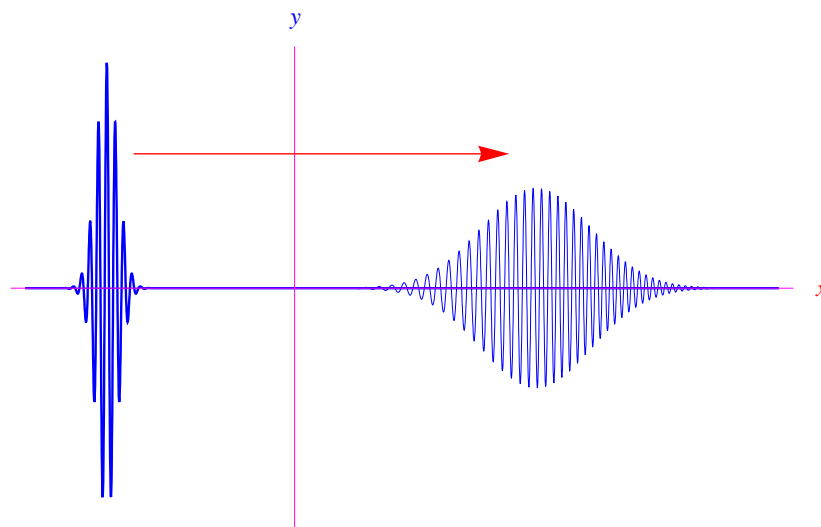


## Matematica Open Source

$$\frac{d}{dx} f(x) \quad \sum_{k=0}^{+\infty} a_k \quad \int f(x) dx \quad \oint_{\Gamma} (X dx + Y dy + Z dz)$$

### Problemi unidimensionali in Meccanica quantistica

Marcello Colozzo



# Indice

<b>1</b>	<b>Introduzione</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Particella libera</b>	<b>2</b>
2.1	Autofunzioni dell'energia . . . . .	6
<b>3</b>	<b>L'algebra dei ket conosce l'Analisi di Fourier</b>	<b>10</b>
<b>4</b>	<b>Uno spettroscopio matematico</b>	<b>11</b>
<b>5</b>	<b>Un paio di casi particolari</b>	<b>12</b>
<b>6</b>	<b>Dinamica quantistica di una particella in moto unidimensionale</b>	<b>14</b>
<b>7</b>	<b>Moto di un pacchetto d'onde</b>	<b>16</b>
7.1	Velocità di gruppo . . . . .	19
7.2	Sparpagliamento di un pacchetto d'onde. Il fenomeno della dispersione . . . . .	21
<b>8</b>	<b>Alcuni esercizi svolti</b>	<b>22</b>
<b>A</b>	<b>Calcolo di integrali gaussiani</b>	<b>28</b>

## 1 Introduzione

In Meccanica quantistica non è possibile vincolare una particella a muoversi lungo una retta, in quanto il principio di indeterminazione di Heisenberg distrugge il concetto di traiettoria. In ogni caso, l'utilità dei problemi unidimensionali deriva dalla possibilità di ricondurre un problema 3D a uno o più problemi 1D (esempio: particella in una scatola, quale analogo 3D della particella su un segmento. Oscillatore armonico 3D, quale analogo 3D di un oscillatore 1D).

Prima di discutere l'equazione di Schrödinger per un generico problema 1D, esaminiamo alcune nozioni preliminari, iniziando dal comportamento secondo la meccanica classica. Nello specifico, consideriamo una particella di massa  $m$  vincolata a muoversi lungo l'asse  $x$  dove agisce un campo di forze conservativo di energia potenziale  $V(x)$ . L'hamiltoniana della particella è

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x) \quad (1)$$

Potremmo scrivere le equazioni di Hamilton, ma preferiamo soffermarci sulla conservazione dell'energia meccanica di tale sistema, ovvero la (1) scritta in funzione della velocità anziché dell'impulso:

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V(x), \quad (2)$$

il cui valore è univocamente determinato dalle condizioni iniziali. Precisamente, se  $t_0$  è l'istante iniziale si ha

$$x(t_0) = x_0, \quad v(t_0) = v_0$$

Infatti, con tali condizioni iniziali il valore dell'energia è fissato una volta per tutte:

$$\frac{1}{2}mv_0^2 + V(x_0) = E \equiv \text{costante} \quad (3)$$

Inoltre, dalla (2) ricaviamo la velocità scalare della particella

$$v = \sqrt{\frac{2}{m} [E - V(x)]},$$

per cui imponendo la realtà di  $v$

$$E \geq V(x),$$

giacché nel caso contrario, la velocità scalare è immaginaria. Segue che per un'assegnata energia potenziale  $V(x)$ , la particella si muove esclusivamente nella regione

$$\Lambda(E) = \{x \in \mathbb{R} \mid E \geq V(x)\} \quad (4)$$

che si chiama *regione classicamente accessibile*. Ciò si ricava anche dalla (2):

$$E = \underbrace{\frac{1}{2}mv^2}_{\geq 0} + V(x) \geq V(x)$$

Ad esempio, per una particella libera da forze è  $V(x) \equiv 0$  per cui

$$\Lambda(E) = \begin{cases} (-\infty, +\infty), & \forall E \geq 0 \\ \emptyset, & E < 0 \end{cases}$$

Infatti

$$V(x) \equiv 0 \implies E = \frac{1}{2}mv^2 \geq 0, \quad \forall v$$

Precisamente, per  $v > 0$  la particella compie un moto rettilineo uniforme da  $-\infty$  a  $+\infty$ , viceversa se  $v < 0$ . In tutti gli altri casi la regione classicamente accessibile è l'insieme delle soluzioni della disequazione

$$E \geq V(x)$$

Ad esempio, per l'oscillatore armonico unidimensionale è

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

Quindi per una assegnata energia meccanica  $E > 0$ , la regione classicamente accessibile è

$$\Lambda(E) = [x_{\min}, x_{\max}],$$

dove

$$x_{\min} = -\frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}, \quad x_{\max} = \frac{1}{\omega} \sqrt{\frac{2E}{m}}$$

**Definizione 1** Uno stato meccanico di energia  $E$  è uno **stato legato** se la regione classicamente accessibile è un insieme limitato. Uno stato meccanico di energia  $E$  è uno **stato di diffusione** se la regione classicamente accessibile non è un insieme limitato.

Ad esempio, per l'oscillatore armonico ogni stato meccanico è uno stato legato (fig. 1). Per una particella libera, ogni stato meccanico è uno stato di diffusione.

Per il potenziale di fig. 2, per valori dell'energia meccanica pari rispettivamente  $E_A, E_B, E_C$ , troviamo (nell'ordine) stati legati e uno stato di diffusione.

## 2 Particella libera

Conosceremo il sistema quanto-meccanico *più fesso*: la particella libera. In particolare, una particella priva di spin che compie un moto nonrelativistico unidimensionale (lungo l'asse  $x$ ). Prima di buttarci a capofitto sull'hamiltoniano e le sue compatibilità (i.e. commuta o meno) con qualche osservabile etc., rammentiamo questo fatto: gli esercizi di meccanica quantistica hanno in comune il

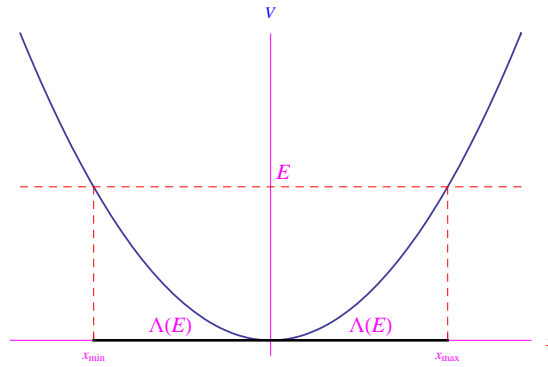


Figura 1: Per l'oscillatore armonico unidimensionale, ogni stato meccanico è uno stato legato.

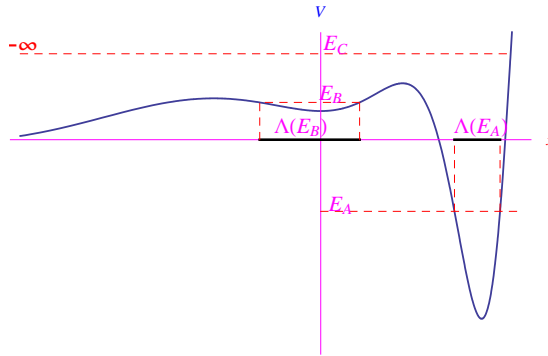


Figura 2: Per questo potenziale, lo stato meccanico di energia  $E_A$  è uno stato legato. La particella non può uscire dalla regione  $\Lambda(E_A)$ . Anche lo stato meccanico con energia  $E_B$  è uno stato legato. Invece, lo stato di energia  $E_C$  è uno stato di diffusione.

calcolo dello spettro dell'hamiltoniano. Cioè, autovalori e autoket dell'energia e relativa degenerazione. E non fa eccezione la particella libera. Sta di fatto che lo spettro dell'hamiltoniano ci permette di ricostruire la funzione d'onda del sistema, senza andare a risolvere direttamente l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo (che è un'equazione differenziale alle derivate parziali, quindi non facile). Siccome stiamo considerando una particella priva di spin e di massa  $m$  vincolata sull'asse  $x$  (dove agisce un potenziale  $V(x)$ ), l'equazione di Schrödinger è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V(x) \psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}, \quad (5)$$

assumendo noto lo stato iniziale  $\psi_0(x) = \psi(x, t_0)$ . Rammentiamo che la forma operatoriale di tale equazione è

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \quad (6)$$

dove stiamo utilizzando la notazione di Dirac. Qui  $\hat{H}$  è ovviamente l'operatore hamiltoniana, per cui ci chiediamo: in quale spazio di Hilbert è definito. Nel caso in esame è

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

dove  $\hat{x}$  e  $\hat{p}$  rispettivamente le osservabili posizione ed impulso. Lo spazio di Hilbert in cui è definito questo operatore è  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  ovvero lo spazio funzionale i cui elementi sono le funzioni (da  $R$  a  $C$ ) di quadrato sommabile:

$$f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}) \implies \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2 dx < +\infty$$

Anziché mettere mani su (5), supponiamo di poter risolvere lo spettro dell'hamiltoniano ovvero

$$\begin{aligned}\hat{H} |E_n\rangle &= E_n |E_n\rangle, & E_n \in \sigma_d(\hat{H}) \\ \hat{H} |E\rangle &= E |E\rangle, & E \in \sigma_c(\hat{H})\end{aligned}\quad (7)$$

dove  $\sigma_d(\hat{H})$  e  $\sigma_c(\hat{H})$  sono rispettivamente lo spettro discreto e lo spettro continuo (per semplicità stiamo considerando lo spettro non degenere). Quindi

$$\sigma(\hat{H}) = \sigma_d(\hat{H}) \cup \sigma_c(\hat{H}) \quad (8)$$

Abbiamo utilizzato la notazione di Dirac. Ora ci poniamo la domanda: in quale base di  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$  scrivo le (7). Uno spazio di Hilbert ammette infinite basi ortonormali. Quelle fisicamente significative sono:

$$\begin{aligned}\{|x\rangle\}, & \quad x \in (-\infty, +\infty) \\ \{|p\rangle\}, & \quad p \in (-\infty, +\infty)\end{aligned}$$

La prima è costituita dagli autoket della osservabile posizione:

$$\hat{x} |x\rangle = x |x\rangle$$

La seconda è costituita dagli autoket della osservabile impulso:

$$\hat{p} |p\rangle = p |p\rangle$$

Il tutto è ortonormalizzato sulla delta di Dirac:

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'), \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p')$$

e relative relazioni di completezza:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle \langle x| dx = \hat{1}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} |p\rangle \langle p| dp = \hat{1} \quad (9)$$

Le componenti degli autoket  $|E_n\rangle, |E\rangle$  nella base delle coordinate sono:

$$\langle x|E_n\rangle = u_n(x), \quad \langle x|E\rangle = u_E(x),$$

dove  $u_n(x)$  e  $u_E(x)$  sono le autofunzioni dell'energia. Dalle relazioni di ortonormalità e di completezza segue

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_n^*(x) u_{n'}(x) dx = \delta_{nn'}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} u_E^*(x) u_{E'}(x) dx = \delta(E - E')$$

A questo punto osserviamo che

$$\{|E_n\rangle\}_{E_n \in \sigma_d(\hat{H})} \cup \{|E\rangle\}_{E \in \sigma_c(\hat{H})} \quad (10)$$

è un sistema ortonormale completo nello spazio di Hilbert  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ . Cioè se  $|\psi_0\rangle$  è il ket di stato iniziale della particella, posso esprimere tale vettore come combinazione lineare dei vettori di base. Però in questo caso non sto considerando la base delle coordinate o dell'impulso, bensì la (10). Ciò è una conseguenza di una nota proprietà degli operatori autoaggiunti in uno spazio di Hilbert separabile. In parole povere, nel caso dell'hamiltoniano i suoi autovettori costituiscono una base ortonormale (se normalizzati, ovviamente) dello spazio di Hilbert dove l'operatore è definito. Quindi:

$$|\psi_0\rangle = \sum_n c_n^{(0)} |E_n\rangle + \int_{\sigma_c(\hat{H})} c^{(0)}(E) |E\rangle \quad (11)$$

**Esercizio 2** Esprimere i coefficienti  $c_n^{(0)}$ ,  $c^{(0)}(E)$  in termini dello stato iniziale.

Se applico allo stato (11) l'operatore di evoluzione temporale, ottengo lo stato a tutti i tempi:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |E_n\rangle + \int_{\sigma_c(\hat{H})} c(E,t) |E\rangle \quad (12)$$

**Esercizio 3** Qual è l'espressione dei coefficienti  $c_n(t)$ ,  $c(E,t)$ ?

Le componenti del ket di stato (12) nella base delle coordinate sono:

$$\langle x|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) u_n(x) + \int_{\sigma_c(\hat{H})} c(E,t) u_E(x),$$

cioè la funzione d'onda della particella a tutti i tempi, giacché  $\langle x|\psi(t)\rangle = \psi(x,t)$ . Vediamo quindi che è necessario conoscere autofunzioni e autovalori dell'energia.

Dopo questa lunga premessa, ritorniamo alla particella libera. L'hamiltoniano è

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

Quindi

$$[\hat{H}, \hat{p}] = 0$$

Cioè gli operatori  $\hat{H}$ ,  $\hat{p}$  hanno in comune un sistema completo di autoket:

$$\begin{aligned} \hat{H} |E, p\rangle &= E |E, p\rangle \\ \hat{p} |E, p\rangle &= p |E, p\rangle \end{aligned} \quad (13)$$

Determiniamo gli autovalori dell'energia:

$$\underbrace{\hat{H} |E, p\rangle}_{=E|E,p\rangle} = \frac{\hat{p}^2}{2m} |E, p\rangle = \frac{1}{2m} \left( \underbrace{\hat{p}^2 |E, p\rangle}_{p^2|E,p\rangle} \right)$$

Segue

$$\frac{p^2}{2m} |E, p\rangle = E |E, p\rangle$$

Siccome per definizione di autovettore è  $|E, p\rangle \neq 0$ , si ha necessariamente

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (14)$$

che ricorda la meccanica classica, giacché  $E$  è proprio l'energia della particella libera. Vediamo che mentre  $p \in (-\infty, +\infty)$ , l'autovalore  $E \geq 0$ . Cioè

$$\begin{aligned} \sigma(\hat{H}) &\equiv \sigma_c(\hat{H}) = [0, +\infty) \\ \sigma(\hat{p}) &\equiv \sigma_c(\hat{p}) = (-\infty, +\infty) \end{aligned} \quad (15)$$

In altre parole, le due osservabili energia e impulso hanno uno spettro puramente continuo. Studiamo la **degenerazione**. Per semplicità, riscriviamo la (13) come

$$\begin{aligned} \hat{H} |p\rangle &= E |p\rangle \\ \hat{p} |p\rangle &= p |p\rangle \end{aligned} \quad (16)$$

Lo spettro di  $\hat{p}$  è non degenere: per un assegnato autovalore  $p \in (-\infty, +\infty)$  esiste uno ed un solo autostato  $|p\rangle$ . Lo spettro di  $\hat{H}$  è **degenere due volte**: per un assegnato autovalore  $E > 0$  esistono due autostati distinti:  $|p\rangle$  e  $|-p\rangle$ . In poche parole, questi due stati hanno la stessa energia  $E = \frac{p^2}{2m}$ . Fa eccezione l'autostato dell'energia con autovalore nullo ( $E = 0$ ) a cui corrisponde l'unico stato  $|p = 0\rangle$ .

**Esercizio 4** Ha un qualche significato fisico l'autovalore  $E = 0$ ?

Notiamo che anche in meccanica classica succede qualcosa di simile. Una particella libera di energia definita, può avere impulso  $+p$  o  $-p$  (a seconda della direzione (positiva o negativa dell'asse  $x$ ) su cui si muove). Però in meccanica quantistica c'è una novità: siccome  $\{|p\rangle\}$  è un sistema ortonormale completo nello spazio di Hilbert che stiamo considerando, la particella libera può trovarsi in uno stato

$$|\psi\rangle = \int_{p_0-\Delta p}^{p_0+\Delta p} c(p) |p\rangle dp$$

Uno stato del genere è noto come *pacchetto d'onde*, per una ragione che apparirà chiara più avanti. In modo più semplice: un autostato dell'impulso è uno stato eccezionale, e ci aspettiamo invece, una sovrapposizione lineare di tali autostati ovvero un integrale. In una situazione più realistica:

$$|\psi\rangle = \alpha_+ |p\rangle + \alpha_- |-p\rangle, \quad \alpha_{\pm} \in \mathbb{C}$$

Qui lo stato è una sovrapposizione lineare degli autostati  $|p\rangle$  e  $|-p\rangle$ . È chiaro che non ha senso dire che la particella si “sposta” nella direzione positiva o negativa dell'asse  $x$ . Per avere uno stato di impulso definito, *devo* misurare tale osservabile impulso, in quanto l'operazione di misura mi fa *collassare* il ket di stato in uno degli autoket  $|\pm p\rangle$ . Solo dopo aver eseguito la misura, posso dire che la particella si trova in uno stato di impulso definito (che è ovviamente uno dei due  $|\pm p\rangle$  con ampiezza di probabilità  $\alpha_{\pm}$ ).

## 2.1 Autofunzioni dell'energia

Abbiamo determinato gli autokets simultanei dell'energia e dell'impulso (eq. 16). Ora chiediamoci: come scriviamo le autofunzioni? Rammentiamo che la funzione d'onda di un sistema quantistico (privo di spin, altrimenti avrei solo la parte orbitale) il cui ket di stato è  $|\psi\rangle$ , altro non è che la generica componente di tale vettore nella base delle coordinate. Nel caso unidimensionale:

$$\psi(x) = \langle x|\psi\rangle, \quad \forall |\psi\rangle \in \mathcal{H}$$

essendo  $\mathcal{H}$  lo spazio di Hilbert associato al sistema. E non fanno eccezione le autofunzioni di un qualunque operatore lineare. A questo punto, ci conviene determinare le autofunzioni dell'impulso in quanto più semplici da calcolare, come mostreremo. Scriviamo la seconda delle (16) nella base delle coordinate:

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = p \langle x|p\rangle \quad (17)$$

Ma  $\langle x|p\rangle \equiv u_p(x)$  è proprio l'autofunzione che stiamo cercando (precisamente, è autofunzione di  $\hat{p}$  con autovalore  $p$ , ma è anche autofunzione di  $\hat{H}$  con autovalore  $E = \frac{p^2}{2m}$ ). Esplicitiamo il primo membro della (17); un tentativo ingenuo è

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = \langle x| \cdot \left( \underbrace{\hat{p}|p\rangle}_{=p|p\rangle} \right) = p \langle x|p\rangle,$$

per cui la (17) diviene una identità e come tale non risolve il problema. Tentiamo in quest'altro modo

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = (\langle x|\hat{p}) \cdot |p\rangle$$

Ma  $\langle x|\hat{p}$  altro non è che la rappresentazione dell'operatore  $\hat{p}$  nella base delle coordinate. Come è ben noto:

$$\langle x|\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$$

Precisamente

$$\langle x|\hat{p}|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}\langle x|\psi\rangle$$

In particoalre

$$\langle x|\hat{p}|p\rangle = -i\hbar\frac{d}{dx}u_p(x)$$

Sostituendo nella (17)

$$-i\hbar\frac{du_p}{dx} = pu_p,$$

che è un'equazione differenziale lineare del primo ordine nella funzione incognita  $u_p(x)$ . Tale equazione si integra facilmente per separazione di variabili:

$$\frac{du_p}{u_p} = \frac{i}{\hbar}dx \implies \ln u_p = \frac{i}{\hbar}px + C,$$

dove  $C$  è una costante di integrazione. Segue

$$u_p(x) = Ne^{\frac{i}{\hbar}px}, \quad (18)$$

dove abbiamo fatto intervenire una nuova costante di integrazione

$$N = e^C, \quad \forall C \in \mathbb{R}$$

dove convenzionalmente abbiamo assunto  $C$  reale. Segue

$$N > 0, \quad \forall C \in \mathbb{R} \quad (19)$$

Anzi,  $N$  dovrebbe essere una costante di *normalizzazione*. Però vediamo che la (18) definisce una classe di funzioni ad un parametro (reale)  $p \in (-\infty, +\infty)$  non normalizzabili i.e. non di quadrato sommabile in  $(-\infty, +\infty)$ . Quindi

$$u_p \notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R}), \quad \forall p \in (-\infty, +\infty)$$

Ciò si esprime dicendo che le (18) sono *autofunzioni improprie* (contrariamente a quelle normalizzabili, che si dicono *autofunzioni proprie*). Da un punto di vista fisico, un'autofunzione impropria definisce uno stato quanto-meccanico in cui esiste una probabilità finita di trovare la particella in  $x = \pm\infty$ . Ciò è consistente anche classicamente, poiché una particella libera che obbedisce alla meccanica classica, se non è in quiete compie un moto rettilineo uniforme lungo tutto l'asse reale. Vediamo comunque, in che modo esprimere la normalizzazione almento in termini formali. Ricordiamo che deve essere

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p') \quad (20)$$

Siccome  $\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx = \hat{1}$  (relazione di completezza) il primo membro della precedente lo posso scrivere come

$$\begin{aligned} \langle p|p'\rangle &= \langle p|\hat{1}|p'\rangle = \left\langle p\left|\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x| dx\right|p'\right\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} u_p(x) u_{p'}(x) dx \end{aligned}$$

Sostituendo nella (20):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u_p(x) u_{p'}(x) dx = \delta(p - p')$$



Tenendo conto della (18):

$$N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx = \delta(p-p') \quad (21)$$

L'integrale a primo membro ci ricorda la trasformata di Fourier. In generale:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{f}(k) e^{ikx} dk, \quad (22)$$

dove  $\hat{f}(k)$  è appunto la trasformata di Fourier di un'assegnata funzione  $f(x)$  che supponiamo continua e assolutamente integrabile su tutto  $\mathbb{R}$  (in modo da ammettere trasformata di Fourier). Invertendo

$$\hat{f}(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) e^{-ikx} dx \quad (23)$$

Supponiamo di voler determinare la trasformata di Fourier di  $f(x) \equiv 1$ . Ma è chiaro che tale funzione non è assolutamente integrabile in  $(-\infty, +\infty)$ , però la sua trasformata di Fourier pur non esistendo come funzione, esiste come distribuzione. Precisamente

$$\hat{f}(k) = \delta(k)$$

Infatti il secondo membro della (22) diviene

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk = e^0 = 1$$

e siamo a cavallo... Ma questo vuol dire che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dk = 2\pi\delta(k)$$

dove non abbiamo fatto altro che prendere il secondo membro della (22) dopo aver sostituito  $f(x)$  con 1 e  $\hat{f}(k)$  con  $\delta(k)$ . In questo modo l'integrale della (21) è

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}(p-p')x} dx = 2\pi\delta\left(\frac{p-p'}{\hbar}\right) = 2\pi\hbar\delta(p-p') \quad (24)$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo sfruttato una nota proprietà della  $\delta$

$$\delta(ax) = \frac{1}{a}\delta(x)$$

**Osservazione 5** Se avessimo usato la seguente convenzione per le trasformate di Fourier

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

avremmo ottenuto

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ikx} dx = \sqrt{2\pi}\delta(k)$$

Analoghe considerazioni per quanto riguarda la convenzione dei segni  $e^{\pm ikx}$ .

Sostituendo la (24) a primo membro della (21):

$$N^2 2\pi\hbar = 1 \xrightarrow{N>0} N = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}$$

Finalmente

$$u_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

che per quanto detto è anche autofunzione dell'energia con autovalore  $E = \frac{p^2}{2m}$ .

Che cos'è  $u_p(x)$ ? Di solito si legge che è un'onda piana. In realtà, è una *istantanea* di un'onda piana monocromatica. Per vederlo, immaginiamo che la particella sia *preparata* in uno stato iniziale che è autostato dell'impulso con autovalore  $p_0 > 0$  (e quindi autofunzione dell'energia con autovalore  $E_0 = \frac{p_0^2}{2m}$ ). Quindi

$$|\psi_0\rangle = |p_0\rangle$$

Ne consegue lo stato a tutti i tempi

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |\psi_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} |p_0\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p_0^2}{2m} t} |p_0\rangle$$

Quindi la funzione d'onda

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} (p_0 x - E_0 t)}$$

che può essere riscritta come

$$\psi(x, t) = A e^{i(k_0 x - \omega_0 t)}, \quad (25)$$

essendo

$$\begin{aligned} k_0 &= \frac{p_0}{\hbar} \quad (\text{numero d'onde}) \\ \omega_0 &= \frac{E_0}{\hbar} \quad (\text{pulsazione}) \end{aligned} \quad (26)$$

Ma la (25) altro non è che un'onda piana monocromatica che si propaga nella direzione positiva dell'asse  $x$ , con numero d'onde e pulsazione date dalle (26) (cfr. fig. )

Siamo riusciti in tal modo a ricostruire la funzione d'onda di una particella libera inizialmente preparata in un'autofunzione dell'impulso, *senza* sfiorare l'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo. Notiamo comunque che a tutti i tempi lo stato della particella rimane autostato dell'impulso.

### Esercizio 6 Perché?

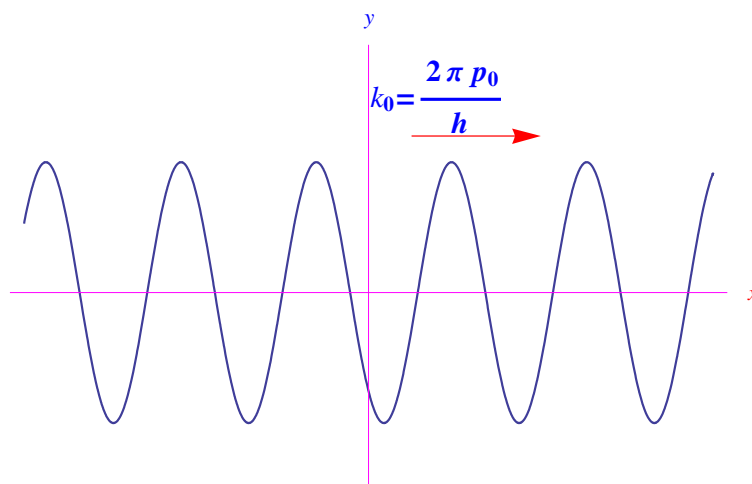


Figura 3: “Istantanea” di un'onda piana monocromatica.

### 3 L'algebra dei ket conosce l'Analisi di Fourier

Prima di proseguire nello studio dei problemi unidimensionali, vediamo come si esegue il cambiamento di base:

$$\{|x\rangle\} \rightarrow \{|p\rangle\} \quad (27)$$

nello spazio di Hilbert associato al sistema (particella soggetta a un potenziale  $V(x)$ ), cioè in  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ . Trattandosi di uno spazio vettoriale di dimensione infinita non numerabile, non possiamo parlare di matrice di passaggio da una base all'altra, anche se poi è possibile generalizzare tale nozione. Ci aspettiamo tuttavia, una matrice unitaria in quanto le basi considerate sono ortonormali. Ricordiamo infatti che sussistono le relazioni di ortonormalità e di completezza (o chiusura):

$$\begin{aligned} \langle x|x'\rangle &= \delta(x-x'), & \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x| &= \hat{1} \\ \langle p|p'\rangle &= \delta(p-p'), & \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle \langle p| &= \hat{1} \end{aligned} \quad (28)$$

Se la particella si trova nello stato  $|\psi\rangle \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ , possiamo scrivere questo vettore indifferente in una delle due basi che stiamo considerando. Precisamente, nella base delle coordinate:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle$$

Nella base degli impulsi:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle \langle p|\psi\rangle$$

È evidente che

$$\begin{aligned} \langle x|\psi\rangle &= \text{componenti del vettore } |\psi\rangle \text{ nella base } \{|x\rangle\}, \quad \forall x \in (-\infty, +\infty) \\ \langle p|\psi\rangle &= \text{componenti del vettore } |\psi\rangle \text{ nella base } \{|p\rangle\}, \quad \forall p \in (-\infty, +\infty) \end{aligned}$$

Utilizzando la relazione di completezza della base delle coordinate, si ha che le componenti base degli impulsi si scrivono:

$$\langle p|\psi\rangle = \langle p| \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \langle p|x\rangle \langle x|\psi\rangle$$

Ma

$$\langle p|x\rangle = u_p^*(x),$$

dove le  $u_p(x)$  sono le autofunzioni dell'impulso, per cui

$$\langle p|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar}px}$$

e

$$\langle x|\psi\rangle = \psi(x)$$

cioè la funzione d'onda nella base delle coordinate (come usualmente è). Segue

$$\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx$$

in cui riconosciamo la trasformata di Fourier della funzione d'onda  $\psi(x)$ . Per evitare sovrapposizioni di simboli, denotiamo con

$$\tilde{\psi}(p) = \langle p|\psi\rangle$$

che definiamo (per ovvi motivi) *funzione d'onda nel dominio degli impulsi*. Per quanto precede:

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx \quad (29)$$

Alla stessa maniera si giunge a quest'altro risultato

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dx \quad (30)$$

E l'usuale funzione d'onda  $\psi(x)$  è denominata *funzione d'onda nel dominio delle coordinate*. Abbiamo così stabilito un risultato importante:

**Conclusione 7** *La funzione d'onda nel dominio degli impulsi è la trasformata di Fourier della funzione d'onda nel dominio delle coordinate.*

Per ciò che riguarda l'interpretazione fisica della funzione d'onda nel dominio degli impulsi, si ha che  $\left| \tilde{\psi}(p_0) \right|^2 dp$  è la probabilità infinitesima di trovare la particella con impulso appartenente all'intervallo infinitesimo  $[p_0, p_0 + dp]$ .

## 4 Uno spettroscopio matematico

Una breve digressione sui risultati del numero precedente. In Teoria dei segnali siamo abituati a considerare la trasformata di Fourier di un segnale (tempo-continuo o tempo-discreto, e in quest'ultimo caso abbiamo una DFT i.e. una trasformata discreta) come la densità spettrale delle componenti sinusoidali del segnale medesimo. In Meccanica quantistica parliamo di densità spettrale delle componenti monocromatiche. Con tale termine intendiamo onde piane monocromatiche ovvero con una particolare lunghezza d'onda e quindi, frequenza. In soldoni: una dipendenza sinusoidale non solo dal tempo ma dalla variabile  $x \pm vt$ , essendo  $v$  la velocità di propagazione dell'onda. Per quanto visto nel numero precedente, ciò si vede nell'evoluzione temporale della funzione d'onda. Comunque sia, supponiamo di considerare il sistema a "bocce ferme" (termine improprio visto che parliamo di meccanica quantistica :), ma suggestivo ed efficace), ovvero in un istante assegnato. Se  $|\psi\rangle$  è il ket di stato in tale istante, abbiamo visto che la funzione d'onda nel dominio delle coordinate è legata alla funzione d'onda nel dominio degli impulsi, dallo sviluppo in integrale di Fourier:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dx \quad (31)$$

Ancora non abbiamo assegnato un qualche significato fisico all'onda associata alla particella. Per il momento sappiamo che  $|\psi(x)|^2$  e  $|\tilde{\psi}(p)|^2$  misurano le ampiezze di probabilità di trovare la particella in  $[x, x + dx]$  e  $[p, p + dp]$  rispettivamente. Eseguiamo il cambio di variabile:

$$p = \hbar k, \quad (32)$$

dove  $k$  è manifestamente il *numero d'onda* dell'onda descritta dalla  $\psi(x, t)$ , rammentando rapidamente la relazione con la lunghezza d'onda

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (33)$$

In tal modo la (31) diventa:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(k) e^{ikx} dx \quad (34)$$

che è appunto una decomposizione in onde piane. Richiamiamo ancora una volta il fatto che ciò si vede meglio in propagazione. Invero, supponendo oche lo stato iniziale della particella (libera) sia

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0(k) e^{ikx} dx, \quad (35)$$

applicando l'operatore di evoluzione temporale, otteniamo la funzione d'onda a tutti i tempi:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dx, \quad (36)$$

dove la pulsazione è data da

$$\omega(k) = \frac{E(k)}{\hbar}$$

Dal momento che stiamo considerando una particella libera, l'autovalore dell'energia è

$$E(p) = \frac{p^2}{2m} \xrightarrow{p=\hbar k} E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m},$$

da cui

$$\omega(k) = \frac{\hbar^2 k}{2m} \quad (37)$$

Dalla (36) che effettivamente, lo sviluppo in integrale di Fourier è una decomposizione in onde piane della funzione d'onda della particella al generico istante  $t$ . Si noti che abbiamo ottenuto questa interpretazione nel caso speciale di una particella libera. Ma appare chiaro che ciò può essere generalizzato a una particella soggetta a un campo di forze di energia potenziale assegnata.

## 5 Un paio di casi particolari

Nel caso generale di una particella vincolata all'asse  $x$  (libera o soggetta a forze conservative), lo sviluppo del più generale ket di stato in un assegnato istante, nella base delle coordinate (in termini di autoket dell'osservabile posizione) si scrive:

$$|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx |x\rangle \langle x|\psi\rangle \quad (38)$$

Nel caso particolare in cui la particella è *esattamente* localizzata nel punto di ascissa  $x_0$ , si ha

$$|\psi\rangle = |x_0\rangle,$$

dove  $|x_0\rangle$  è manifestamente autoket dell'operatore autoaggiunto  $\hat{x}$  con autovalore  $x_0$ :

$$\hat{x} |x_0\rangle = x_0 |x_0\rangle \quad (39)$$

Qual è la funzione d'onda? Risposta

$$\psi(x) = \langle x|x_0\rangle = \delta(x - x_0) \quad (40)$$

Quindi, la funzione d'onda di una particella localizzata in  $x_0$  è una delta di Dirac ivi centrata. La funzione d'onda nel dominio degli impulsi è

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_0) e^{-\frac{i}{\hbar} px} dx \quad (41)$$

Cioè

$$\tilde{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{-\frac{i}{\hbar} p x_0}, \quad \forall p \in (-\infty, +\infty) \quad (42)$$

ovvero un'onda piana. Riguardo alle indeterminazioni  $\Delta x$  e  $\Delta p$ , sono intuitivamente ovvi i risultati

$$\Delta x = 0, \quad \Delta p = +\infty \quad (43)$$

giacché conosciamo la posizione esatta della particella, mentre l'indeterminazione sull'impulso è  $+\infty$  (nello stato di impulso dato dalla (42)). Ne consegue che il prodotto d'indeterminazione si presenta nella forma indeterminata  $0 \cdot \infty$ , per cui non viene violata la relazione di indeterminazione

$$\underbrace{\Delta x \Delta p}_{0 \cdot \infty} \geq \frac{\hbar}{2}$$

Per essere più rigorosi, lo stato quantistico (40) è il limite di una successione di gaussiane. Per il termine  $n$ -esimo di tale successione si calcola il prodotto  $\Delta x \Delta p$ , e facendo il limite per  $n \rightarrow +\infty$  si ha che la forma indeterminata  $0 \cdot \infty$  può essere rimossa con un opportuno artificio, che restituisce una quantità finita  $\geq \frac{\hbar}{2}$ .

**Esercizio 8** È normalizzabile la seguente funzione d'onda?

$$\psi(x) = \delta(x)$$

### Soluzione

Si tratta di calcolare l'integrale generalizzato

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)^2 dx$$

Per una nota proprietà della funzione delta

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = f(0),$$

per un'arbitraria funzione  $f$  sufficientemente regolare. Anche se la delta di Dirac è una funzione tutt'altro che regolare (anzi, è una funzione impropria o meglio una distribuzione), scriviamo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) \delta(x) dx = \delta(0) = +\infty$$

Ne concludiamo che la funzione d'onda assegnata non è normalizzabile. Tuttavia, per quanto vista rappresenta molto bene una particella localizzata nell'origine.

\*\*\*

Vediamo il viceversa. Precisamente, lo stato quanto-meccanico di una particella vincolata all'asse  $x$  è un autostato dell'impulso con autovalore  $p_0$ :

$$\hat{p} |p_0\rangle = p_0 |p_0\rangle$$

Questo vuol dire che la funzione d'onda nel dominio degli impulsi è una delta di Dirac

$$\tilde{\psi}(p) = \delta(p - p_0)$$

La funzione d'onda nel dominio delle coordinate è

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}(p) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(p - p_0) e^{\frac{i}{\hbar} p x} dx$$

Cioè

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_0 x} \equiv u_{p_0}(x) \quad (44)$$

e quindi l'autofunzione dell'impulso con autovalore  $p_0$ , come appunto doveva essere.

## 6 Dinamica quantistica di una particella in moto unidimensionale

Prima di proseguire nello studio della particella libera in moto unidimensionale, consideriamo il caso generale (comunque unidimensionale). Precisamente, abbiamo un hamiltoniano

$$\hat{H} = H(\hat{x}, \hat{p}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}),$$

per un assegnato potenziale  $V(x)$ . Ne consegue che gli “ingredienti operatoriali” del nostro problema sono:

$$\hat{x}, \hat{p}, \hat{H} \quad (45)$$

a cui corrispondono osservabili incompatibili, giacché

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad [\hat{H}, \hat{x}] \neq 0, \quad [\hat{H}, \hat{p}] \neq 0$$

Quindi l'unica cosa che possiamo fare è considerare come base ortonormale dello spazio di Hilbert associato alla particella (ricordo che  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ ) gli autoket della posizione oppure gli autoket dell'impulso. Per una ragione evidente, scegliamo quest'ultimo. Ciò vuol dire che in un istante iniziale ho preparato la mia particella in una sovrapposizione lineare del tipo

$$|\psi_0\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle \langle p|\psi_0\rangle$$

Ma per quanto visto e rivisto precedentemente, ciò altro non è che lo sviluppo in integrale di Fourier della funzione d'onda iniziale in onde piane (autofunzioni dell'impulso):

$$\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0(p) e^{\frac{i}{\hbar}px} dp,$$

ove  $\tilde{\psi}_0(p)$  è la funzione d'onda iniziale nel dominio degli impulsi. Domanda: come sarà il mio sistema a tutti i tempi? Ricordiamo in primis che in meccanica quantistica (sia nonrelativistica che relativistica, e noi stiamo considerando ovviamente la prima) il tempo *non* è un operatore, ma un parametro reale. Nel caso nonrelativistico è chiaramente newtoniano. In tutto questo ci sembra di cavalcare la meccanica classica. Ma c'è una novità: anziché studiare il moto reale della particella lungo l'asse  $x$  (come me appunto si fa in meccanica classica), andiamo a vedere come *cambia* il vettore di stato nello spazio di Hilbert. In simboli:

$$|\psi_0\rangle \xrightarrow{\text{evoluzione temporale}} |\psi(t)\rangle$$

Il lettore astuto avrà intuito che  $|\psi(t)\rangle$  è il risultato dell'applicazione di un qualche operatore lineare al ket iniziale  $|\psi_0\rangle$ . Cioè

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi_0\rangle, \quad \forall t \in [t_0, +\infty)$$

dove  $\hat{U}(t)$  è il predetto operatore lineare che possiamo chiamare *operatore di evoluzione temporale*. Oltre la linearità, è richiesta l'unitarietà:

$$\hat{U}(t)^{-1} = \hat{U}(t)^\dagger$$

Ciò è vitale per la conservazione della norma del vettore di stato (una trasformazione unitaria è una particolare trasformazione isometrica nello spazio di Hilbert). Per chiarimenti e approfondimenti, rimando a un qualunque testo di introduzione alla meccanica quantistica. E da tale consultazione di libri sappiamo che

$$\hat{U}(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t},$$

a patto che  $\hat{H}$  non dipenda esplicitamente dal tempo, che è proprio il nostro caso. Quindi il ket di stato a tutti i tempi è

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} |\psi_0\rangle \quad (46)$$

Ma ciò non ci dice nulla fino a quando non esprimiamo il ket iniziale  $|\psi_0\rangle$  in una qualche base dello spazio di Hilbert. Nel frattempo giova osservare che l'hamiltoniano è il *generatore* dell'evoluzione temporale. Incidentalmente, per  $\hat{H} = \hat{0}$  essendo quest'ultimo l'operatore nullo di  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$ , dalla (46) segue

$$|\psi(t)\rangle \equiv |\psi_0\rangle$$

Cioè a *bocce ferme* il ket di stato ovviamente non cambia.

**Esercizio 9** Cosa può dirci il principio di indeterminazione nel caso  $\hat{H} = \hat{0}$ ? Cosa succederebbe per una particella classica?

Dal momento che abbiamo sviluppato il ket iniziale nella base  $\{|p\rangle\}$ , la (46) si riscrive:

$$|\psi(t)\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})t} \int_{-\infty}^{+\infty} dp |p\rangle \langle p|\psi_0\rangle$$

Ma  $e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})t}$  è un operatore lineare, quindi:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})t} \right] |p\rangle \langle p|\psi_0\rangle dp \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \left[ e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} \underbrace{e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})t} |p\rangle}_{?} \right] \langle p|\psi_0\rangle dp \end{aligned}$$

ove il punto interrogativo simboleggia il fatto che non conosco il risultato dell'applicazione dell'operatore  $e^{-\frac{i}{\hbar}V(\hat{x})t}$  sul generico autoket dell'impulso. Fa eccezione il caso  $V(\hat{x}) \equiv 0$  (**particella libera**):

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} |p\rangle \langle p|\psi_0\rangle dp$$

Ma

$$e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{\hat{p}^2}{2m}t} |p\rangle \underset{\hat{p}^2|p\rangle=p^2|p\rangle}{=} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} |p\rangle$$

Quindi

$$|\psi(t)\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t} |p\rangle \langle p|\psi_0\rangle dp \quad (47)$$

Finalmente otteniamo la funzione d'onda a tutti i tempi

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0(p) e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}\right)t} dp, \quad (48)$$

che è manifestamente uno sviluppo in onde piane  $e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}\right)t}$  di densità spettrale  $\tilde{\psi}_0(p)$  (funzione d'onda iniziale nel dominio degli impulsi). Per una particella soggetta a un potenziale, lo sviluppo (47) (e quindi 48) non è più valido per i motivi visti prima. In questo caso, non possiamo fare altro che risolvere lo spettro dell'Hamiltoniano

$$\sigma(\hat{H}) = \sigma_d(\hat{H}) + \sigma_c(\hat{H}),$$



ovvero risolvere l'equazione agli autovalori

$$\hat{H} |E\rangle = E |E\rangle$$

per poi preparare il sistema in una sovrapposizione lineare degli autoket dell'energia, in modo da poter determinare l'evoluto temporale  $|\psi(t)\rangle$  come già abbiamo avuto modo di esaminare in un numero precedente.

**Esercizio 10** È possibile avere un sistema quanto-meccanico nonrelativistico tale che  $\sigma(\hat{H}) = \emptyset$ ?

## 7 Moto di un pacchetto d'onde

Riscriviamo l'eq. (48) che definisce la funzione d'onda a un generico istante di tempo, di una particella libera

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - \frac{p^2}{2m}t)} dp, \quad (49)$$

essendo  $\tilde{\psi}_0(p)$  la trasformata di Fourier della funzione d'onda iniziale

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx \quad (50)$$

Supponiamo che la funzione d'onda iniziale sia un impulso sinusoidale modulato in ampiezza da una gaussiana (fig. 4):

$$\psi_0(x) = N e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0x}, \quad (51)$$

dove:  $N > 0$  è una costante di normalizzazione;  $\alpha > 0$  è un parametro;  $x_0, p_0$  sono rispettivamente autovalori della posizione e dell'impulso assegnati.

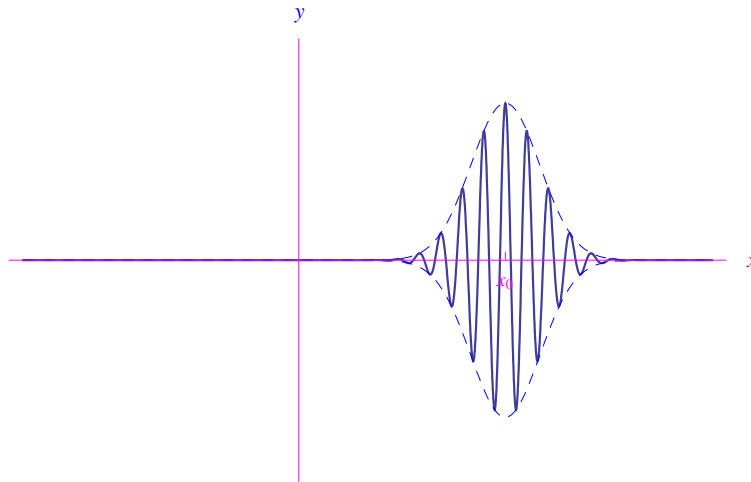


Figura 4: Andamento della parte reale della funzione d'onda iniziale (51). Si tratta di un'oscillazione sinusoidale (o meglio cosinusoidale) involuppata dalle gaussiane  $\pm N e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2}$ .

Prima di determinare la costante di normalizzazione, osserviamo che

$$\alpha = 0 \implies \psi_0(x) = N e^{\frac{i}{\hbar}p_0(x-x_0)}$$

Cioè per  $\alpha = 0$  lo stato iniziale è autostato dell'impulso con autovalore  $p_0$ . Viceversa, per  $\alpha > 0$  lo stato iniziale è (ovviamente) una sovrapposizione di autostati dell'impulso. Dobbiamo perciò determinare  $\tilde{\psi}_0(p)$ . Ma svincoliamoci prima dalla costante di normalizzazione. La densità di probabilità a  $t = 0$  è

$$\rho_0(x) = |\psi_0(x)|^2 = N^2 e^{-\alpha^2(x-x_0)^2}$$

Deve essere

$$1 = \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_0(x) dx = N^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2(x-x_0)^2} dx = N^2 \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha},$$

onde

$$N = \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \quad (52)$$

Il valore medio della posizione nell'istante iniziale è manifestamente  $x_0$ :

$$\langle x \rangle_{t=0} = x_0 \quad (53)$$

**Esercizio 11** Verificare la (53) attraverso un calcolo diretto. Precisamente:

$$\langle x \rangle_{t=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} x \rho_0(x) dx$$

Calcoliamo ora la deviazione quadratica media ovvero la larghezza della gaussiana  $\rho_0(x)$ :

$$(\Delta x)_{t=0} = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle_{t=0})^2 \rangle_{t=0}} = \sqrt{\langle x^2 \rangle_{t=0} - \langle x \rangle_{t=0}^2} \quad (54)$$

Abbiamo

$$\langle x^2 \rangle_{t=0} = \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\alpha^2(x-x_0)^2} dx$$

Eseguendo il cambio di variabile  $\xi = x - x_0$

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle_{t=0} &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} (\xi^2 + 2x_0\xi + x_0^2) e^{-\alpha^2\xi^2} d\xi \\ &= \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} \left( \int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\alpha^2\xi^2} d\xi + 2x_0 \underbrace{\int_{-\infty}^{+\infty} \xi e^{-\alpha^2\xi^2} d\xi}_{=0} + x_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2\xi^2} d\xi \right) \end{aligned}$$

Dall'Appendice A

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \xi^2 e^{-\alpha^2\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha^3}, \quad \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha^2\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}$$

Segue

$$\langle x^2 \rangle_{t=0} = \frac{1}{2\alpha^2} + x_0^2 \quad (55)$$

che sostituita nella (54) restituisce

$$(\Delta x)_{t=0} = \frac{1}{\alpha\sqrt{2}} \quad (56)$$

Osserviamo che 56 oltre ad essere la larghezza della gaussiana  $\rho_0(x)$  è anche l'indeterminazione della posizione iniziale della particella. Inoltre

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0^+} (\Delta x)_{t=0} = +\infty$$

che corrisponde, per quanto visto all'inizio, a uno stato iniziale quale autostato dell'impulso. Ne consegue un'indeterminazione infinita sulla posizione, in accordo al principio di indeterminazione di Heisenberg. Nel limite opposto:

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} (\Delta x)_{t=0} = 0$$

lo stato iniziale è un autostato della posizione con autovalore  $x_0$ . Quindi abbiamo un'indeterminazione nulla sulla posizione, ma un'indeterminazione infinita sull'impulso.

Dopo questa lunga premessa, calcoliamo la funzione d'onda iniziale nello spazio degli impulsi. Sostituendo la (51) nella (50):

$$\tilde{\psi}_0(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\alpha}{\pi^{1/2}}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(x-x_0)^2 + \frac{i}{\hbar}p_0x} e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx$$

Utilizzando la (114) si ottiene (dopo molti calcoli):

$$\tilde{\psi}_0(p) = \sqrt{\frac{1}{\hbar\alpha\pi^{1/2}}} e^{-\frac{1}{2\hbar^2\alpha^2}(p-p_0)^2} e^{-\frac{i}{\hbar}px_0} \quad (57)$$

da cui vediamo che la parte reale di  $\tilde{\psi}_0(p)$  è un'oscillazione sinusoidale modulata in ampiezza da una gaussiana centrata in  $p_0$ . La densità di probabilità per l'impulso è ovviamente

$$\left| \tilde{\psi}_0(p) \right|^2 = \frac{1}{\hbar\alpha\pi^{1/2}} e^{-\frac{1}{\hbar^2\alpha^2}(p-p_0)^2} \quad (58)$$

Possiamo calcolare la larghezza di questa gaussiana ovvero l'indeterminazione sull'impulso, osservando che siccome l'hamiltoniana della particella libera commuta con l'impulso, si ha

$$(\Delta p)_t \equiv (\Delta p)_{t=0} = \sqrt{\langle p^2 \rangle_{t=0} - p_0^2}$$

eseguendo i calcoli:

$$(\Delta p)_t = \frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2}} \quad (59)$$

da cui vediamo che per  $\alpha$  non troppo grande, la  $\left| \tilde{\psi}_0(p) \right|^2$  è estremamente piccata intorno a  $p_0$ , i.e. il contributo dominante delle componenti monocromatiche alla funzione d'onda  $\psi_0(x)$  proviene da quelle prossime a  $p_0$ . Ciò in accordo con il concetto intuitivo di particella, anche se ciò si evince in maniera più evidente dalla distribuzione  $\psi_0(x)$  piccata intorno a  $x_0$ . Abbiamo, cioè, un *pacchetto d'onde gaussiano*. Tale ente fisico che per quanto detto, modella molto bene una particella quantistica, si generalizza a un qualunque involuppo di modulazione, non necessariamente gaussiano.

Studiamo ora l'evoluzione temporale del pacchetto d'onde. Non dobbiamo fare altro che sostituire la (57) nella (49). Dopo calcoli mostruosi:

$$\begin{aligned} \psi(x, t) = & \sqrt{\frac{1}{\pi^{1/2}} \frac{\alpha}{1 + \frac{i\hbar\alpha^2}{m}t}} \cdot \\ & \cdot \exp \left\{ -\frac{1}{2} \frac{\alpha^2}{1 + \frac{i\hbar\alpha^2}{m}t} \left( x - x_0 - \frac{p_0}{m}t \right)^2 + \frac{i}{\hbar} \left[ p_0 \left( x - x_0 \right) - \frac{p_0^2}{2m}t \right] \right\} \end{aligned} \quad (60)$$

a cui corrisponde la densità di probabilità

$$\rho(x, t) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\alpha}{\sqrt{1 + \frac{\hbar^2\alpha^4}{m^2}t^2}} \cdot \exp \left\{ -\frac{\alpha^2}{1 + \frac{\hbar^2\alpha^4}{m^2}t^2} \left( x - x_0 - \frac{p_0}{m}t \right)^2 \right\} \quad (61)$$

che è ancora una gaussiana, però centrata in

$$x(t) = x_0 + \frac{p_0}{m}t \quad (62)$$

noto come *baricentro del pacchetto d'onde*. Dalla (62) vediamo che tale punto si muove come una particella classica di impulso  $p_0$ . La larghezza della gaussiana  $\rho(x, t)$  è

$$(\Delta x)_t = \sqrt{\langle x^2 \rangle_t - \langle x \rangle_t^2}$$

Calcolando si trova:

$$(\Delta x)_t = \frac{1}{\alpha\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \alpha^4}{m^2} t^2} \quad (63)$$

da cui vediamo che la larghezza della predetta gaussiana è una funzione crescente del tempo, e a tempi lunghi è lineare in  $t$ . È istruttivo calcolare il prodotto di indeterminazione  $(\Delta x)_t (\Delta p)_t$ . Tenendo conto delle (63)-(59):

$$(\Delta x)_t (\Delta p)_t = \frac{\hbar}{2} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \alpha^4}{m^2} t^2} \geq \frac{\hbar}{2} \quad (64)$$

in accordo con Heisenberg. Notiamo che per  $t = 0$

$$(\Delta x)_{t=0} (\Delta p)_{t=0} = \frac{\hbar}{2}$$

cioè nello stato iniziale il prodotto di indeterminazione assume il valore minimo previsto dal principio di indeterminazione. Per questa ragione, il pacchetto d'onde gaussiano è noto come *pacchetto di minima indeterminazione*.

## 7.1 Velocità di gruppo

Abbiamo visto che l'evoluzione libera di un pacchetto d'onde gaussiano, conserva la *gaussianità* della forma d'onda iniziale, ma con larghezza monotonamente crescente nel tempo (eq. (63)), conformemente al principio di indeterminazione espresso dalla (64).

Come interpretiamo tali risultati nel paradigma della meccanica ondulatoria? Si tratta di considerare la particella come un sistema di De Broglie – Schrödinger. In altre parole, la funzione d'onda

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{\psi}_0(p) e^{\frac{i}{\hbar} \left( px - \frac{p^2}{2m} \right) t} dp \quad (65)$$

anziché descrivere la propagazione di un'onda di probabilità, descrive un'onda di materia, per cui con ovvio significato dei simboli

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k$$

E dal momento che stiamo considerando una particella libera

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

cosicché

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m} \quad (66)$$

Con tale posizione la (65) si riscrive

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{i[kx - \omega(k)t]} dk, \quad (67)$$

dove  $A(k) \equiv \tilde{\psi}_0(\hbar k)$ :

$$A(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_0(x) e^{-ikx} dx \quad (68)$$

La (67) esprime l'onda di materia attraverso una sovrapposizione lineare di infinite componenti monocromatiche.

A questo punto anziché considerare il caso speciale di un profilo iniziale gaussiano, assumiamo una generica  $\psi_0(x)$  estremamente piccata intorno a  $x_0$ . Precisamente,  $\text{Re} \psi_0(x)$  è un'oscillazione

sinusoidale modulata in ampiezza da un profilo estremamente piccato intorno al predetto punto. In linea di principio, è sempre possibile calcolare i valori medi:

$$\langle x \rangle_{t=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi_0(x)|^2 dx, \quad \langle x^2 \rangle_{t=0} = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 |\psi_0(x)|^2 dx,$$

e quindi  $(\Delta x)_{t=0}$ . In maniera simile calcoliamo  $(\Delta k)_{t=0}$ , per poi verificare la relazione di indeterminazione

$$(\Delta x)_{t=0} (\Delta k)_{t=0} \geq \frac{1}{2} \quad (69)$$

L'evoluto temporale del pacchetto d'onde è dato dalla (67) rammentando che  $\omega(k)$  è data dalla (66). Per una trattazione qualitativa dell'evoluzione dinamica di un pacchetto d'onde, consideriamo una generica  $\omega(k)$  variabile lentamente in funzione di  $k$ , per cui possiamo eseguirne lo sviluppo di Taylor intorno al punto  $k_0$

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \dots \quad (70)$$

Ciò si verifica, ad esempio, se  $A(k)$  è estremamente piccata intorno al predetto  $k_0$  (rammentiamo che tale circostanza si realizza esattamente nel caso speciale di un pacchetto gaussiano che descrive una particella libera, giacché la funzione d'onda  $\tilde{\psi}_0(p)$  è drammaticamente piccata intorno a  $p_0$ , per valori del parametro  $\alpha$  sufficientemente piccoli, come vediamo dalla (59)). Troncando lo sviluppo (70) al termine lineare:

$$\psi(x, t) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 \frac{d\omega}{dk}|_{k_0} - \omega_0)t} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ik(x - \frac{d\omega}{dk}|_{k_0} t)} dk \quad (71)$$

Ma

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ikx} dk = \psi_0(x),$$

cosicché

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} A(k) e^{ik(x - \frac{d\omega}{dk}|_{k_0} t)} dk = \psi_0\left(x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t\right) \quad (72)$$

Ne segue

$$\psi(x, t) \simeq \psi_0\left(x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t\right) e^{i(k_0 \frac{d\omega}{dk}|_{k_0} - \omega_0)t} \quad (73)$$

In altri termini, se  $\omega(k)$  varia lentamente in modo da poter essere linearizzata, la funzione d'onda in un generico istante  $t$  coincide a meno di un inessenziale fattore di fase, con il profilo iniziale traslato di

$$x' = x - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} t \quad (74)$$

Ciò implica che in approssimazione lineare, l'onda si propaga senza deformarsi (fig. 5). È ovvio che la grandezza

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \quad (75)$$

esprime la velocità con cui si sposta il profilo dell'onda. Chiamiamo la (75) *velocità di gruppo* del pacchetto d'onde.

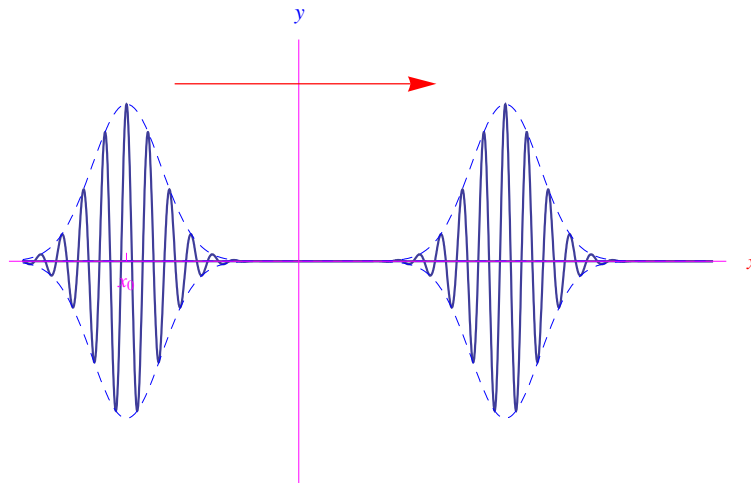


Figura 5: Propagazione di un pacchetto d'onde, senza deformazione del profilo iniziale.

## 7.2 Sparpagliamento di un pacchetto d'onde. Il fenomeno della dispersione

Se nello sviluppo in serie (70) i termini di ordine superiore al primo non sono trascurabili, ovviamente la funzione d'onda a tutti i tempi non è data dalla (73). Incidentalmente, nel caso di una particella libera la cui funzione d'onda iniziale  $\psi(x, 0) \equiv \psi_0(x)$  è un pacchetto gaussiano, abbiamo visto che la larghezza della densità di probabilità  $\rho(x, t)$  (che a sua volta è una gaussiana), è monotonamente crescente in funzione del tempo:

$$(\Delta x)_t = \frac{1}{\alpha\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\hbar^2 \alpha^4}{m^2} t^2} \quad (76)$$

D'altra parte anche  $\text{Re } \psi(x, t)$  è una gaussiana con larghezza monotonamente crescente come illustrato nel grafico di fig. 6.

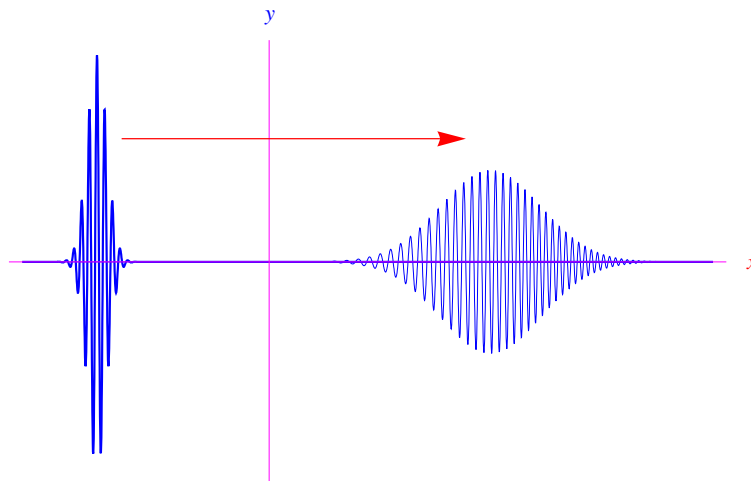


Figura 6: Andamento della parte reale della (60) negli istanti  $t_0 = 0$  e  $t_1 > 0$ , rispettivamente. Si noti l'allargamento della gaussiana che involupa il singolo pacchetto d'onde.

Il predetto allargamento del profilo iniziale è noto come *sparpagliamento* del pacchetto d'onde (non necessariamente gaussiano). Più in generale, ciò si verifica non solo per una particella quale sistema quantistico, ma anche per un pacchetto d'onde elettromagnetiche in un mezzo di indice di rifrazione  $n(k)$ , ove  $k$  è il numero d'onde di singola componente monocromatica. Per essere più

precisi, lo sparpagliamento si verifica se  $\omega(k)$  non è una funzione lineare. Come è noto nella teoria della propagazione ondosa, la dipendenza non lineare da  $k$  definisce il fenomeno della *dispersione* del mezzo in cui il pacchetto d'onde si propaga.

La dispersione è descritta da una nuova grandezza:

$$v_f = \frac{\omega(k)}{k}$$

denominata *velocità di fase*. Se  $\omega(k)$  è lineare i.e.  $\omega(k) = ck$ , dove  $c$  è una costante con le dimensioni di una velocità, si ha:

$$v_f = c$$

e coincide con la velocità di gruppo

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = c$$

È il caso di un pacchetto d'onde elettromagnetiche che si propagano nel vuoto. Infatti, in tal caso è  $\omega(k) = ck$ , con  $c$  velocità della luce nel vuoto. Viceversa, la non linearità implica

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \neq \frac{\omega(k)}{k} = v_f(k),$$

ove  $k_0$  è il numero d'onde della componente monocromatica dominante. In altri termini, le singole onde componenti il pacchetto si propagano a velocità diverse, per cui risulteranno reciprocamente sfasate. Ed è proprio tale sfasamento che determina lo sparpagliamento.

## 8 Alcuni esercizi svolti

**Esercizio 12** *Una particella si muove nel seguente potenziale:*

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \in [-a, -b] \cup (b, a] \\ V_0 > 0, & \text{se } x \in [-b, b] \\ +\infty, & \text{se } |x| > a \end{cases}, \quad (77)$$

graficato in fig. 7.

1. Determinare i valori di  $V_0$  tali che l'hamiltoniana ammetta  $V_0$  come autovalore, con autofunzione costante non nulla in  $x \in [-b, b]$ .
2. Determinare  $V_0$  in modo che  $E = V_0$  sia il livello fondamentale e scrivere la corrispondente autofunzione.
3. Per il valore  $V_0$  di cui al punto precedente, scrivere l'equazione che determina implicitamente l'energia degli stati eccitati.

### Soluzione

Vediamo innanzitutto che tale potenziale ammette solo stati legati. Infatti:

$$\min V(x) = 0, \quad V_{\infty 1} = V_{\infty 2} = +\infty,$$

per cui

$$\sigma_d(H) \subset [0, +\infty) \quad (78)$$

Il quesito 1 chiede di determinare i valori di  $V_0$  per i quali  $V_0$  è autovalore e la corrispondente autofunzione deve essere costante (non nulla) in  $[-b, b]$ . Inoltre  $V(x)$  è pari, per cui le autofunzioni

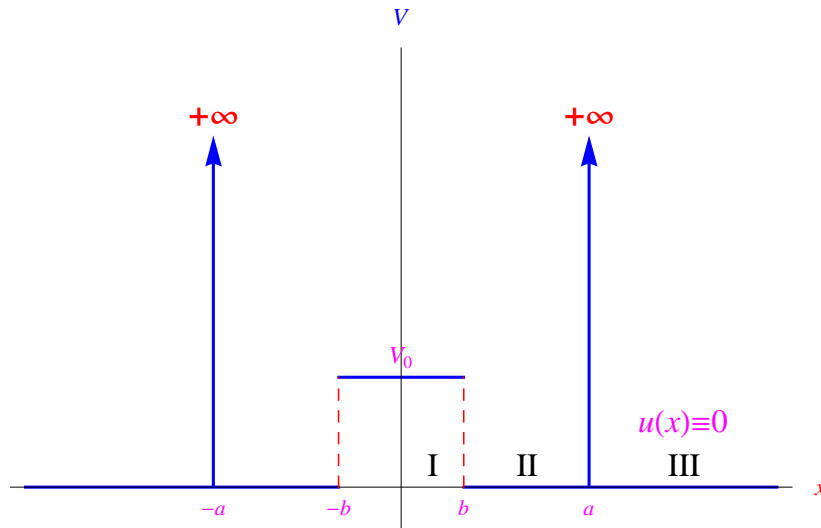


Figura 7: Andamento del potenziale (77).

hanno parità definita, cioè sono o tutte pari o tutte dispari. Ciò suggerisce di studiare le soluzioni solo nella regione  $x \geq 0$ , suddivisa secondo lo schema di fig. 7 nelle sottoregioni I, II e III in corrispondenza delle discontinuità del potenziale:

$$I = [0, b], \quad II = [b, a], \quad III = [a, +\infty), \quad (79)$$

per cui la più generale soluzione dell'equazione di Schrödinger si scrive:

$$u(x) = \begin{cases} u_I(x), & \text{se } x \in [0, b] \\ u_{II}(x), & \text{se } x \in [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in [a, +\infty) \end{cases} \quad (80)$$

Le singole soluzioni vanno raccordate:

$$\begin{cases} u_I(b) = u_{II}(b) \\ u'_I(b) = u'_{II}(b) \end{cases}, \quad u_{II}(a) = 0 \quad (81)$$

Segue

$$u''_I(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) u_I(x) = 0 \quad (82)$$

Il quesito 1 chiede:

$$V_0 > 0 \mid \hat{H}u(x) = V_0 u(x), \quad u(x) \equiv C \neq 0, \quad \forall x \in [-b, b] \quad (83)$$

Dalla (82) segue immediatamente

$$u''_I(x) = 0,$$

il cui integrale generale è

$$u_I(x) = C + C_1 x, \quad \forall C, C_1 \in \mathbb{R}$$

Deve essere

$$u_I(x) = C - \{0\} \implies C_1 = 0 \quad (84)$$

**Osservazione importante.** Stiamo lavorando nella regione  $x \geq 0$  e in I abbiamo ricavato la soluzione costante (84) che dovrà avere parità definita. È chiaro che non può essere dispari, poichè in tal caso si avrebbe:

$$u_I(x) = \begin{cases} C - \{0\}, & \text{se } x \in [0, b] \\ -C, & \text{se } x \in [-b, 0] \end{cases},$$



con una evidente discontinuità finita in  $x = 0$ . Pertanto l'unica soluzione costante in  $[-b, b]$  è:

$$u_I(x) = C - \{0\}, \quad x \in [-b, b],$$

che è manifestamente pari. Ma  $u_I(x)$  è la restrizione dell'unica autofunzione<sup>1</sup>  $u(x)$  all'intervallo  $[0, b]$ . Quest'ultima deve avere parità definita, per cui sarà a sua volta funzione pari.

Nella regione II

$$u_{II}''(x) + \frac{2mV_0}{\hbar^2} u_{II}(x) = 0 \quad (85)$$

Poniamo

$$k = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}},$$

per cui

$$u_{II}''(x) + k^2 u_{II}(x) = 0, \quad (86)$$

il cui integrale generale:

$$u_{II}(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad \forall A, B \in \mathbb{R} - \{0\} \quad (87)$$

Riguardo alla condizione di raccordo tra II e III possiamo imporre solo la continuità della funzione e non della derivata, a causa del comportamento patologico del potenziale in  $x = a$  (cioè  $V(a) \rightarrow +\infty$ ). Ciò può essere visto anche analiticamente:

$$\begin{cases} u_{II}(a) = 0 \\ u'_{II}(a) = 0 \end{cases} \quad (88)$$

Dalla (87)

$$\begin{cases} A \sin ka + B \cos ka = 0 \\ A \cos ka - B \sin ka = 0 \end{cases}, \quad (89)$$

che è un sistema lineare omogeneo nelle incognite  $A, B$ . Siccome  $u_{II}(x)$  non può essere identicamente nulla, necessariamente siamo interessati alle soluzioni non banali di (89). Dall'algebra lineare sappiamo che ciò si verifica se e solo se è nullo il determinante dei coefficienti che in questo caso è

$$\begin{vmatrix} \sin ka & \cos ka \\ \cos ka & -\sin ka \end{vmatrix} = -1,$$

per cui ammette la sola soluzione banale  $A = B = 0$ . Dobbiamo allora imporre la sola continuità di  $u(x)$ :

$$u_{II}(a) = 0 \iff A \sin ka + B \cos ka = 0$$

D'altra parte vediamo "a occhio" che

$$u_{II}(x) = A \sin [k(a-x)], \quad (90)$$

per cui

$$u(x) = \begin{cases} C, & \text{se } x \in [0, b] \\ A \sin [k(a-x)], & \text{se } x \in [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in [a, +\infty) \end{cases},$$

con derivata:

$$u'(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \in [0, b] \\ -kA \cos [k(a-x)], & \text{se } x \in [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in [a, +\infty) \end{cases}$$

<sup>1</sup>Ricordiamo che in una dimensione  $\sigma_d(\hat{H})$  non è degenere.

Come anticipato  $u'(x)$  ha una discontinuità in  $x = a$ :

$$\lim_{x \rightarrow a^-} u'(x) = -kA \neq 0, \quad \lim_{x \rightarrow a^+} u'(x) = 0$$

Sia data una particella sottoposta al potenziale

$$V(x) = \begin{cases} V_0 > 0, & \text{se } x \leq 0 \\ 0, & \text{se } x \in [0, a] \\ +\infty, & \text{se } x \geq a \end{cases}, \quad (91)$$

graficato in fig. 8. Trovare i valori di  $V_0$  e di  $a$  per cui l'hamiltoniano è privo di spettro discreto.

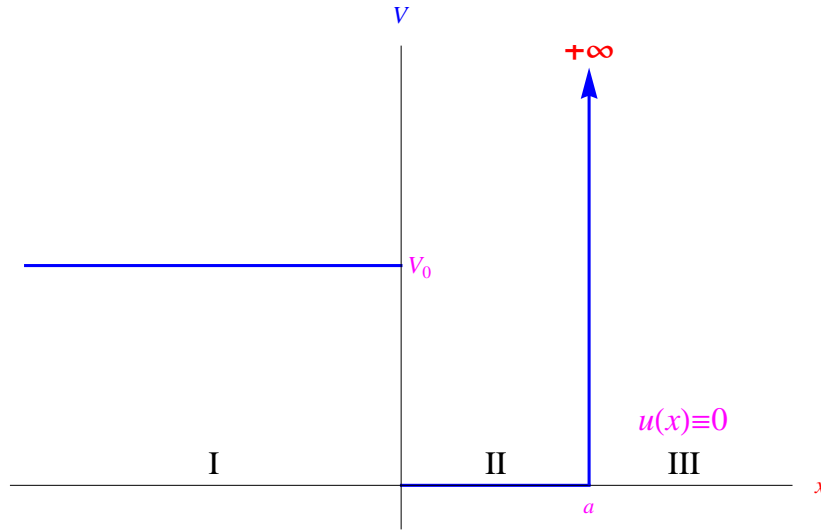


Figura 8: Andamento del potenziale (91).

### Soluzione

Discutiamo innanzitutto l'esistenza degli stati legati. Deve essere

$$\sigma_d(H) \subset (\min V(x), V_{\infty 1}),$$

dove

$$V_{\infty 1} = \min \left\{ \lim_{x \rightarrow +\infty} V(x), \lim_{x \rightarrow -\infty} V(x) \right\} = V_0,$$

mentre  $\min V(x) = 0$ . Quindi gli autovalori discreti sono tali che  $0 < E < V_0$ . Dividiamo l'asse  $x$  nelle regioni:

$$I = (-\infty, 0), \quad II = [0, a), \quad III = (a, +\infty)$$

Nella III è ovviamente  $u(x) \equiv 0$ . L'equazione di Schrödinger nella I è:

$$u_I'' + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) u_I = 0 \quad (92)$$

Nella regione II:

$$u_{II}'' + \frac{2m}{\hbar^2} E u_{II} = 0 \quad (93)$$

Nella III non c'è bisogno di impostare l'equazione, giacché conosciamo la soluzione. Le soluzioni vanno raccordate:

$$\begin{cases} u_I(0) = u_{II}(0) \\ u_I'(0) = u_{II}'(0) \end{cases}, \quad u_{II}(a) = 0 \quad (94)$$

Integriamo la (92), che può essere scritta come

$$u_I'' - \frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E) u_I = 0, \quad (95)$$

giacché stiamo considerando  $E < V_0$ . Poniamo

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - E)}, \quad (96)$$

per cui l'integrale generale è una combinazione lineare di esponenziali reali:

$$u_I(x) = Ae^{kx} + Be^{-kx} \quad (97)$$

Tuttavia tale soluzione deve verificare la condizione al contorno:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} u_I(x) = 0,$$

che implica  $B = 0$ . Quindi

$$u_I(x) = Ae^{kx} \quad (98)$$

Per l'integrazione della (93) poniamo

$$K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}, \quad (99)$$

cosicché

$$u_{II} + K^2 u_{II} = 0,$$

il cui integrale generale è

$$u_{II}(x) = C \sin Kx + D \cos Kx \quad (100)$$

Le derivate delle soluzioni trovate sono:

$$u_I'(x) = kAe^{kx}, \quad u_{II}'(x) = CK \cos Kx - DK \sin Kx$$

Applichiamo le (94), ottenendo

$$\begin{cases} A = D \\ kA = KC \end{cases} \quad (101)$$

Deve poi essere

$$\begin{aligned} u_{II}(a) = 0 &\iff C \sin(Ka) + D \cos(Ka) = 0 \\ &\iff D = -C \tan(Ka) \end{aligned} \quad (102)$$

Tenendo conto della prima delle (101):

$$A = -C \tan(Ka) \implies C = -A \cot(Ka) \quad (103)$$

Tenendo conto della seconda delle (101):

$$kA = -KA \cot(Ka),$$

da cui

$$\cot(Ka) = -\frac{k}{K} \quad (104)$$

Ed è proprio questa l'equazione che definisce implicitamente gli autovalori discreti. Sostituendo le (96)-(99) nell'equazione precedente, otteniamo:

$$\cot\left(\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} a\right) = -\sqrt{\frac{V_0 - E}{E}},$$

che è un'equazione trascendente in  $E$ , e non può essere risolta analiticamente. Per risolverla graficamente, poniamo dapprima

$$\frac{2m}{\hbar^2} = 1,$$

dopodiché eseguiamo il cambio di variabile  $x = \sqrt{E}$

$$\cot(ax) = -\sqrt{\frac{V_0 - x^2}{x}}, \quad 0 < x < \sqrt{V_0} \quad (105)$$

Poniamo

$$f(x) = \cot(ax), \quad g(x) = -\sqrt{\frac{V_0 - x^2}{x}} \quad (106)$$

In fig. 9 riportiamo i grafici di  $f$  e  $g$  per  $a = 2$ ,  $V_0 = 10$  (unità adimensionali). Le ascisse  $x_1, x_2$  dei punti di intersezione definiscono gli autovalori dell'energia:  $E_1 = x_1^2$ ,  $E_2 = x_2^2$ . Per la funzione  $g(x)$  vediamo che

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} g(x) = -\infty, \quad g(\sqrt{V_0}) = 0$$

Dalla stessa figura vediamo che se lo zero di  $g(x)$  è minore del primo zero di  $f(x)$ , le curve non si intersecano per cui non ci sono stati legati. Deve essere

$$\sqrt{V_0} < \frac{\pi}{2a} \iff V_0 a^2 < \frac{\pi^2}{4},$$

che è la condizione chiesta dal problema, come confermato dal grafico di fig. 10.

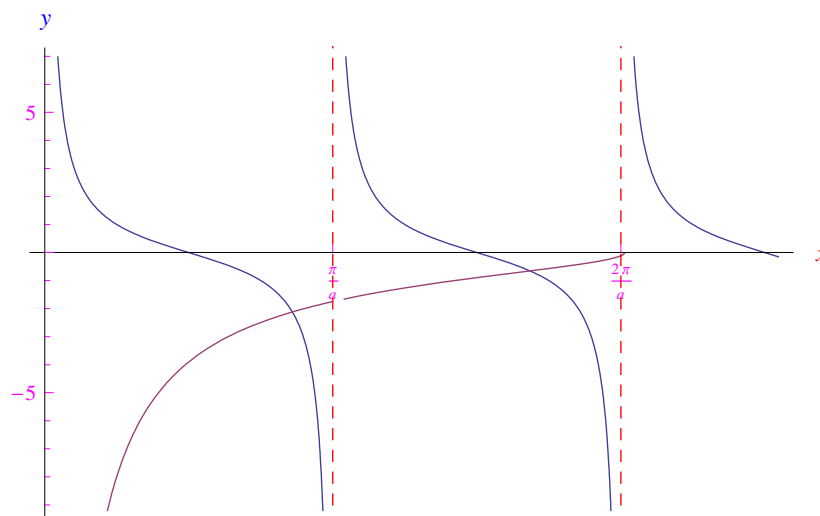


Figura 9: Grafico delle funzioni (106) per  $a = 2$ ,  $V_0 = 10$ .

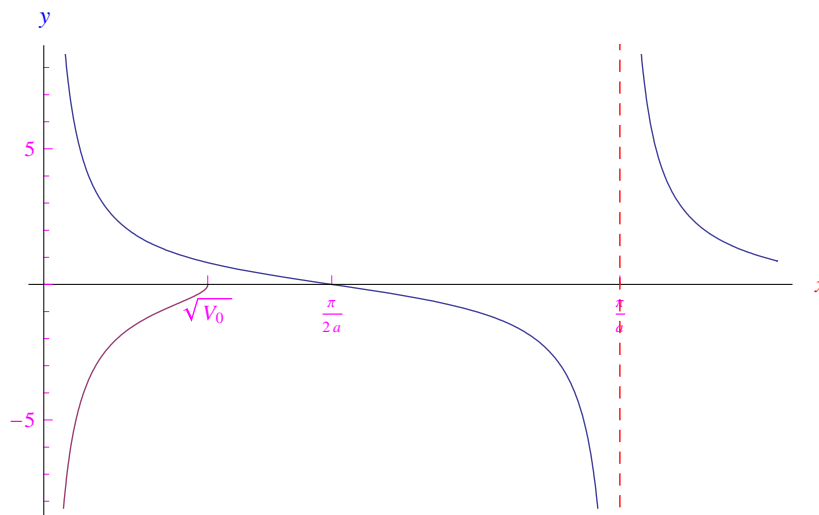


Figura 10: Se  $\sqrt{V_0} < \frac{\pi}{2a}$  non ci sono intersezioni.

## A Calcolo di integrali gaussiani

Calcoliamo

$$I_n(a) = \int_{-\infty}^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx, \quad (a > 0, n \in \mathbb{N}), \quad (107)$$

partendo dal noto risultato

$$I_0(1) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \sqrt{\pi}$$

Segue immediatamente (da un banale cambio di variabile)

$$I_0(a) = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (108)$$

Per  $n \geq 1$  poniamo

$$f_n(x) = x^n e^{-ax^2} \quad (109)$$

Tale funzione ha la stessa parità di  $n$  (il grafico è in fig. 11):

$$f_n(-x) = (-1)^n f_n(x)$$

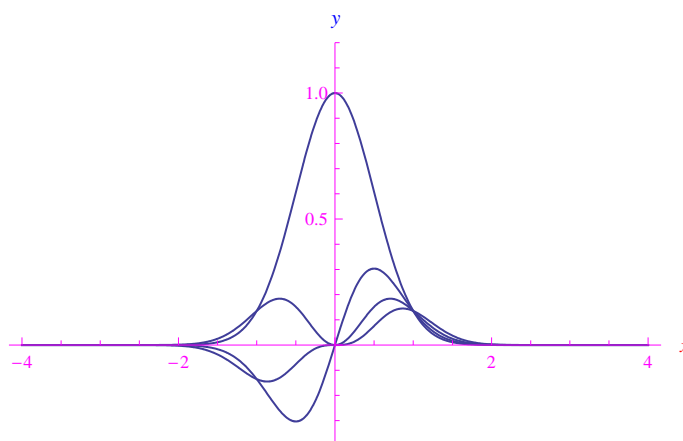


Figura 11: Grafico delle funzioni  $f_n(x) = x^n e^{-2x^2}$  per  $n = 0, 1, 2, 3$ .

Ciò suggerisce di procedere per decomposizione:

$$I_n(a) = \underbrace{\int_{-\infty}^0 x^n e^{-ax^2} dx}_{I_1} + \underbrace{\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax^2} dx}_{I_2} \quad (110)$$

Nel primo integrale eseguiamo il cambio di variabile  $\xi = -x$ , per cui  $dx = -d\xi$  e gli estremi di integrazione mutano come

$$-\infty < x = -\xi < +\infty \implies +\infty > \xi > -\infty$$

Quindi

$$I_1 = -(-1)^n \int_{+\infty}^0 f_n(\xi) d\xi = (-1)^n \int_0^{+\infty} f_n(\xi) d\xi$$

Siccome  $\xi$  è una variabile muta, posso chiamarla come voglio:

$$I_1 = (-1)^n \int_0^{+\infty} f_n(x) dx = (-1)^n I_2$$

Ne consegue

$$I_n(a) = [(-1)^n + 1] \int_0^{+\infty} f_n(\xi) d\xi = \begin{cases} 2 \int_0^{+\infty} f_n(\xi) d\xi, & \text{se } n \text{ è pari} \\ 0, & \text{altrimenti} \end{cases} \quad (111)$$

Vediamo quanto valgono quelli non nulli. A tale scopo deriviamo rispetto alla variabile  $a$ , primo e secondo membro della prima delle (111):

$$\frac{dI_n(a)}{da} = 2 \int_0^{+\infty} x^n \frac{\partial}{\partial a} (e^{-ax^2}) dx = -2 \int_0^{+\infty} x^{n+2} e^{-ax^2} dx$$

ottenendo la formula di ricorrenza:

$$I_{n+2}(a) = -\frac{dI_n(a)}{da}, \quad (112)$$

rammentando che  $n$  è pari. Sappiamo già che

$$I_0(a) = \sqrt{\frac{\pi}{a}},$$

per cui

$$I_2(a) = -\frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a}} = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}}$$

Per  $n = 2$

$$I_4(x) = -\frac{dI_2(a)}{da} = -\frac{1}{2} \frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} = \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}}$$

Per  $n = 4$

$$I_6(x) = -\frac{dI_4(a)}{da} = -\frac{3}{2} \frac{d}{da} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}} = \frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a^7}}$$

e così via. Riassumendo

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx &= \sqrt{\frac{\pi}{a}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-ax^2} dx &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a^3}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x^4 e^{-ax^2} dx &= \frac{3}{4} \sqrt{\frac{\pi}{a^5}} \\ \int_{-\infty}^{+\infty} x^6 e^{-ax^2} dx &= \frac{15}{8} \sqrt{\frac{\pi}{a^7}} \\ &\dots \end{aligned} \quad (113)$$

\*\*\*

Mostriamo ora che

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2x^2+bx} dx = \frac{\sqrt{\pi}}{a} e^{\frac{b^2}{4a^2}} \quad (114)$$

Scriviamo

$$\begin{aligned} -a^2x^2 + bx &= -a^2(x + C_1)^2 + C_2 \\ \Leftrightarrow -a^2x^2 + bx &= -a^2x^2 - 2a^2C_1x - a^2C_1^2 + C_2 \end{aligned}$$

da cui

$$\begin{aligned} \begin{cases} -2a^2C_1^2 = b \\ -a^2C_1^2 + C_2 = 0 \end{cases} &\Leftrightarrow C_1 = -\frac{b}{2a^2}, \quad C_2 = \frac{b^2}{4a^2} \\ &\Rightarrow -a^2x^2 + bx = -a^2\left(x - \frac{b}{2a^2}\right)^2 + \frac{b^2}{4a^2} \end{aligned}$$

Ne segue

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2x^2+bx} dx = e^{\frac{b^2}{4a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2\left(x - \frac{b}{2a^2}\right)^2} dx$$

Per quanto visto nel numero precedente

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2\left(x - \frac{b}{2a^2}\right)^2} dx \underset{\xi=x-\frac{b}{2a^2}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-a^2\xi^2} d\xi = \frac{\sqrt{\pi}}{a}$$

onde la (114).