$$\psi_E^{(3)}(x) = c_3^+ e^{-|p_1|x/\hbar}$$

$\rho_1 \equiv |p_1| = \left|\sqrt{2M(E-V_1)}\right|$

$p_2 = \sqrt{2ME}$

Condiz. di raccordo:

1-2
$$\psi_E^{(1)}\left(-\frac{\ell}{2}\right) = \psi_E^{(2)}\left(-\frac{\ell}{2}\right) \qquad c_1^- e^{-|p_1|\ell/2\hbar} = c_2^+ e^{-ip_2\ell/2\hbar} + c_2^- e^{ip_2\ell/2\hbar}$$

$$\psi_E^{(1)\prime}\left(-\frac{\ell}{2}\right) = \psi_E^{(2)\prime}\left(-\frac{\ell}{2}\right) \qquad \frac{|p_1|}{\hbar} c_1^- e^{-|p_1|\ell/2\hbar} = i\frac{p_2}{\hbar}\left(c_2^+ e^{-ip_2\ell/2\hbar} - c_2^- e^{ip_2\ell/2\hbar}\right)$$

2-3
$$\psi_E^{(2)}\left(\frac{\ell}{2}\right) = \psi_E^{(3)}\left(\frac{\ell}{2}\right) \qquad c_2^+ e^{ip_2\ell/2\hbar} + c_2^- e^{-ip_2\ell/2\hbar} = c_3^+ e^{-|p_1|\ell/2\hbar}$$

$$\psi_E^{(2)\prime}\left(\frac{\ell}{2}\right) = \psi_E^{(3)\prime}\left(\frac{\ell}{2}\right) \qquad \frac{ip_2}{\hbar}\left(c_2^+ e^{ip_2\ell/2\hbar} - c_2^- e^{-ip_2\ell/2\hbar}\right) = -\frac{|p_1|}{\hbar} e^{-|p_1|\ell/2\hbar} c_3^+$$

- Sist. lin. omogeneo, 4 eq. in 4 incognite.
- Prime due eq. dicono che se $c_1^- = 0$ allora anche $c_2^+ = c_2^- = 0$ e $c_3^+ = 0$
$\Rightarrow c_1^- \neq 0$. Possiamo fissarlo $\underline{c_1^- = 1}$

$$\Rightarrow \begin{cases} c_2^+ = \dfrac{\frac{ip_2}{\hbar} e^{-|p_1|\ell/2\hbar} + \frac{|p_1|}{\hbar} e^{-|p_1|\ell/2\hbar}}{\frac{2ip_2}{\hbar} e^{-ip_2\ell/2\hbar}} = \dfrac{|p_1| + ip_2}{2ip_2} e^{(-|p_1|+ip_2)\ell/2\hbar} \\[2ex] c_2^- = \dfrac{\frac{ip_2}{\hbar} e^{-|p_1|\ell/2\hbar} - \frac{|p_1|}{\hbar} e^{-|p_1|\ell/2\hbar}}{\frac{2ip_2}{\hbar} e^{ip_2\ell/2\hbar}} = -\dfrac{|p_1| - ip_2}{2ip_2} e^{-(|p_1|+ip_2)\ell/2\hbar} \end{cases}$$

$c_2^- = (c_2^+)^*$

- Raccordo in 2-3:

$$c_3^+ = \frac{(|p_1| + ip_2)}{2ip_2} e^{ip_2\ell/\hbar} - \left(\frac{|p_1| - ip_2}{2ip_2}\right) e^{-ip_2\ell/\hbar}$$

$$\left(\frac{|p_1|}{\hbar} + \frac{ip_2}{\hbar}\right)\frac{(|p_1| + ip_2)}{2ip_2} e^{ip_2\ell/\hbar} - \left(\frac{|p_1| - ip_2}{\hbar}\right)\frac{(|p_1| - ip_2)}{2ip_2} e^{-ip_2\ell/\hbar} = 0$$

$$\Rightarrow \quad (|P_1| + iP_2)^2 e^{iP_2 \ell/\hbar} = (|P_1| - iP_2)^2 e^{-iP_2\ell/\hbar}$$

$$\Rightarrow \quad \left(\frac{|P_1| - iP_2}{|P_1| + iP_2} \right)^2 = e^{2iP_2\ell/\hbar} \quad \Rightarrow$$

$$\rightarrow \quad \frac{|P_1| - iP_2}{|P_1| + iP_2} = \pm e^{iP_2\ell/\hbar} = \pm \left(\cos \frac{P_2 \ell}{\hbar} + i \,\mathrm{sen}\, \frac{P_2\ell}{\hbar} \right)$$

$$\frac{|P_1| - iP_2}{|P_1| + iP_2} = \frac{|P_1|^2 - P_2^2 - 2iP_2|P_1|}{|P_1|^2 + P_2^2}$$

1) Segno negativo:

$$-\cos \frac{P_2 \ell}{\hbar} = \frac{|P_1|^2 - P_2^2}{|P_1|^2 + P_2^2}$$

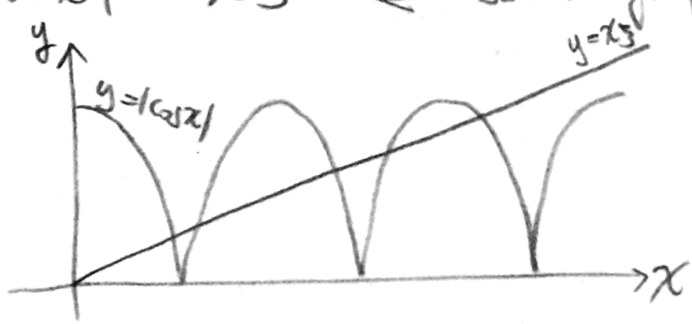
$$\mathrm{sen}\, \frac{P_2 \ell}{\hbar} = \frac{2|P_1|P_2}{|P_1|^2 + P_2^2} > 0$$

$$\Rightarrow \quad \left| \cos\left(\frac{P_2 \ell}{2\hbar} \right) \right| = \sqrt{\frac{1 + \cos(P_2\ell/\hbar)}{2}} = \sqrt{\frac{1 + \frac{P_2^2 - |P_1|^2}{|P_1|^2 + P_2^2}}{2}} = \frac{P_2}{\sqrt{|P_1|^2 + P_2^2}} =$$

$$= \frac{P_2}{\sqrt{2MV_1}} = x\xi$$

Poniamo ora $\frac{P_2 \ell}{2\hbar} = x \qquad \sqrt{\frac{2\hbar^2}{MV_1 \ell^2}} = \xi \qquad \sqrt{2MV_1} = \frac{2\hbar}{\ell\xi}$

$$|\cos x| = x\xi \quad \leftarrow \text{soluz. grafica}$$

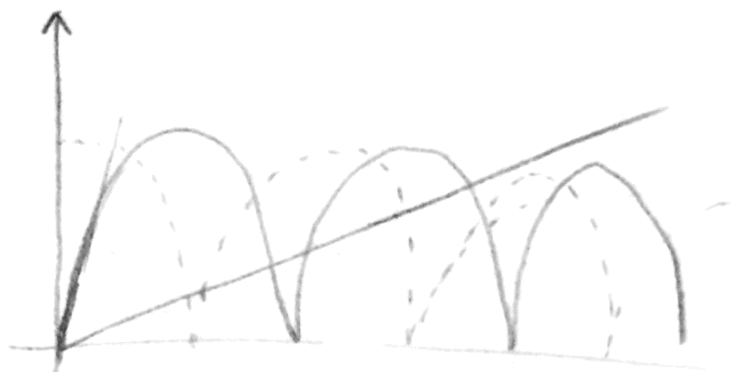


$$|P_1| = \sqrt{2MV_1 - 2ME} = \sqrt{\frac{4\hbar^2}{\ell^2\xi^2} - P_2^2} = \frac{2\hbar}{\ell\xi}\sqrt{1 - \left(\frac{P_2 \ell}{2\hbar} \cdot \xi\right)^2}$$

2) Segno positivo

$$\cos^2 \frac{P_2 l}{2\hbar} = \frac{|P_1|^2}{2MV_1} \qquad \operatorname{sen}\left(\frac{P_2 l}{\hbar}\right) = -\frac{2|P_1|P_2}{|P_1|^2 + P_2^2} < 0$$

$$|\operatorname{sen} x| = \sqrt{1 - \cos^2 \frac{P_2 l}{2\hbar}} = \sqrt{1 - \frac{|P_1|^2}{2MV_1}} = \sqrt{1 - 1 + (x\xi)^2} = x\xi$$



$\Rightarrow$ Il numero di soluzioni è ≥ 1, finito e funzione decrescente di ξ

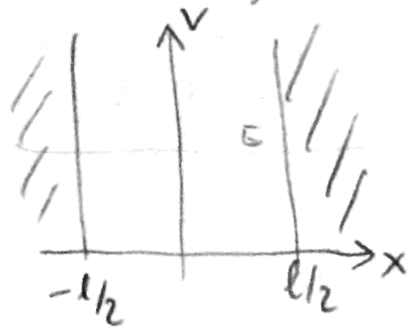
Soluz. dip. dal temp

Caso $0 < E < V_1$: la particella classica è costretta a muoversi all'interno della buca, rimbalzando sulle pareti (STATO LEGATO)

Soluz. stazionarie di eq. di Sch. sono L^2 e rappresentano quindi stati fisici della particella. Particella può essere rilevata anche fuori buca, ma prob decresce esponen. (STATI LEGATI).

BUCA RETTANGOLARE INFINITA

$V_1 = V_3 = \infty \quad , \quad V_2 = 0$



$$\psi'' = \left(\mathcal{V}(x) - \mathcal{E}\right)\psi$$

$$\psi'' = \left(V(x) - E\right)\frac{2m}{\hbar^2}$$

$\psi'(x)$ non è necessariamente continua se $V(x)$ ha disc. infinite

In R_1 e R_3 $\quad \psi_E^{(1,3)}(x) = 0$

In R_2 $\quad \psi_E^{(2)}(x) = c_2^+ e^{ip_2x/\hbar} + c_2^- e^{-ip_2x/\hbar}$

Condiz. di raccordo:

$$\psi_E^{(2)}\left(-\frac{l}{2}\right) = 0 \Rightarrow c_2^+ \cancel{e^{-ip_2l/2\hbar}} + c_2^- e^{2ip_2l/2\hbar} = 0$$

$$\psi_E^{(2)}\left(\frac{l}{2}\right) = 0 \Rightarrow c_2^+ e^{2ip_2l/2\hbar} + c_2^- \cancel{e^{-ip_2l/2\hbar}} = 0$$

Sist. lin. omogeneo in due incognite

$$\begin{pmatrix} e^{-ip_2l/2\hbar} & e^{ip_2l/2\hbar} \\ e^{ip_2l/2\hbar} & e^{-ip_2l/2\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_2^+ \\ c_2^- \end{pmatrix} = 0$$

Ha soluz. $(c_2^+, c_2^-) \neq (0,0)$ solo se det $= 0$, cioè

$$e^{-2ip_2l/\hbar} = e^{2ip_2l/\hbar} \longleftrightarrow e^{2ip_2l/\hbar} = 1 \Rightarrow \frac{2p_2l}{\hbar} = 2\pi k \quad k \in \mathbb{Z}$$

cioè $\frac{p_2 l}{\hbar} = m\pi \Rightarrow e^{ip_2l/\hbar} = e^{i\pi m} = \begin{cases} 1 & m \text{ even} \\ -1 & m \text{ odd} \end{cases}$

$P_2 = \frac{\pi n \hbar}{\ell}$ M41

n even $\quad C_2^- = -C_2^+$

$$\psi_E^{(2)}(x)_{n=2m} = C_2^+ \left(e^{iP_2 x/\hbar} - e^{-iP_2 x/\hbar} \right) = 2i \,\mathrm{sen}\left(\frac{2m\pi x}{\ell}\right)$$ M41

n odd $\quad C_2^- = C_2^+$

$$\psi_E^{(2)}(x)_{n=2m+1} = C_2^+ \left(e^{iP_2 x/\hbar} + e^{-iP_2 x/\hbar} \right) = 2 \cos\left(\frac{(2m+1)\pi x}{\ell}\right)$$

$n \neq 0$, se no funzione nulla.

Livelli energetici quantizzati

$$E_n = \frac{P_2^2}{2m} = \frac{\pi^2 n^2 \hbar^2}{2\ell^2 m}$$

Livello energetico fondam. (min.) è

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m\ell^2}$$

La particella non può avere energia nulla

↳ conseguenza del principio di indeterminazione

$$\Delta x \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

$$\Delta x_{MAX} = \ell$$

$$\Downarrow$$

$$\Delta p_{MIN} = \frac{\hbar}{2\ell}$$

OSCILLATORE ARMONICO

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

Eq. Schrödinger:

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

Ridef. $\quad q = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dx} = \frac{dq}{dx}\frac{d}{dq} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\frac{d}{dq}$

$\varphi(q) \equiv \psi\left(\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}\, q\right) \qquad E = \lambda \cdot \hbar\omega$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{m\omega}{\hbar}\frac{d^2}{dq^2}\varphi(q) + \frac{1}{2} m\omega^2 \frac{\hbar}{m\omega} q^2 \varphi(q) = \hbar\omega\lambda\varphi(q)$$

cioè

$$\left(-\frac{d^2}{dq^2} + q^2 - 2\lambda\right)\varphi(q) = 0 \qquad (*)$$

Eq. diff. lin. ordinaria $\rightarrow$ due soluz. indip.

$\rightarrow$ operatore invariante per $q \mapsto -q$

$\Rightarrow$ se $\varphi(q)$ è soluz., anche $\varphi(-q)$ è soluz.

$\Rightarrow$ Sono soluzioni: $\varphi_\pm(q) = \frac{\varphi(q) \pm \varphi(-q)}{2} = \pm\varphi(-q)$

Non è restrittivo, quindi, cercare soluz. a parità definita

$\longrightarrow$ Andamento asintotico per $q\to\infty$ delle soluz di $(*)$

$$-\frac{d^2}{dq^2}+q^2-2\lambda = \left(\pm\frac{d}{dq}+q\right)\left(\mp\frac{d}{dq}+q\right) \pm\frac{d}{dq}q \mp q\frac{d}{dq} - 2\lambda$$

$$= \left(\pm\frac{d}{dq}+q\right)\left(\mp\frac{d}{dq}+q\right) \mp 1 - 2\lambda$$

$$\underset{q\to\infty}{\sim} \left(\pm\frac{d}{dq}+q\right)\left(\mp\frac{d}{dq}+q\right)$$

Solut. asintotiche si trovano cercando soluz di

$$\left(\mp\frac{d}{dq}+q\right)\varphi^{\pm}_{as}(q)=0$$

cioè $\quad \varphi^{\pm}_{as}(q) = C_{\pm}\, e^{\pm q^2/2}$

$\Rightarrow$ ci si deve aspettare che eq. diff. ammette due soluz. lin. dip, i cui andam. asintotici per $q\to\infty$ sono dominati da funz. $e^{\pm q^2/2}$

Una delle due è accettabile e associata a spettro discreto.

Funz. incognita viene scritta allora

$$\varphi(q) = \theta(q)\, e^{-q^2/2}$$

Mauh

Abbiamo quindi inserendo in $(*)$

$$\left(-\frac{d}{dq^2}+q^2-2\lambda\right)e^{-q^2/2}\theta(q)=$$

$$=\left[\left(-\frac{d}{dq}+q\right)\left(\frac{d}{dq}+q\right)+1\quad-2\lambda\right]e^{-q^2/2}\theta(q)$$

$$=\left[\left(-\frac{d}{dq}+q\right)\frac{d\theta}{dq}e^{-q^2/2}+\left(1\quad-2\lambda\right)e^{-q^2/2}\theta(q)\right.=$$

$$=\left(-\frac{d^2\theta}{dq^2}+q\frac{d\theta}{dq}+q\frac{d\theta}{dq}+(1-2\lambda)\theta\right)e^{-q^2/2}$$

$$\Rightarrow\quad\left(-\frac{d^2}{dq^2}+2q\frac{d}{dq}+1-2\lambda\right)\theta(q)=0\quad(\star)$$

- $e^{-q^2/2}$ è pari
- θ sarà o pari o dispari
- da teoria di eq. diff. ordinarie, sappiamo che le soluz. di eq. del tip. $(\star)$ sono analitiche:

pari $\to\theta$ pari
dispari $\to\theta$ dispari

$$\theta(q)=q^r\sum_{s=0}^{\infty}a_s q^{2s}\qquad a_0\neq0\qquad r\in\mathbb{N}$$

Allora

$$\frac{d}{dq}\theta(q) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s\,(2s+r)\,q^{2s+r-1}$$

$$\frac{d^2}{dq^2}\theta(q) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s\,(2s+r)(2s+r-1)\,q^{2s+r-2}$$

$$-\sum_{s=0}^{\infty} a_s(2s+r)(2s+r-1)\,q^{2s+r-2} + 2\sum_{s=0}^{\infty} a_s(2s+r)\,q^{2s+r} + (1-2\lambda)\sum_{s=0}^{\infty} a_s q^{2s+r}$$

$s = s'+1$

$\downarrow$

$$-a_0 r(r-1)\,q^{r-2} - \sum_{s'=0} a_{s'+1}(2s'+r+2)(2s'+r+1)\,q^{2s'+r} + 2\sum_{s=0}^{\infty} a_s(2s+r)\,q^{2s+r} + \sum_{s=0}^{\infty}(1-2\lambda)a_s q^{2s+r} = 0$$

$\downarrow$

$$-a_0 r(r-1)q^{r-2} - \sum_{s=0}^{\infty}\Big[-(2s+r+2)(2s+r+1)a_{s+1} + \big(2(2s+r)+1-2\lambda\big)a_s\Big]\cdot q^{2s+r} = 0$$

Serie si annulla se coeff. di diverse potenze si annullano

$\Rightarrow$ $r(r-1)=0$ $\rightarrow$ $r=0,1$ (no $a_0=0$ perché se no $a_s=0$ $\forall s$, vedi sotto)

$$a_{s+1} = \frac{4s+2r+1-2\lambda}{(2s+r+2)(2s+r+1)}\,a_s$$

$\rightarrow$ calcolo iterativo di a_s

$\rightarrow$ se $a_N=0$ per un N, allora anche $a_{N+k}=0$ $\forall k\in\mathbb{N}$.

Vediamo se serie converge

Per grandi s $\quad \frac{a_{s+1}}{a_s} \xrightarrow[s\to\infty]{} \frac{1}{s}$

$\Rightarrow$ stesso comportam. asintotico di

$$\sum_{s=0}^{\infty} \frac{q^{2s}}{s!} = e^{q^2}$$

Quindi serie θ converge, ma suo andam. è tale che $\theta e^{-q^2/2}$ ha andam. esponenziale a $q \to \infty$

$\Rightarrow$ generici valori di λ (E) devono essere scartati

$\rightarrow$ Soluz. accettabili solo per valori di λ t.c.
$\exists N$ t.c. $a_{N+1}=0$ (allora serie diventa un polinomio)

$$a_{N+1} = 0 \quad (a_N \neq 0) \rightarrow \quad 4N + 2r + 1 - 2\lambda_{N,r} = 0$$

$$\rightarrow \quad \lambda_{N,r} = \underbrace{r + 2N}_{= n \in \mathbb{N}} + \frac{1}{2} \qquad \begin{matrix} N \in \mathbb{N} \\ r = 0,1 \end{matrix}$$

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

$$a_{s+1} = \frac{-4(N-s)}{(2s+r+2)(2s+r+1)} a_s$$

cioè

$$a_s = \frac{-4(N-s+1)}{(2s+r)(2s+r-1)} a_{s-1} = \frac{(-4)^2 (N-s+1)(N-s+2)}{(2s+r)(2s+r-1)(2s+r-2)(2s+r-3)} a_{s-2} =$$

$$= (-4)^s \frac{N!}{(N-s)!} \frac{r!}{(2s+r)!} a_0$$

→ Polinomi di Hermite $\quad \Theta_{N,r} = \sum_{s=0}^{N} a_s q^{2s+r}$

$$\varphi_m(q) = e^{-q^2/2} \Theta_m(q)$$

$m=0 \rightarrow N=0, r=0$

$$\varphi_0(q) = a_0 e^{-q^2/2}$$

$$\psi_0(x) = a_0 e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$$

(even)

Gaussiana con centro in $x=0$ e larghezza $\Delta x = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}$

$\left(\Delta p = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}}\right)$

$m=1 \rightarrow N=0, r=1$

$$\varphi_1(q) = a_0 q e^{-q^2/2}$$

$$\psi_1(x) = a_0 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x\, e^{-\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)x^2}$$

(odd)