

## Serie e trasformate di Fourier.

Il caso della particella in un pozzo di potenziale infinito ci ha portato ad individuare il set completo di autovettori della forma:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

grazie ai quali una qualsiasi funzione di stato  $f(x)$  della particella può essere scritta come:

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

con i coefficienti  $c_n$  dati da:

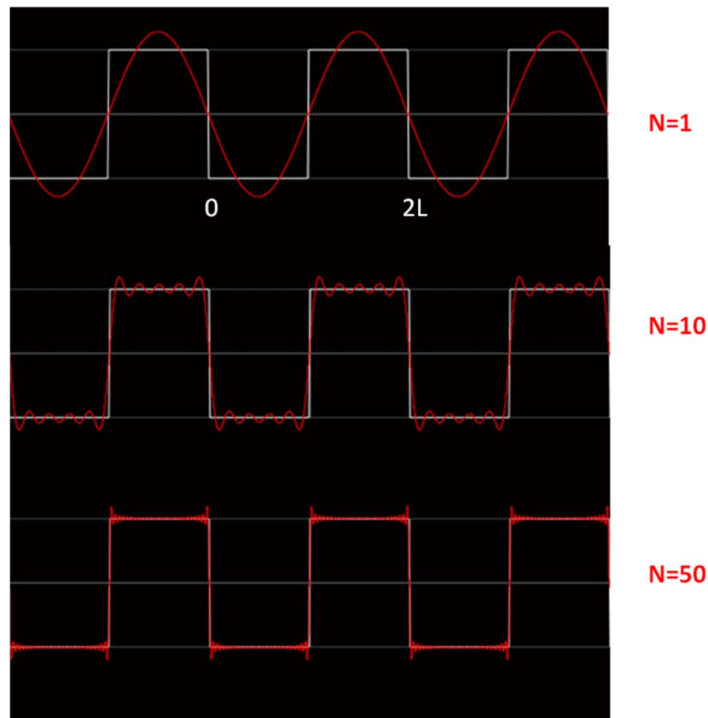
$$c_n = \int_0^{+a} \psi_n^*(x) f(x) dx$$

In realtà questo caso è un esempio di sviluppo in serie di Fourier di una funzione. Per l'esattezza, è lo sviluppo di una funzione periodica, con periodo  $[-a, a]$ , dispari...

In generale, se abbiamo una funzione periodica e integrabile, essa può essere sviluppata in una serie di funzioni sin e cos. Supponiamo che la funzione  $f(x)$  sia periodica nell'intervallo  $[-\pi, \pi]$ , essa può essere scritta come :

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin(nx) + \sum_{n=1}^{\infty} b_n \cos(nx)$$

Un esempio di sviluppo in serie è riportato per la funzione quadra nella figura seguente. L'accordo dello sviluppo con la funzione è tanto migliore quanto elevato è il numero  $n$  di componenti considerate.



Un modo più compatto per scrivere lo sviluppo in serie si ottiene considerando, dalla formula di Eulero, che:

$$\sin(\varphi) = \frac{e^{i\varphi} - e^{-i\varphi}}{2i}, \quad \cos(\varphi) = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2}$$

Sostituendo nell'equazione precedente, si ottiene:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{inx} \quad (1)$$

Con

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} f(x) e^{-inx} dx \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (2)$$

Se la funzione è periodica su un periodo  $2L$ , le precedenti equazioni diventano:

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n e^{\frac{i n \pi x}{L}} \quad (3)$$

e

$$c_n = \frac{1}{2L} \int_{-L}^L f(x) e^{-\frac{i n \pi x}{L}} dx \quad n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots \quad (4)$$

Nel caso di una funzione non periodica, l'idea è di estendere i risultati trovati al caso  $L \rightarrow \infty$ .

Si moltiplica la sommatoria precedente per  $1 = \frac{\pi L}{L \pi}$  e si definisce la nuova variabile  $k = \frac{n\pi}{L}$ . La (3) diventa:

$$f(x) = \frac{\pi}{L} \sum_{k=0, \pm \frac{\pi}{L}, \pm 2 \frac{\pi}{L} \dots} \frac{L}{\pi} c_k e^{ikx}$$

$\frac{\pi}{L}$  l'intervallo  $\Delta k$  di cui mi muovo nel calcolare la sommatoria. Se definisco  $F(k) = \frac{L}{\pi} c_k$  la precedente equazione diventa:

$$f(x) = \Delta k \sum_{k=0, \pm \frac{\pi}{L}, \pm 2 \frac{\pi}{L} \dots} F(k) e^{ikx}$$

Ora, se  $L \rightarrow \infty$ ,  $\Delta k \rightarrow dk$  e la sommatoria tenderà ad un integrale:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk$$

Con  $F(k)$  esprimibile estendendo al caso  $L \rightarrow \infty$  la (4):

$$F(k) = \frac{L}{\pi} c_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

Solitamente le precedenti due equazioni vengono riportate ridefinendo  $F(k)$  con una costante moltiplicativa tale che:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} F(k) e^{ikx} dk \quad (5)$$

con

$$F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (6)$$

Si definisce  $F(k)$  la trasformata di Fourier di  $f(x)$ ; viceversa  $f(x)$  è l'antitrasformata di Fourier di  $F(k)$ .

Le equazioni (5) e (6) permettono di esprimere una funzione della variabile  $x$ ,  $f(x)$ , come una serie continua di componenti  $e^{ikx}$  pesate da una funzione di distribuzione  $F(k)$ .

### Delta di Dirac

La funzione delta di Dirac è definita come:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } x \neq 0 \\ \infty & \text{per } x = 0 \end{cases}$$

con  $\int_{x_1}^{x_2} \delta(x) dx = 1$  per  $x_1 < 0 < x_2$  e zero altrimenti.

Si vede facilmente che  $\int f(x)\delta(x)dx = f(0)$ . Infatti, quando  $x \neq 0$  non importa quanto valga  $f(x)$ , il contributo all'integrale sarà 0 perchè  $\delta(x) = 0$ . Per  $x=0$ ,  $f(x)=f(0)$  e può essere portato fuori dall'integrale, quindi:

$$\int f(x)\delta(x)dx = f(0) \int \delta(x)dx = f(0) \quad (7)$$

Si può facilmente generalizzare:

$$\int f(x)\delta(x - x_0)dx = f(x_0) \quad (8)$$

Se ora consideriamo la definizione di trasformata di Fourier (5) e (6) e sostituiamo  $F(k)$  con  $\delta(k)$  otteniamo:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(k)e^{ikx} dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \quad (7)$$

E

$$\delta(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx} dx = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} \quad (8)$$

!! La funzione delta di Dirac può essere vista come antitrasformata di Fourier di una costante  $(\frac{1}{\sqrt{2\pi}})$ .

## PARTICELLA LIBERA (sintesi della trattazione Griffiths)

Per una particella libera, non soggetta cioè ad alcun potenziale, l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo è:

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

o, per semplificare:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = -k^2 \psi(x) \quad \text{con} \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Si tratta della stessa equazione che abbiamo trovato all'interno della buca infinita, dove in effetti il potenziale era nullo. Avremo perciò le stesse soluzioni ma attenzione, mentre in quel caso dovevamo imporre le condizioni che le funzioni d'onda fossero nulle al di fuori della buca, qui non abbiamo condizioni vincolanti di questo tipo.

La generica soluzione, in spazio complesso, è:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

e la soluzione completa, contenente la dipendenza temporale:

$$\Psi_k(x, t) = Ae^{ik(x - \frac{\hbar k}{2m}t)} + Be^{-ik(x + \frac{\hbar k}{2m}t)} \quad (9)$$

che possiamo scrivere in forma più compatta come:

$$\boxed{\Psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}} \quad \text{con} \quad k = \pm \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (10)$$

Per  $k > 0$ ,  $\Psi_k(x, t)$  è un'onda che viaggia verso  $x$  crescenti, viceversa per  $k < 0$ .

Si notino i seguenti punti fondamentali:

- La soluzione più generale (1), che comprende onde che si propagano in entrambe le direzioni, NON è uno stato stazionario
- NON c'è quantizzazione (per avere quantizzazione devono esserci dei vincoli), l'energia ha uno spettro continuo.
- $\Psi_k(x, t)$  è autovettore di H con autovalore  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$
- La velocità di propagazione di  $\Psi_k(x, t)$  è  $v = \frac{\hbar |k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$  ....non quella che avrebbe una particella classica con la stessa energia  $E$ . Questa è la velocità di fase di un'onda e si trova imponendo che l'argomento delle funzioni d'onda (nel nostro caso  $kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t$ ), sia costante nel tempo.
- !!! NON è normalizzabile. Supponiamo di prendere una delle due componenti dell'equazione (9):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_k^* \Psi_k dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} dx = \infty$$

Le soluzioni a variabili separate nel caso di particella libera non hanno significato fisico.

**Non esiste una particella libera di energia definita.**

Posso però utilizzare funzioni del tipo (10) per costruire delle soluzioni che abbiano anche significato fisico. Non essendo una base discreta, la sovrapposizione di stati la otterrò integrando su una certa distribuzione in  $k$ , ovvero avrò:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)} dk \quad (11)$$

con  $\phi(k)$  la funzione di distribuzione che mi descrive il PACCHETTO D'ONDA.

In sostanza, quello che in una sommatoria discreta di stati (es buca infinita) erano i coefficienti  $c_n$  di ogni autostato, qui è la quantità  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \phi(k) dk$ . Il motivo per cui si sceglie di fattorizzare la quantità  $\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$  lo vediamo subito.

Supponiamo di conoscere la forma del pacchetto d'onda al tempo 0,  $\psi(x, 0)$ . Se lo esprimiamo come in (11), ovvero se determiniamo  $\phi(k)$ , siamo in grado di determinare il valore della f.o. ad ogni tempo  $t$ . Ma la (11) ci dice:

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \phi(k) e^{ikx} dk$$

che ci dice che  $\psi(x, 0)$  è la trasformata di Fourier inversa di  $\phi(k)$  (vd equazioni 7 e 8). Quindi  $\phi(k)$  sarà la trasformata di Fourier di  $\psi(x, 0)$ :

$$\phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx$$

Ricapitolando: le soluzioni dell'equazione di Schrodinger per la particella libera non sono dei buoni stati in quanto non normalizzabili. Possiamo però utilizzarle per costruire degli stati normalizzabili ovvero dei pacchetti d'onda. Una particella libera non è quindi pensabile come una particella di energia definita, ma come una sovrapposizione di componenti di diversa energia.

### Velocità di fase e velocità di gruppo

Ora, immaginiamo di avere un pacchetto che viaggia verso valori crescenti di  $x$  ( $k$  positivi in eq. (10)) e stretto in  $k$ , costituito cioè da onde con valori di energia molto vicini tra loro, diciamo in un intervallo attorno a  $k_0$ . Una simulazione di un pacchetto d'onde simile su può effettuare qui: [http://www.physics.smu.edu/fattarus/wave\\_packet.html](http://www.physics.smu.edu/fattarus/wave_packet.html).

Con il trascorrere del tempo il pacchetto, viaggiando verso destra, inizierà ad allargarsi. Questo perchè le diverse componenti che lo costituiscono hanno  $k$  diversi e quindi velocità diverse.

Come abbiamo visto precedentemente, la velocità di ogni singola componente  $k$  sono vale  $v = \frac{\hbar |k|}{2m} = \sqrt{\frac{E}{2m}}$

. Questa è chiamata **velocità di fase**. La velocità del pacchetto e quindi della particella però è diversa. Questo concetto si applica non solo alla meccanica quantistica ma in generale ogni volta che si ha un pacchetto di onde. La velocità del pacchetto, o **velocità di gruppo**, si può ricavare (vedi Griffiths, sezione 2.4) e, per un pacchetto come in (11), vale:

$$v_g = \frac{d}{dk} \left( \frac{\hbar k^2}{2m} \right)_{k=k_0} = \frac{\hbar k_0}{m}$$

Che è il doppio della velocità di fase e che è la velocità di una particella classica di energia.

## Operatore momento e $k$ .

Se applichiamo l'operatore momento  $p$  alla funzione  $\Psi_k(x, t)$  espressa dall'eq. (10) abbiamo:

$$\begin{aligned} p \Psi_k(x, t) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \left( A e^{i \left( kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right)} \right) \\ &= -i\hbar A (ik) e^{i \left( kx - \frac{\hbar k^2}{2m} t \right)} \\ &= \hbar k \Psi_k(x, t) \end{aligned}$$

Quindi la quantità  $\hbar k$  è autovalore di  $p$ . Molto spesso  $k$  stesso viene chiamato momento. La cosa importante è che quando io considero un pacchetto d'onda come in (11), definito dalla funzione di distribuzione  $\phi(k)$ , quest'ultima è in sostanza una distribuzione dei momenti.

Se ora io faccio un pacchetto il più stretto possibile spazialmente, cioè in  $x$ , quello che trovo è che per farlo mi serve una distribuzione  $\phi(k)$  molto ampia in  $k$ , cioè che coinvolge un ampio range di valori del momento. È questa una ennesima conferma ed enunciazione del principio di indeterminazione di Heisenberg.

## Spettri continui ed estensione del formalismo della MQ

Il formalismo della MQ come lo abbiamo descritto, in termini di operatori hermitiani e dei loro autovettori e autovalori, non è direttamente applicabile al caso di spettro continuo dell'energia. Il motivo è che in questo caso semplicemente non abbiamo una definizione di prodotto interno tra gli autostati (ricordate l'integrale del modulo quadro della (10) fa  $\infty$ ) e quindi tutte le proprietà degli hermitiani.

Viene introdotta per questo motivo una definizione di quello che potremmo chiamare pseudo-prodotto interno. È una sorta di espediente matematico che consente di estendere il formalismo che conosciamo ai casi continui. Vediamolo attraverso gli esempi degli operatori  $p$  e  $x$ .

Questa parte viene trattata per completezza ma non è ritenuta argomento di esame.

Un autostato dell'operatore  $p$ ,  $f_p(x)$ , è tale se soddisfa la seguente equazione:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} f_p(x) = p f_p(x)$$

che ha soluzione generale:

$$f_p(x) = A e^{ipx/\hbar}$$

Il problema è che, nell'intervallo  $[-\infty, +\infty]$ , le funzioni non sono integrabili al quadrato, quindi non appartengono a nessuno spazio di Hilbert. Tuttavia, se ci limitiamo a valori reali di  $p$  possiamo, riguardando la definizione della funzione delta di Dirac, definire un prodotto interno tra funzioni di questo tipo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{p'}^*(x) f_p(x) dx = |A|^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i(p-p')x/\hbar} dx = |A|^2 2\pi\hbar \delta(p-p')$$

Se scegliamo come fattore di normalizzazione  $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$  abbiamo che la relazione precedente può essere scritta:

$$\langle f_{p'} | f_p \rangle = \delta(p-p')$$

che può essere vista come una estensione della condizione di ortonormalità, con la delta di Dirac che prende il posto della delta di Kronecker.

Si definisce questa relazione **ortonormalità alla Dirac**. Vale anche la completezza del set di funzioni  $f_p(x)$ . Infatti, ricordando la definizione di trasformata di Fourier, ogni funzione  $f(x)$  potrà essere scritta come:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) f_p(x) dp = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} c(p) e^{ipx} dp$$

con la funzione dei coefficienti  $c(p)$  che è cioè la trasformata di Fourier di  $f(x)$ .

In modo analogo, se consideriamo l'operatore posizione  $x$  e ci chiediamo quali siano le sue autofunzioni  $g_{\bar{x}}(x)$  corrispondenti ad autovalori  $\bar{x}$ , dovremo scrivere l'equazione:

$$xg_{\bar{x}}(x) = \bar{x}g_{\bar{x}}(x)$$

Si ha che una buona soluzione è

$$g_{\bar{x}}(x) = \delta(x - \bar{x})$$

Le autofunzioni così definite sono ortonormali alla Dirac:

$$\langle g_{\bar{x}} | g_{\bar{x}'} \rangle = \delta(\bar{x} - \bar{x}')$$

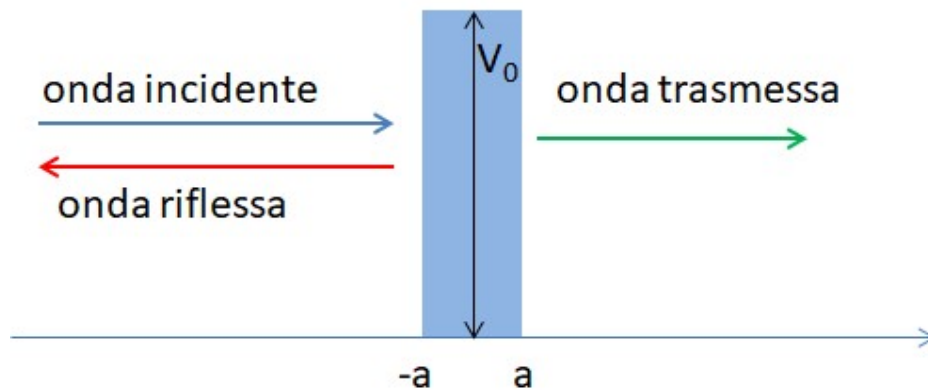
e anche complete, in quanto qualsiasi funzione  $f(x)$  potrà sempre essere espressa come:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} c(y)g_y(y)dy = \int_{-\infty}^{+\infty} c(y)\delta(x - y)dy$$

semplicemente ponendo  $c(y) = f(y)$ . E' chiaro che questa formulazione degli autovettori di  $x$  non ha grande utilità pratica, ma serve a far rientrare in una trattazione formale comune il caso di operatori con spettro continuo.

## Scattering ed effetto tunnel

Supponiamo che un pacchetto d'onde viaggi verso  $x$  positive e incontri una barriera di potenziale  $V_0$  nell'intervallo  $[0, a]$ . Problemi di questo tipo, in cui si vuole descrivere l'effetto di ostacoli nel percorso di una particella, si chiamano problemi di *scattering* o di diffusione. Data la natura ondulatoria della materia il comportamento si rivela molto diverso dal caso classico. Noi vediamo come problemi del genere possono essere impostati commentando questo esempio, cioè quello di una barriera finita. Le stesse considerazioni possono essere applicate a casi con ostacoli diversi. S



Il problema si affronta considerando che:

- Il pacchetto d'onde sarà una distribuzione delle autofunzioni  $\Psi_k(x, t) = Ae^{i(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t)}$ ; posso perciò risolvere il problema per le singole componenti per avere un suggerimento su cosa succede (l'evoluzione della forma del pacchetto per effetti dello scattering è un calcolo affrontabile solo con simulazioni al PC in ogni caso...)
- Per semplicità risolvo il problema al tempo  $t=0$ .

Consideriamo il caso più interessante in cui l'energia dell'onda incidente è  $E < V_0$ .

**Per  $x < -a$ :** Avrò l'onda incidente e un'onda riflessa dalla barriera che torna indietro, quindi la soluzione generale sarà:

$$\Psi(x) = e^{ikx} + Re^{-ikx}, \text{ con } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

(per ridurre il numero di lettere assumo 1 il fattore moltiplicazione dell'onda incidente e chiamo R quello dell'onda riflessa)

**Per  $x > a$ :** Avrò solo un'onda che viaggia in avanti:

$$\Psi(x) = Te^{ikx}$$

Per  $-a < x < a$ : Qui l'equazione di Schrodinger diventa, ricordando che  $E < V_0$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E \psi(x)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) \psi(x) \quad (4)$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = \tilde{k} \psi(x) \quad \text{con } \tilde{k} = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Che ha soluzione:

$$\Psi(x) = A e^{\tilde{k}x} + B e^{-\tilde{k}x}$$

Nota che all'interno della barriera l'onda ha una forma esponenziale.

Ora, le costanti R, T, A e B si determinano imponendo la continuità di  $\Psi(x)$  e di  $\frac{d}{dx} \Psi(x)$  ai bordi della barriera.

**Nota1** La continuità di  $\Psi(x)$  è richiesta perché altrimenti anche il suo modulo quadro non sarebbe continuo e quindi la probabilità di trovare la particella in quei punti non sarebbe definita.

**Nota2** La continuità di  $\frac{d}{dx} \Psi(x)$  è richiesta dalla seguente considerazione. Supponiamo di integrare una volta l'equazione di Schrödinger scritta in (4), in un intorno piccolo del punto  $x = a$ , si avrà:

$$\frac{d}{dx} \psi(x) \Big|_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} = \frac{2m}{\hbar^2} \int_{a-\varepsilon}^{a+\varepsilon} (V(x) - E) \psi(x) dx$$

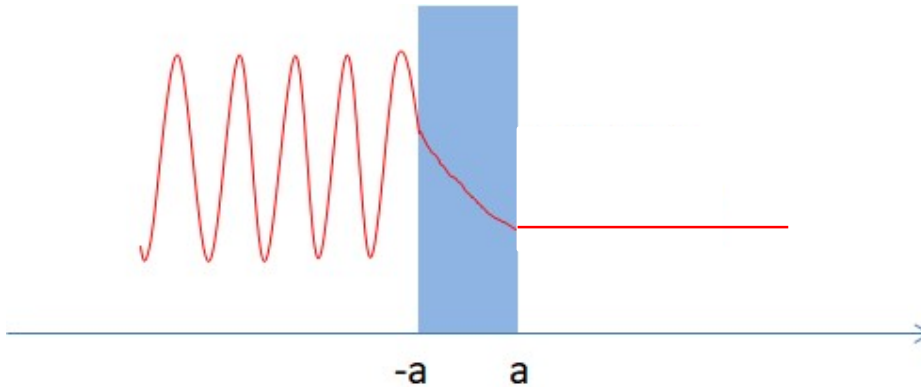
L'integrale che ho a destra, a meno che V non sia infinito, rimane una quantità piccola a piacere man mano che diminuisco  $\varepsilon$ . E così' dovrà quindi essere la quantità a sinistra dell'uguale, che mi dice che  $\frac{d}{dx} \psi(x)$  deve essere continua. Attenzione: nel caso di buca infinita noi avevamo infatti imposto solo la continuità di  $\psi(x)$  e non di  $\frac{d}{dx} \psi(x)$ .

**Nota3** All'interno della barriera potrei pensare di avere solo un'onda che si propaga verso destra. Nonostante questo sia ciò che sembra più intuitivo non ho nessun motivo però per dire che questo avvenga. Ed infatti, pur predominando la parte di onda che decade esponenzialmente, la soluzione all'interno della barriera è comunque una combinazione lineare delle due componenti e quando vado ad imporre le condizioni di continuità mi accorgo che il coefficiente A non può essere zero.

La soluzione finale, che non dimostriamo, ci permette di fornire una stima del quadrato del coefficiente T, equindi della probabilità di trovare la particella a destra della barriera, che vale:

$$|T|^2 \approx e^{-2\tilde{k}2a}$$

Ovvero, la probabilità scende esponenzialmente con la larghezza della buca e con la radice della differenza tra energia E della particella e il potenziale della barriera. La figura seguente dà una rappresentazione grafica dell'andamento di  $|\psi(x)|^2$ .



A sinistra della barriera si sommano onda incidente e riflessa, dando origine ad un'onda stazionaria. A destra della barriera c'è un'onda piana, il cui modulo quadro è costante.