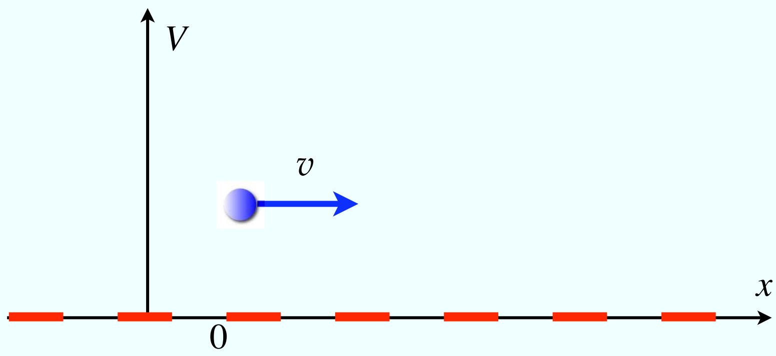
Stati di diffusione

(particella libera)

Particella libera: caso classico

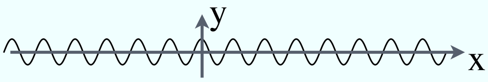
$V(x) = 0$



Classicamente:
particella libera, dotata di momento p qualunque (può avere qualunque velocità, che si mantiene costante) e posizione $x(t)$, con energia totale pari all'energia cinetica $E = p^2/2m$.
L'energia può assumere qualunque valore $E \geq 0$
(maggiore o *uguale*; se $E = 0$ la particella è *in quiete*).

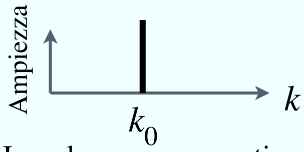
Richiami.

onda di de Broglie, $p=\hbar k$



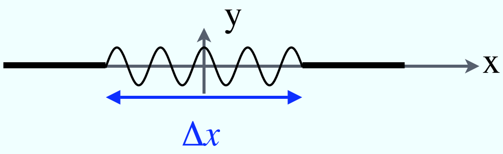
Posizione completamente delocalizzata.

Onda armonica (a $t=0$). Infinitamente estesa.
Lunghezza d'onda λ_0. Numero d'onda $k_0=2\pi/\lambda_0$



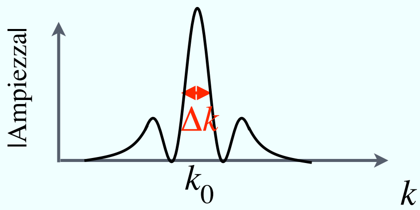
Impulso monocromatico

pacchetto d'onda



Onda localizzata

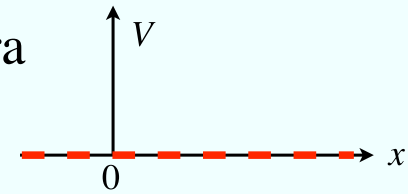
Tratto di onda armonica di lunghezza Δx.
Lunghezza d'onda λ_0. Numero d'onda $k_0 = 2\pi / \lambda_0$



distribuzione di numeri d'onda con larghezza Δk.

Particella libera

$V(x) = 0$



Quantisticamente: ragioniamo sulla fdo.

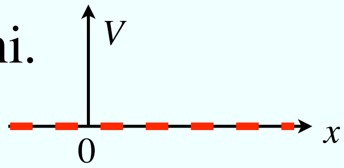
1- Cerchiamo gli stati stazionari, quindi:
2- soluzioni separabili, infine
3- la ψ generica (combinazione di stati stazionari).

Non vi sono, in questo caso, condizioni al contorno da imporre.
L'equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo è

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

(dopo aver trovato le autofunzioni dell'energia, le moltiplicheremo per l'esponenziale exp($-iEt/\hbar$) per avere l'evoluzione temporale)

Spettro energetico e autofunzioni.



$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Rightarrow \quad \boxed{\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi \qquad \text{con} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Soluzioni matematicamente analoghe all'oscillatore armonico classico, o alla buca infinita

Non ci sono condizioni al contorno che limitino i valori dell'energia.

Ogni valore E>0 è accettabile: ***spettro continuo***.

$$\boxed{E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}}$$

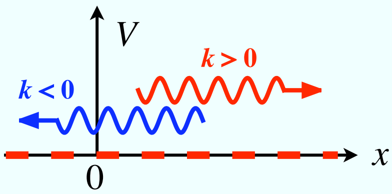
Autostati dell'energia: http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/ Sez. 2.1

(Sez. 2.2 nella versione CD)

Conviene (vedi oltre) scrivere la soluzione come:

$$\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$$

Dipendenza dal tempo



Richiamo:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)f(t) = \psi(x)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}E}{\hbar}t}$$

in questo caso: $\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ e: $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \Leftrightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

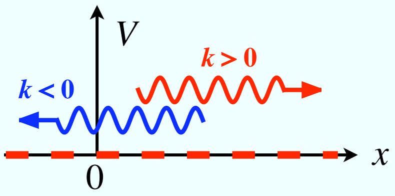
allora: $$\Psi(x,t) = \left(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{E}{\hbar}t} = \left(A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\hbar k^2}{2m}t}$$

$$= \underbrace{A\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\left(x-\frac{\hbar k}{2m}t\right)}}_{\text{progressiva, } x-vt} + \underbrace{B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\left(x+\frac{\hbar k}{2m}t\right)}}_{\text{regressiva, } x+vt}$$

permettendo a k di assumere valori positivi e negativi, con il conseguente significato sulle onde viaggianti (figura), la soluzione generale è:

$$\boxed{\Psi_k(x,t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kx-\frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \qquad \text{con:} \quad k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Normalizzazione



$$\Psi_k(x,t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \quad \text{con: } k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

$\boxed{\text{Queste funzioni non sono normalizzabili!}}$ $$\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi_k^*(x,t)\Psi_k(x,t)dx = \int_{-\infty}^{+\infty}|A|^2dx \to \infty$$

Ne consegue che uno stato di particella libera *non può esistere*:
non esiste in natura un oggetto come "la particella libera con energia definita"!

Per costruire uno stato fisico (che *non* sarà un autostato dell'energia) è necessario sommare (infinite) Ψ_k, pesandole con coefficienti opportuni.

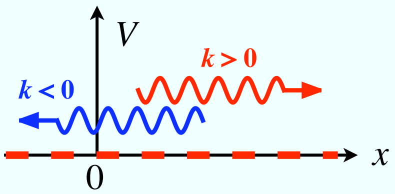
k ha spettro continuo: la somma diviene un integrale. $$\sum_{k=1}^{\infty} c_k\Psi_k \to \int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(k)\Psi_k dk$$

E quindi il generico stato fisico avrà fdo:

$$\Psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(k)\Psi_k(x,t)dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}dk$$

$\boxed{\text{Pacchetto d'onde.}}$

Pacchetto d'onde



$$\Psi_k(x,t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)} \quad \text{con: } k = \pm\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Uno stato fisico è dato da una combinazione lineare di Ψ_k.
Questa combinazione *è normalizzabile*, e rappresenta un *pacchetto d'onde*.

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

Notare che, come nei problemi a spettro discreto, basta trovare la fdo al tempo $t = 0$,

$$\Psi(x,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Phi(k)\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}dk$$

e "appendere" agli infiniti termini dentro la combinazione lineare la dipendenza dal tempo.

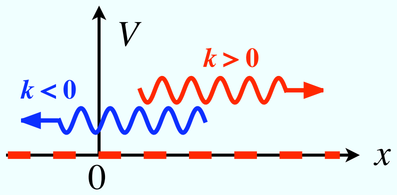
La teoria delle trasformate di Fourier ci dice poi (teorema di Plancherel)

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\Psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}dx$$

1.2, 1.3

Proprietà del pacchetto d'onde.

Velocità



$$\Psi_k(x,t) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kx - \frac{\hbar k^2}{2m}t\right)}$$

con: $k = \pm\dfrac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

velocità classica: $E = \dfrac{1}{2}mv_{classica}^2 \Rightarrow v_{classica} = \sqrt{\dfrac{2E}{m}}$

velocità "quantistica": $v = \dfrac{\hbar k}{2m} = \sqrt{\dfrac{E}{2m}}$?

La discrepanza ha origine nella natura di pacchetto d'onde.
In altre parole, $v = \omega/k$ è la *velocità di fase*.
Invece, la *velocità di gruppo* è:

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d}{dk}\frac{\hbar k^2}{2m} = \frac{\hbar k}{m} = v_{classica}$$

Velocità di fase e gruppo per un pacchetto d'onda

$v = \omega/k = \hbar k/2m$ è la *velocità di fase*.

La *velocità di gruppo* è: $v_g = \dfrac{d\omega}{dk} = \dfrac{d}{dk}\dfrac{\hbar k^2}{2m} = \dfrac{\hbar k}{m} = v_{classica}$

http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/

Sez. 1.3-1.4 (Sez. 1.2-1.3 nella versione CD)

Visualizzare Re Ψ per visualizzare la velocità di fase e di gruppo

Evoluzione di un pacchetto gaussiano "fermo"

Determiniamo l'evoluzione temporale di una "particella" localizzata al tempo $t = 0$ in $x = 0$, in assenza di potenziale (particella "libera").

Particella "stazionaria", $\boxed{k = 0}$

Come forma d'onda iniziale, scegliamo la gaussiana (è risolubile analiticamente):

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-ax^2} \cancel{\mathrm{e}^{ikx}}$$

I coefficienti $\Phi(k)$ sono dati da:

$$\Phi(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi(x,0)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} dx = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-ax^2 - ikx} dx$$

Il risultato finale (tavole di integrali):

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1 + 2\mathrm{i}\hbar at/m}} \mathrm{e}^{-\frac{ax^2}{1+2\mathrm{i}\hbar at/m}}$$

Evoluzione di un pacchetto gaussiano "fermo" (2)

Forma d'onda iniziale: $\Psi(x,0) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-ax^2}$

Evoluzione temporale: $\Psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1+2i\hbar at/m}} \mathrm{e}^{-\frac{ax^2}{1+2i\hbar at/m}}$

Densità di probabilità:

$$\Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{1+(2\hbar at/m)^2}} \mathrm{e}^{-\frac{2ax^2}{1+(2\hbar at/m)^2}}$$

Al trascorrere del tempo il pacchetto:
- diminuisce il suo valor massimo
- si allarga

Evoluzione di un pacchetto gaussiano "fermo" (3)

Forma d'onda iniziale:

$$\Psi(x,0) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \mathrm{e}^{-ax^2}$$

Evoluzione temporale:

$$\Psi(x,t) = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{1+2i\hbar at/m}} \mathrm{e}^{-\frac{ax^2}{1+2i\hbar at/m}}$$

Densità di probabilità:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \left(\frac{2a}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{\sqrt{1+(2\hbar at/m)^2}} \mathrm{e}^{-\frac{2ax^2}{1+(2\hbar at/m)^2}} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma(t)} \mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2\sigma^2(t)}}$$

Avendo definito: $2\sigma^2(t) = \frac{1+(2\hbar at/m)^2}{2a}$

Richiamo:
distribuzione gaussiana

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x} \mathrm{e}^{-\frac{(x-\langle x\rangle)^2}{2\sigma_x^2}}$$

Al trascorrere del tempo il pacchetto:
- **diminuisce il suo valor massimo**
- **si allarga**

Richiamo: pacchetto d'onda gaussiano (cenni)

Un pacchetto gaussiano in moto ha $k \neq 0$
[in generale, ha una distribuzione di k data dalle $a(k)$]

$$\Psi(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{i(kx-\omega t)} dk \quad \text{con} \quad a(k) = \frac{A}{\sqrt{2\pi}\sigma_k} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}}$$

σ_k dà una misura dell'allargamento del pacchetto nello spazio k.

A $t = 0$, si dimostra che $\quad \Psi(x,0) = \psi(x) = Ae^{-\frac{x^2}{2\sigma_x^2}} e^{ik_0 x}$

con $\quad \sigma_x \sigma_k = 1$

A $t \neq 0$, si dimostra che il pacchetto si allarga nel tempo.

Una discussione si trova su: http://musr.physics.ubc.ca/~jess/p200/gwp/gwp.html

Moto di un pacchetto d'onda (distribuzione di *k*)

http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/

su una retta a $V = 0$ ("particella libera")

propagazione di un pacchetto gaussiano: Sez. 1.3
di un pacchetto non minimale: Sez. 1.4

in una scatola bidimensionale

propagazione di un pacchetto gaussiano: Sez. 4.5
(notare l'allargamento nel tempo - reso lento nella simulazione)
di un pacchetto non minimale: Sez. 4.4