Eq. di Schrödinger 1d

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

Solut. part. $\Psi(x,t) = \psi(x)\,\varphi(t)$

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

$$\hat H\psi(x) = E\psi(x) \qquad E \geq V_{min}$$

↳ risolto da una base $\psi_E^{(i)}$ di autofunz. di $\hat H$

i è indice di degenerazione dell'autovalore

Solut. gen. $\Psi(x,t) = \sum_{E,i} a_E^{(i)}\,\psi_E^{(i)}(x)\,e^{-iEt/\hbar}$

$$\hat H\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

↓

Cerchiamo soluzioni nel senso delle distribuzioni. In particolare, si cercano soluzioni continue e derivabili.

Esempio:

$$\psi(x) = \int dp\, e^{-ipx}\,\tilde\psi(p)$$

funz. L^2 può essere espansa in una base di funz. $\in \mathcal{A}$ dove $L^2 \subset \mathcal{A}$

Inoltre, se V ha al più discontinuità finite, allora anche la derivata prima ψ_E' deve essere continua.

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

Integriamo questa eq. in un intervallo $[-\epsilon,\epsilon]$ attorno $x=0$

$$\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\psi_E''(x)\,dx = \frac{2m}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\underbrace{V(x)\,\psi_E(x)}_{(*)} - \underbrace{\frac{2mE}{\hbar^2}\int_{-\epsilon}^{\epsilon}\underbrace{\psi_E(x)}_{\text{continua}}\,dx}_{\to 0 \text{ per } \epsilon\to 0}$$

$\|$

$$\psi_E'(\epsilon) - \psi_E'(-\epsilon)$$

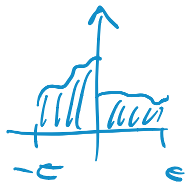
discontinuità di ψ_E' in $x=0$ per $\epsilon\to0$

$\to 0$ per $\epsilon\to0$

(*) Se V è continuo in $x=0$ $\quad \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \underbrace{V}_{\text{cont.}}\psi \to 0$ per $\epsilon \to 0$

$\Rightarrow$ $\psi_E'(x)$ dev'essere continua in $x=0$ per risolvere l'equazione.

Se V è disc. in $x=0$ con disc. finita

allora $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} V\psi$  $\to 0$ per $\epsilon \to 0$

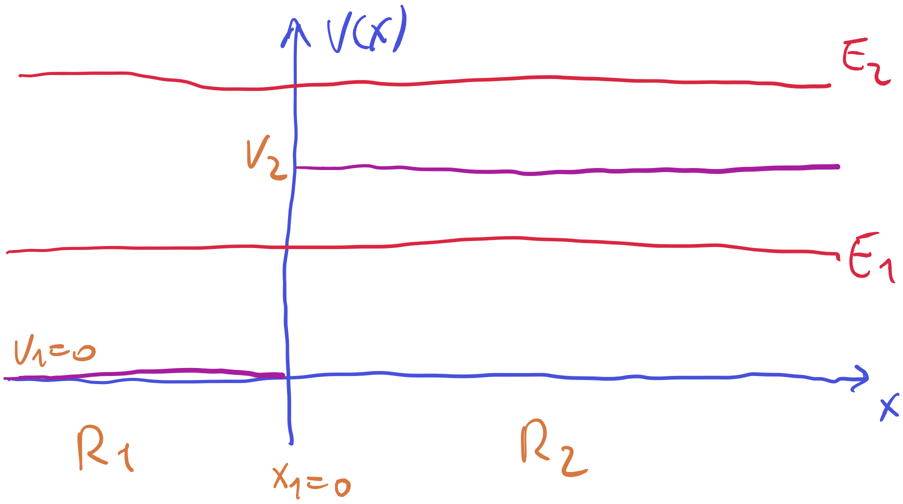
$\Rightarrow$ $\psi_E'(x)$ dev'essere continua in $x=0$.

Se invece V ha disc. infinita in $x=0$

allora $\int_{-\epsilon}^{\epsilon} V\psi\, dx$ non tende necessariam. a zero

e ψ_E' non è necessariam. continua.

GRADINO DI POTENZIALE



Ci sono solo due regioni R_j $j=1,2$ dove risolvere l'eq. di Sch.

$$\psi'' + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_j)\psi = 0 \qquad j=1,2$$

$R_1)$ $x \leq 0$ $\qquad \psi_1'' + \frac{2mE}{\hbar^2}\psi_1 = 0 \qquad p_1 = \sqrt{2mE}$

$$\psi_1(x) = c_1^+ e^{ip_1x/\hbar} + c_1^- e^{-ip_1x/\hbar}$$

$$\psi_1'(x) = \frac{ip_1}{\hbar} c_1^+ e^{ip_1x/\hbar} - \frac{ip_1}{\hbar} c_1^- e^{-ip_1x/\hbar}$$

$R_2)$ $x \geq 0$ $\qquad \psi_2'' + \frac{2m}{\hbar}(E - V_2)\psi_2 = 0 \qquad p_2 = \sqrt{2m(E-V_2)}$

$$\psi_2(x) = c_2^+ e^{ip_2x/\hbar} + c_2^- e^{-ip_2x/\hbar}$$

$$\psi_2'(x) = \frac{ip_2}{\hbar} c_2^+ e^{ip_2x/\hbar} - \frac{ip_2}{\hbar} c_2^- e^{-ip_2x/\hbar}$$

Condizioni di raccordo

$$\begin{cases} \psi_1(0) = \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) = \psi_2'(0) \end{cases} \longrightarrow \begin{cases} c_1^+ + c_1^- = c_2^+ + c_2^- \\ p_1(c_1^+ - c_1^-) = p_2(c_2^+ - c_2^-) \end{cases}$$

Condizioni di limitatezza?

$E = E_2 > V_2 \rightsquigarrow p_1, p_2 \in \mathbb{R}$, ψ_1 e ψ_2 sono oscillanti e quindi polinom. limitate all'∞

$\to$ non ci sono condiz. da imporre.

$E = E_1$ con $0 < E_1 < V_2 \rightsquigarrow p_1 \in \mathbb{R}$, ma $p_2 = i\sqrt{2m|E-V_2|} \in i\mathbb{R}$
$\equiv i q_2 \quad q_2 \in \mathbb{R}$

$\hookrightarrow \psi_2(x) = c_2^+ e^{-q_2 x/\hbar} + c_2^- e^{q_2 x/\hbar} \qquad x \geq 0$

non è polin. lim. a $+\infty$

$\Rightarrow$ bisogna imporre $c_2^- = 0$

Consideriamo prima $E = E_2 > V_2$ $(p_1, p_2 \in \mathbb{R})$

$$\begin{cases} c_1^+ + c_1^- = c_2^+ + c_2^- \\ p_1(c_1^+ - c_1^-) = p_2(c_2^+ - c_2^-) \end{cases}$$

sist. lin. di due eq. in 4 incognite

$\downarrow$

La soluz. di qto sist. ci permette di ricavare due delle 4 cost. in funz. delle altre due

$\leftarrow$ Soluz. generale dell'eq. diff. lin. del 2° ord. dip. da due param.

Noi sappiamo che se ψ è soluz., allora anche ψ^* è soluzione. Se ψ è complessa allora ψ^* è genericam. indip. da ψ $\Rightarrow$ ogni altra soluz. sarà comb. lin. di ψ e ψ^*.

$\Rightarrow$ ci basta trovare una soluz. particolare di $\psi'' + \frac{2m}{\hbar}(E - V(x))\psi = 0$

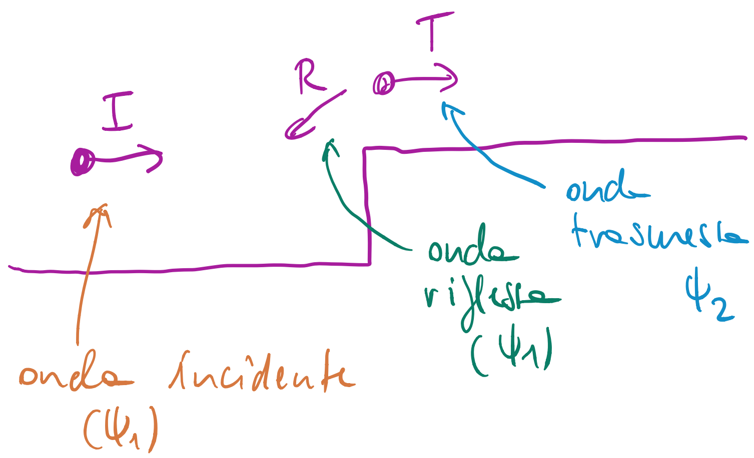
e poi prendere il suo complesso coniugato.

Cerchiamo una soluz. particolare con $c_2^- = 0$

$$\begin{cases} \psi_1 = c_1^+ e^{ip_1 x/\hbar} + c_1^- e^{-ip_1 x/\hbar} \\ \psi_2 = c_2^+ e^{ip_2 x/\hbar} + \cancel{c_2^- e^{-ip_2 x/\hbar}} \end{cases}$$

comb. lin. di onde piane di cui una va verso destra e una che va verso sinistra

Vogliamo interpretare la soluz. particolare come descrivente un processo di URTO in cui una particella arriva da sinistra, urta col gradino e avrà una certa probabil. di essere trasmessa e una di essere riflessa.



Vogliamo risolvere il sist. ($c_2^- = 0$)

$$\begin{cases} c_1^+ + \underline{c_1^-} = \underline{c_2^+} \\ p_1(c_1^+ - \underline{c_1^-}) = p_2 \underline{c_2^+} \end{cases}$$

← risolviamo nelle incognite c_1^- e c_2^+

↓

$$\begin{cases} p_2(c_1^+ + c_1^-) - p_1(c_1^+ - c_1^-) = 0 \\ p_1 c_1^+ + p_1 c_1^+ = (p_1 + p_2) c_2^+ \end{cases}$$

↓

$$\begin{cases} c_1^- = \dfrac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2}\, c_1^+ \\[2ex] c_2^+ = \dfrac{2p_1}{p_1+p_2}\, c_1^+ \end{cases}$$

$\downarrow$

Soluz. particolare $(E > V_2)$:

$$\psi_E(x) = c_1^+ \begin{cases} e^{ip_1x/\hbar} + \dfrac{p_1-p_2}{p_1+p_2}\, e^{-ip_1x/\hbar} & x < 0 \\[2ex] \dfrac{2p_1}{p_1+p_2}\, e^{ip_2x/\hbar} & x \geq 0 \end{cases} \qquad (\star)$$

Possiamo fissare la normalizzazione, scegliendo $c_1^+ = 1$

$\rightsquigarrow$ $\psi_E^*(x)$ è indip. da $\psi_E(x)$, cioè $\psi_E^*(x) \not\propto \psi_E(x)$

$\Rightarrow$ Soluz. generale per $E > V_2$ è

$$\alpha\, \psi_E(x) + \beta\, \psi_E^*(x)$$

Soluz. $\Psi(x,t)$ relativa alla soluz. particolare trovata? $(\star)$

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

Corrente di probab. :

$$\bar{J}(\bar{x},t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^* \bar{\nabla}\psi - \psi\bar{\nabla}\psi^*\right) \quad \text{in } 3d$$

In 1d

$$J(x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left(\psi^*\psi' - \underbrace{\psi(\psi')^*}_{(\psi^*\psi')^*}\right) \quad \in \mathbb{R}$$

$$\psi_E^* = \begin{cases} (c_1^+)^* e^{-ip_1x/\hbar} + (c_1^-)^* e^{ip_1x/\hbar} & x \in R_1 \\ (c_2^+)^* e^{-ip_2x/\hbar} & x \in R_2 \end{cases}$$

$$\psi_E' = \begin{cases} \frac{ip_1}{\hbar}\left(c_1^+ e^{ip_1x/\hbar} - c_1^- e^{-ip_1x/\hbar}\right) & x \in R_1 \\ \frac{ip_2}{\hbar} c_2^+ e^{ip_2x/\hbar} & x \in R_2 \end{cases}$$

$$J(x,\cancel{t}) = \begin{cases} \dots \\ \frac{\hbar}{2mi}\left[|c_2^+|^2 \frac{ip_2}{\hbar} - |c_2^+|^2\frac{(-ip_2)}{\hbar}\right] & x \in R_2 \end{cases}$$

J_I incid. $\qquad J_R$ rifl.

$$= \begin{cases} \frac{p_1}{m}|c_1^+|^2 - \frac{p_1}{m}|c_1^-|^2 & x \in R_1 \\ \frac{p_2}{m}|c_2^+|^2 & x \in R_2 \end{cases}$$

J_T trasm.

Date le correnti, possiamo def. dei coeff. di RIFLESS. e TRASMIS.

Coeff. di RIFLESSIONE: $R = \left|\frac{J_R}{J_I}\right| = \left|\frac{c_1^-}{c_1^+}\right|^2 = \left(\frac{p_1 - p_2}{p_1 + p_2}\right)^2 \leq 1$

Coeff. di TRASMISSIONE: $T = \left|\frac{J_T}{J_I}\right| = \frac{p_2 |c_2^+|^2}{p_1 |c_1^+|^2} = \frac{p_2}{\cancel{p_1}} \frac{4p_1^2}{(p_1+p_2)^2} = \frac{4p_1 p_2}{(p_1+p_2)^2} \leq 1$

$\downarrow$

$R + T = 1$

$\left[4p_1p_2 = (p_1+p_2)^2 - (p_1 - p_2)^2\right]$

Consideriamo $E = E_1$, cioè $0 < E < V_2$

In questo caso dobbiamo IMPORRE che $c_2^- = 0$ affinché la soluz. sia accettabile (cioè polin. lim.)

$p_2 = iq_2 \qquad q_2 \in \mathbb{R}$

$$\psi_E(x) = \begin{cases} e^{ip_1x/\hbar} + \dfrac{p_1 - iq_2}{p_1 + iq_2} e^{-ip_1x/\hbar} & x \in R_1 \\ \dfrac{2p_1}{p_1+iq_2} e^{-q_2x/\hbar} & x \in R_2 \end{cases}$$

$\nwarrow$ $\psi_E^* \psi_E' - (\psi_E^* \psi')^* = 0$ $\qquad c_1^+ = 1$ per normalizz.

- $\psi_E(x)^*$ è soluz. di eq. Sch., ed è ancora accettab.

Ma $\psi_E(x)^*$ è lin. dip. da $\psi_E(x)$:

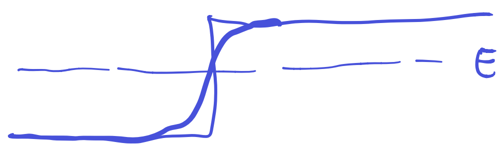
$(p_1 + iq_2)\psi_E = (p_1 - iq_2)\psi_E^*$

⇒ la deg. di E per $0 < E < V_2$ è $= 1$

mentre per $E > V_2$ era $= 2$.

$$- J(x,t) = \begin{cases} \frac{p_1}{m}|c_1^+|^2 - \frac{p_1}{m}|c_1^-|^2 \\ \\ 0 \end{cases}$$

$$\rightarrow \quad R = \left|\frac{c_1^-}{c_1^+}\right|^2 = 1 \qquad T = 0$$



Cosa succede per $E < 0$?

In questo caso, sia in R_1 che in R_2 abbiamo andam. esponenziale ($p_1 = iq_1$ $p_2 = iq_2$)

→ due condiz. di accettab. (a $+\infty$ e $-\infty$)

$$\psi = \begin{cases} c_1^- e^{q_1 x/\hbar} \\ c_2^+ e^{-q_2 x/\hbar} \end{cases}$$

a questo dobbiamo imporre continuità di ψ e ψ'

↓

condiz. di raccordo

$$\begin{cases} c_1^- = c_2^+ \\ q_1 c_1^- = -q_2 c_2^+ \end{cases} \rightarrow \quad \begin{matrix} c_1^- = 0 \\ c_2^+ = 0 \end{matrix}$$

→ cioè $\psi = 0$.