

ALMA MATER STUDIORUM · UNIVERSITÀ DI BOLOGNA

---

Scuola di Scienze  
Corso di Laurea Magistrale in Fisica

ALCUNI ASPETTI DELLA  
QUANTIZZAZIONE DELL'OSCILLATORE  
ARMONICO

Relatore:

Dott. ALEXANDRE  
KAMENCHTCHIK

Presentata da:

FEDERICO BALESTRI

Sessione I

Anno Accademico 2012/2013



---

## Abstract

---

Scopo principale della tesi è quello di presentare alcuni aspetti quantistici di un sistema fisico intermedio fra la buca infinita di potenziale e l'oscillatore armonico: una buca di potenziale con le pareti elastiche.

Per questo tipo di potenziale si determinano le autofunzioni dell'energia attraverso l'utilizzo di equazioni differenziali di Kummer, Whittaker o Weber. Si determina inoltre lo spettro energetico di tale sistema sotto forma di un'equazione trascendente, e ne si analizza il comportamento sotto determinati limiti, dapprima in approssimazione zero e successivamente in prima approssimazione.

Segue una breve trattazione sul propagatore quantistico e sulla sua forma in approssimazione semiclassica fornita dalla formula di Pauli - van Vleck - Morette, completa di alcuni esempi di calcolo esplicito relativo a semplici potenziali che presentano analogie con il potenziale in oggetto, e di confronti fra le forme esatte di tali propagatori e le loro approssimazioni semiclassiche.

È calcolato infine anche il propagatore quantistico per la buca di potenziale con pareti elastiche, nella sua forma semiclassica.



<b>1</b>	<b>Autofunzioni energetiche della buca di potenziale a pareti elastiche</b>	<b>5</b>
<b>2</b>	<b>Spettro energetico della buca di potenziale a pareti elastiche</b>	<b>13</b>
2.1	Analogia con buca di potenziale . . . . .	13
2.2	Equazione trascendente dello spettro energetico . . . . .	17
2.3	Limiti notevoli . . . . .	18
2.3.1	Limite $a \rightarrow 0$ . . . . .	18
2.3.2	Limite $\omega \rightarrow \infty$ . . . . .	19
2.3.3	Limite $k \rightarrow \infty$ . . . . .	20
2.4	Comportamenti all'ordine più basso diverso da zero . . . . .	23
2.4.1	Analisi potenziale quasi-armonico: $a \ll 1$ . . . . .	23
2.4.2	Analisi del potenziale con pareti quasi assolutamente rigide: $\omega \gg 1$	25
<b>3</b>	<b>Miscellanea di propagatori</b>	<b>27</b>
3.1	Propagatore gradino infinito di potenziale . . . . .	28
3.2	Propagatore buca infinita di potenziale . . . . .	31
3.2.1	Forma "esatta" del propagatore . . . . .	32
3.2.2	Forma "semiclassica" del propagatore . . . . .	34
3.3	Parete elastica . . . . .	39
3.3.1	Forma "semiclassica" del propagatore . . . . .	46
3.4	Mezzo oscillatore armonico . . . . .	49
3.4.1	Forma "esatta" del propagatore . . . . .	50
3.4.2	Forma "semiclassica" del propagatore . . . . .	52
3.5	Gradino finito di potenziale . . . . .	56
3.5.1	Forma "esatta" del propagatore . . . . .	63

3.5.2	Forma “semiclassica” del propagatore . . . . .	65
3.5.3	Grafici dei propagatori ottenuti . . . . .	66
<b>4</b>	<b>Propagatore della buca di potenziale a pareti elastiche</b>	<b>73</b>
4.1	Propagatore in approssimazione semiclassica . . . . .	74
<b>A</b>	<b>Funzioni speciali</b>	<b>81</b>
A.1	Funzione ipergeometrica confluyente ${}_1F_1$ . . . . .	81
A.2	Funzione $\theta_3(z, \tau)$ di Jacobi . . . . .	82
A.3	Equazione differenziale e funzioni di Whittaker . . . . .	83
A.3.1	Equivalenza equazioni differenziali di Kummer e Whittaker . . . . .	83
A.3.2	Proprietà delle funzioni di Whittaker . . . . .	84
A.4	Funzione parabolica del cilindro $D_p(z)$ . . . . .	85
<b>B</b>	<b>Calcolo naïve di alcuni integrali trigonometrici divergenti</b>	<b>87</b>
B.1	Integrale $\int_0^\infty dx \sin(kx) \sin(k'x)$ . . . . .	87
B.1.1	Variante dell’integrale . . . . .	89
B.2	Integrale $\int_0^\infty dx \cos(kx) \cos(k'x)$ . . . . .	90
B.3	Integrale $\int_0^\infty dx \sin(kx) \cos(k'x)$ . . . . .	91
B.3.1	Metodo di regolarizzazione 1 . . . . .	91
B.3.2	Metodo di regolarizzazione 2 . . . . .	92
<b>C</b>	<b>Particella libera</b>	<b>95</b>
C.1	Azione particella libera . . . . .	95
C.2	Propagatore particella libera . . . . .	96
<b>D</b>	<b>Oscillatore armonico</b>	<b>97</b>
D.1	Azione classica oscillatore armonico . . . . .	97
D.1.1	Il contributo all’azione classica di un “rimbalzo elastico” su un potenziale armonico è nullo . . . . .	97
D.2	Aspetti quantistici dell’oscillatore armonico . . . . .	98
D.2.1	Propagatore dell’oscillatore armonico . . . . .	99

---

## Introduzione

---

La meccanica quantistica è una teoria fisica che, pur essendo stata sviluppata da oltre ottant'anni, continua ad attrarre un numero considerevole di pubblicazioni sulle riviste scientifiche [22] [9] e ad essere oggetto di interesse attivo dei fisici. Uno dei motivi principali di interesse per la meccanica quantistica è la considerevole quantità di fenomeni osservabili che trovano spiegazione teorica in questo ambito. Tuttavia questo immutato interesse trova giustificazione anche nel fatto che la meccanica quantistica sia alla base di generalizzazioni proficue e intriganti, sebbene diversamente supportate da prove empiriche, come per esempio la teoria quantistica dei campi [37], la generalizzazioni supersimmetriche [10] [12] [13], la teoria delle stringhe o la gravità quantistica a loop; un ulteriore elemento di interesse risiede nel fatto che i problemi risolvibili esattamente in meccanica quantistica siano un numero in effetti esiguo.

Pressoché tutti i testi di introduzione alla meccanica quantistica [25], [8], [16], [34] descrivono in particolare due problemi appartenenti alla ridotta classe dei quesiti risolvibili in maniera analitica: la buca infinita di potenziale e l'oscillatore armonico. La prima viene generalmente trattata direttamente partendo dalle autofunzioni e giungendo allo spettro energetico discreto, mentre il secondo viene quasi sempre trattato attraverso il formalismo della fattorizzazione, che tra l'altro si presta molto bene a proficue generalizzazioni [21] [26], per giungere in maniera abbastanza agevole allo spettro energetico equidistante.

Occorre tuttavia sottolineare come un'implementazione fisica della situazione ideale della buca infinita di potenziale non sia affatto agevole: non solo il concetto stesso di barriera infinita di potenziale appare una pura astrazione matematica, tanto più in una teoria quantistica che prevede tra l'altro l'effetto tunnel, ma persino la trattazione medesima del problema prevede qualche discrepanza formale teorica. Per esempio, infatti, l'operatore impulso nel caso della buca infinita di potenziale risulta non essere autoaggiunto, sebbene l'impulso appaia essere una quantità osservabile del sistema.

Per questi motivi può essere interessante analizzare dal punto di vista quantistico un problema fisico intermedio fra il sistema di un oscillatore armonico standard e il sistema della buca infinita di potenziale, che non presenti però le singolarità e le problematiche proprie della buca infinita di potenziale e che tenda ad essa sotto determinate condizioni. Un possibile sistema fisico con queste proprietà è quello che sarà preso in analisi nel corso di questa tesi: un potenziale con due pareti assolutamente elastiche, separate da una regione spaziale a potenziale nullo. La forma esplicita di tale potenziale è

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}k(x+a)^2 & \text{se } x < -a \\ 0 & \text{se } -a \leq x < a \\ \frac{1}{2}k(x-a)^2 & \text{se } x \geq a \end{cases}$$

e una sua rappresentazione grafica è fornita in figura 1.1. Il sistema fisico descritto dal potenziale  $V(x)$ , che denominiamo buca di potenziale a pareti elastiche, tende ovviamente al sistema descritto dalla buca di potenziale infinita standard nel limite  $k \rightarrow \infty$ .

Pur essendo il sistema della buca di potenziale a pareti elastiche poco più che elementare e generato direttamente a partire da un potenziale armonico standard, non se ne sono trovate trattazioni in letteratura. Questo fatto, unitamente all'interesse che può avere la buca di potenziale a pareti elastiche nel suo limite  $k \rightarrow \infty$  come trattazione più rigorosa della buca infinita di potenziale, ha portato alla trattazione quantistica del potenziale  $V(x)$  e alla stesura della presente tesi.

Gli aspetti quantistici della buca di potenziale a pareti elastiche presi in considerazione sono stati: l'autofunzione energetica estesa a tutto l'asse reale, lo spettro energetico che risulterà essere discreto ma non equidistante, e il propagatore quantistico, oggetto di interesse anche per eventuali generalizzazioni in teoria dei campi. Malauguratamente però, il propagatore della buca di potenziale a pareti elastiche non risulta essere computabile direttamente per via della complessità dell'autofunzione energetica normalizzata e dell'integrale energetico coinvolto, per cui si è calcolato il propagatore quantistico nella sua forma approssimata semiclassica, facendo uso della formula di Pauli - van Vleck - Morette. [31] [36], [27]

Nel primo capitolo esponiamo il calcolo delle autofunzioni energetiche relative al potenziale della buca a pareti elastiche nonché della loro normalizzazione, facendo uso delle equazioni differenziali di Kummer, di Whittaker e di Weber.

Il secondo capitolo è dedicato allo studio dello spettro energetico della buca di potenziale a pareti elastiche; al suo interno si trova l'equazione trascendente che determina tale spettro e lo studio del comportamento dello spettro stesso in corrispondenza di alcuni limiti interessanti, all'ordine zero e al prim'ordine di approssimazione.

Il terzo capitolo, dopo aver presentato brevemente i concetti di propagatore quantistico e di approssimazione semiclassica *à la* Pauli - van Vleck - Morette, presenta il calcolo di entrambe le forme, esatta e "semiclassica", dei propagatori di alcuni sistemi fisici relativi a potenziali di interesse, al fine di introdurre al meglio il calcolo semiclassico del propa-

---

gatore della buca di potenziale a pareti elastiche nel capitolo successivo. Sottolineiamo il fatto che in questo capitolo è presente una duplice derivazione coincidente, in forma esatta e in approssimazione semiclassica, del propagatore della buca infinita di potenziale, espresso sotto forma di funzione theta di Jacobi del terzo tipo.

Il quarto capitolo tratta il propagatore della buca di potenziale a pareti elastiche, definendo prima l'impossibilità della computazione diretta e svolgendo in seguito il calcolo in forma approssimata *à la* Pauli - van Vleck - Morette, alla luce anche di alcune osservazioni chiarificate nel precedente capitolo.

Inoltre sono presenti alcune appendici con lo scopo di rendere la lettura il più agevole possibile e i ragionamenti seguiti quanto più possibile giustificati: l'appendice A definisce le funzioni speciali utilizzate e ne presenta le proprietà principali, l'appendice B presenta il calcolo di alcuni integrali utilizzati nel corso della tesi, l'appendice C tratta la quantizzazione della particella libera, punto di partenza di molti ragionamenti esposti, l'appendice D tratta alcuni aspetti salienti della quantizzazione dell'oscillatore armonico. Seguono infine alcune conclusioni.



---

## Autofunzioni energetiche della buca di potenziale a pareti elastiche

---

Si prende in analisi il seguente potenziale  $V(x)$  che descrive una buca di potenziale a pareti elastiche, caso intermedio fra l'oscillatore armonico e la buca infinita di potenziale:

$$V(x) = \theta(-x - a) \frac{k(x + a)^2}{2} + \theta(x - a) \frac{k(x - a)^2}{2} \quad (1.1)$$

laddove  $\theta(x)$  è la funzione theta di Heaviside definita come

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{se } x \geq 0 \\ 0 & \text{se } x < 0 \end{cases} \quad (1.2)$$

La figura 1.1 mostra una rappresentazione del potenziale  $V(x)$  in oggetto.

L'hamiltoniana indipendente dal tempo relativa al potenziale (1.1) è

$$H(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \theta(-x - a) \frac{k(x + a)^2}{2} + \theta(x - a) \frac{k(x - a)^2}{2} \quad (1.3)$$

Introducendo la costante  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$  e suddividendo l'asse reale in tre regioni ①, ② e ③, definite rispettivamente dalle condizioni  $x < -a$ ,  $-a < x < a$  e  $x > a$ , otteniamo le seguenti equazioni di Schrödinger indipendente dal tempo:

$$\textcircled{1} : \quad \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} (x + a)^2 \right) \psi_E^{(1)}(x) = E\psi_E^{(1)}(x) \quad (1.4)$$

$$\textcircled{2} : \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E^{(2)}(x) = E\psi_E^{(2)}(x) \quad (1.5)$$

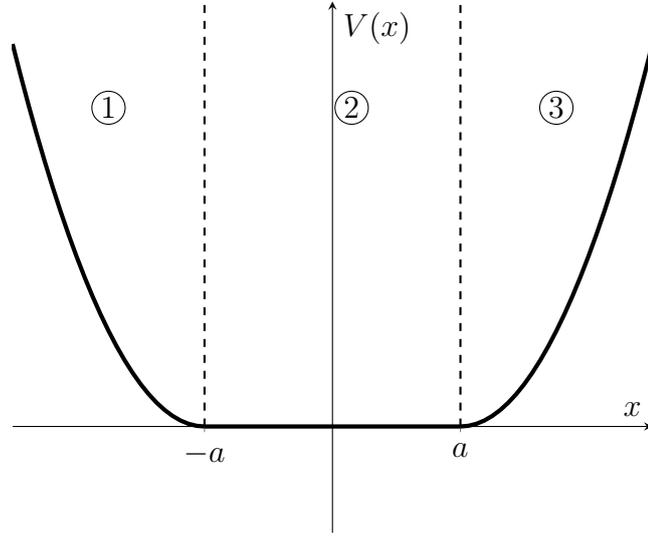


Figura 1.1: Il potenziale della buca di potenziale a pareti elastiche, definita dall'equazione (1.1).

$$\textcircled{3} : \quad \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2}(x-a)^2 \right) \psi_E^{(3)}(x) = E\psi_E^{(3)}(x) \quad (1.6)$$

L'equazione (1.5) è ben nota e la sua soluzione è esprimibile come: [16], [25], [34]

$$\textcircled{2} \quad \boxed{\psi_E^{(2)}(x) = d_1 \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) + d_2 \cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right)} \quad (1.7)$$

Più complessa risulta la trattazione delle equazioni (1.4) e (1.6), assolutamente analoghe fra loro a meno della sostituzione  $a \leftrightarrow -a$ . Studiamo quindi l'equazione (1.4), relativa ai valori negativi della  $x$  e alla regione denominata  $\textcircled{1}$ . Iniziamo la risoluzione dell'equazione (1.4) raccogliendo un fattore di tipo esponenziale:

$$\psi_E^{(1)}(x) = \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x+a)^2\right\} \tilde{\psi}_E^{(1)}(x) \quad (1.8)$$

Derivando due volte rispetto alla variabile  $x$  l'espressione (1.8) otteniamo:

$$\frac{d^2\psi_E^{(1)}(x)}{dx^2} = \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x+a)^2\right\} \left[ \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}(x+a)^2 - \frac{m\omega}{\hbar} - \frac{2m\omega}{\hbar}(x+a)\frac{d}{dx} + \frac{d^2}{dx^2} \right] \tilde{\psi}_E^{(1)}(x) \quad (1.9)$$

---

E sostituendo questo risultato nella (1.4) otteniamo un'altra forma dell'equazione differenziale per la regione ①:

$$\frac{d^2\tilde{\psi}_E^{(1)}(x)}{dx^2} - \frac{2m\omega}{\hbar}(x+a)\frac{d\tilde{\psi}_E^{(1)}(x)}{dx} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\tilde{\psi}_E^{(1)}(x) = 0 \quad (1.10)$$

Può essere utile alleggerire la notazione dell'equazione (1.10). Definiamo quindi le costanti ausiliarie  $\alpha = \frac{2m\omega}{\hbar}$  e  $\beta_E = \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\right)$ , indichiamo con ' la derivazione rispetto alla variabile  $x$ , poniamo  $w(x) = \tilde{\psi}_E^{(1)}(x)$  e riscriviamo quindi la (1.10) come:

$$w''(x) - \alpha(x+a)w'(x) + \beta_E w(x) = 0 \quad (1.11)$$

Traslando la coordinata spaziale, cioè ponendo  $y = x + a$ , otteniamo

$$w''(y) - \alpha y w'(y) + \beta_E w(y) = 0 \quad (1.12)$$

dove in questo caso ' simboleggia la derivazione rispetto a  $y$ .

Per risolvere l'equazione (1.12) è utile effettuare un riscaldamento della variabile:  $z = \sqrt{\frac{\alpha}{2}}y$ . In questo modo è possibile riscrivere l'equazione (1.12) come segue:

$$w''(z) - 2zw'(z) + \lambda w(z) = 0 \quad (1.13)$$

dove  $\lambda = \frac{2\beta_E}{\alpha}$  e ora per ' si intende la derivazione rispetto a  $z$ .

L'equazione (1.13) è riconducibile ad un'altra equazione differenziale nota in letteratura, attraverso il cambiamento di costanti  $\zeta = z^2$ . Utilizzando infatti le identità differenziali  $\frac{d}{dz} = 2\sqrt{\zeta}\frac{d}{d\zeta}$  e  $\frac{d^2}{dz^2} = 2\frac{d}{d\zeta} + 4\zeta\frac{d^2}{d\zeta^2}$  possiamo riscrivere l'equazione (1.13) come:

$$\zeta\frac{d^2}{d\zeta^2}w(\zeta) + \left(\frac{1}{2} + \zeta\right)\frac{d}{d\zeta}w(\zeta) + \frac{\lambda}{4}w(\zeta) = 0 \quad (1.14)$$

Questa formulazione dell'equazione (1.13) consente la sua risoluzione, essendo nella forma nota in letteratura come equazione di Kummer: [1], [2]

$$\zeta w''(\zeta) + (c - \zeta)w'(\zeta) - aw(\zeta) = 0 \quad (1.15)$$

che ha soluzione [18]:

$$w(\zeta) = A {}_1F_1(a, c, \zeta) + B \zeta^{1-c} {}_1F_1(a - c + 1, 2 - c, \zeta) \quad (1.16)$$

Di conseguenza la soluzione dell'equazione (1.13) è esprimibile come:

$$w(z) = A {}_1F_1\left(-\frac{\lambda}{4}, \frac{3}{2}, z^2\right) + B z {}_1F_1\left(\frac{2-\lambda}{4}, \frac{3}{2}, z^2\right) \quad (1.17)$$

dove  ${}_1F_1(a, b, z)$  è la funzione ipergeometrica confluyente, definita dall'equazione (A.1). Per ulteriori dettagli e per le proprietà di tale funzione si faccia riferimento alla sezione A.1 dell'appendice A.

Ricapitolando, e sistemando tutte le costanti introdotte, possiamo esprimere la soluzione per la regione ① come:

$$\begin{aligned} \psi_E^{(1)}(x) = & \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar}(x+a)^2 \right\} \cdot \\ & \cdot \left[ c_1 {}_1F_1 \left( -\frac{\lambda}{4}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x+a)^2 \right) + c_2 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x+a) {}_1F_1 \left( \frac{2-\lambda}{4}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x+a)^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (1.18)$$

dove:

$$\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1 \quad (1.19)$$

Analogamente è possibile trovare la soluzione per l'equazione (1.6) relativa alla regione ③:

$$\begin{aligned} \psi_E^{(3)}(x) = & \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2 \right\} \cdot \\ & \cdot \left[ f_1 {}_1F_1 \left( -\frac{\lambda}{4}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x-a)^2 \right) + f_2 \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x-a) {}_1F_1 \left( \frac{2-\lambda}{4}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x-a)^2 \right) \right] \end{aligned} \quad (1.20)$$

Si è dunque risolta l'equazione agli autovalori relativa all'hamiltoniana (1.3), ottenendo come autofunzioni la formula (1.18) per la regione ①, (1.7) per la regione ② e (1.20) per la regione ③. È ora necessario fare un raccordo fra le soluzioni relative alle tre regioni, imponendo che le funzioni e le derivate prime coincidano nei punti  $x = a$  e  $x = -a$  e che nei limiti  $x \rightarrow \infty$  e  $x \rightarrow -\infty$  le autofunzioni assumano un comportamento asintotico sommabile secondo  $L^2(\mathbb{R})$ . Per prima cosa è necessario sottolineare l'andamento asintotico delle funzione  ${}_1F_1$ , valido per  $z \rightarrow \infty$ , cfr. equazione (A.7) contenuta nella sezione A.4 dell'appendice A:

$${}_1F_1(a, b, z^2) \underset{z \gg 1}{\sim} \frac{\Gamma(b)}{\Gamma(a)} e^{z^2} z^{2(a-b)} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(1-a)_s (b-a)_s}{s!} z^{-2s} \quad (1.21)$$

dove con  $(a)_s$  indichiamo il simbolo di Pochhammer (A.8).

Imponiamo quindi la condizione asintotica:

$$\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi_E^{(1)}(x) = 0 \quad (1.22)$$

utilizzando la formula ottenuta (1.18) inserendo il comportamento asintotico della funzione  ${}_1F_1$  (1.21) troviamo che la precedente condizione è soddisfatta sse:

$$c_2 = c_1 \frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{3}{2}\right)} = 2c_1 \frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \quad (1.23)$$

Ciò comporta che sia possibile riscrivere la soluzione relativa alla regione ①, a meno di una sola costante, come:

$$\textcircled{1} \quad \psi_E^{(1)}(x) \propto \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x+a)^2\right\} \cdot \left[ {}_1F_1\left(\frac{-\lambda}{4}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x+a)^2\right) + 2\frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x+a) {}_1F_1\left(\frac{2-\lambda}{4}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x+a)^2\right) \right] \quad (1.24)$$

In maniera analoga imponiamo la condizione asintotica relativa al caso  $x \rightarrow \infty$ :

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_E^{(3)}(x) = 0 \quad (1.25)$$

Inseriamo nella formula (1.20) il comportamento asintotico della funzione  ${}_1F_1$  (1.21) e troviamo che:

$$f_2 = -2f_1 \frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \quad (1.26)$$

Di conseguenza possiamo trovare, analogamente alla formula (1.24), la soluzione per la regione ③:

$$\textcircled{3} \quad \psi_E^{(3)}(x) \propto \exp\left\{-\frac{m\omega}{2\hbar}(x-a)^2\right\} \cdot \left[ {}_1F_1\left(-\frac{\lambda}{4}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x-a)^2\right) - 2\frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(x-a) {}_1F_1\left(\frac{2-\lambda}{4}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}(x-a)^2\right) \right] \quad (1.27)$$

Per dovere di completezza, è necessario citare a questo punto l'equivalenza, che illustreremo più nel dettaglio in seguito (cfr. sezione 3.3 e sezione A.3 in Appendice A),

fra le le particolari equazioni differenziali di Kummer e di Whittaker in oggetto e l'equazione differenziale di Weber. Tale equivalenza consente di esprimere in maniera molto più compatta le autofunzioni energetiche nelle regioni ① e ③, utilizzando la funzione parabolica del cilindro, definita dalla (A.30) e le cui proprietà sono descritte nella sezione A.4 in Appendice A. Possiamo infatti riscrivere l'equazione di Schrödinger (1.6) relativa alla regione ③, definendo  $y = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}(x - a)$ , come:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{2m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{m\omega^2}{2} \frac{\hbar}{2m\omega} y^2 - E \right] \psi_E^{(3)}(y) = 0 \quad (1.28)$$

ovvero:

$$\left[ \frac{d^2}{dy^2} - \frac{y^2}{4} + \frac{E}{\hbar\omega} \right] \psi_E^{(3)}(y) = 0 \quad (1.29)$$

che è un'equazione di Weber, la cui soluzione è una funzione parabolica del cilindro, cfr. sezione A.4 in Appendice A, per cui:

$$\psi_E^{(3)} \propto D_{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}(x - a) \right) \quad (1.30)$$

Un calcolo assolutamente analogo può essere implementato anche per l'autofunzione energetica nella regione ①, per cui possiamo esprimere globalmente l'autofunzione energetica come segue:

$$\psi_E(x) = \begin{cases} c \cdot D_{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}(x + a) \right) & \text{se } x < -a \\ d_1 \sin(kx) + d_2 \cos(kx) & \text{se } -a \leq x \leq a \\ f \cdot D_{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}(x - a) \right) & \text{se } x > a \end{cases} \quad (1.31)$$

Imponendo le condizioni di raccordo, ovvero la continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima nei punti  $x = -a$  e  $x = +a$  otteniamo il seguente sistema:

$$\begin{cases} c \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{4}} = -d_1 \sin(ka) + d_2 \cos(ka) \end{cases} \quad (1.32a)$$

$$\begin{cases} f \cdot \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{4}} = d_1 \sin(ka) + d_2 \cos(ka) \end{cases} \quad (1.32b)$$

$$\begin{cases} c \cdot \sqrt{\frac{m\omega\pi}{\hbar}} \frac{2^{\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}}}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} = d_1 k \cos(ka) + d_2 k \sin(ka) \end{cases} \quad (1.32c)$$

$$\begin{cases} f \cdot \sqrt{\frac{m\omega\pi}{\hbar}} \frac{2^{\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}}}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} = -d_1 k \cos(ka) + d_2 k \sin(ka) \end{cases} \quad (1.32d)$$

---

Da questo sistema è possibile non solo determinare i valori numerici delle costanti arbitrarie  $c$ ,  $d_1$ ,  $d_2$  e  $f$ , ma anche determinare, per mezzo di un'equazione trascendente, lo spettro energetico della buca di potenziale a pareti elastiche, come vedremo meglio nel prossimo capitolo.



---

## Spettro energetico della buca di potenziale a pareti elastiche

---

Il metodo meno pesante, dal punto di vista algebrico, per ricavare l'equazione dello spettro energetico della buca finita di potenziale con pareti elastiche, descritta dal potenziale (1.1), poggia le basi su un'osservazione abbastanza interessante: la quantità fondamentale che determina lo spettro energetico è in effetti il rapporto fra la funzione d'onda e la sua derivata prima, calcolate nel punto di raccordo delle differenti definizioni del potenziale stesso.

Al fine di comprendere questa affermazione, analizziamo un potenziale per certi versi simile a quello (1.1) in oggetto: la buca finita di potenziale.

### 2.1 Analogia con buca di potenziale

Consideriamo un potenziale più semplice di quello in analisi, per trarre spunti utili all'individuazione dello spettro energetico. Prendiamo quindi il potenziale relativo alla buca finita, trattato nella quasi totalità dei manuali di meccanica quantistica [8] [16] [25] [34], il cui grafico è illustrato in figura 2.1:

$$V(x) = V_0[\theta(x - a) + \theta(-x - a)] \quad (2.1)$$

Facendo riferimento ad uno qualsiasi dei manuali di meccanica quantistica sopra citati, per esempio [8], possiamo affermare che le autofunzioni energetiche nelle regioni ① e ③, ovvero quelle in cui  $x < a$  e  $x > a$ , sono rispettivamente:

$$\psi_E^{(1)}(x) = c \cdot e^{+\kappa(x+a)} \quad (2.2)$$

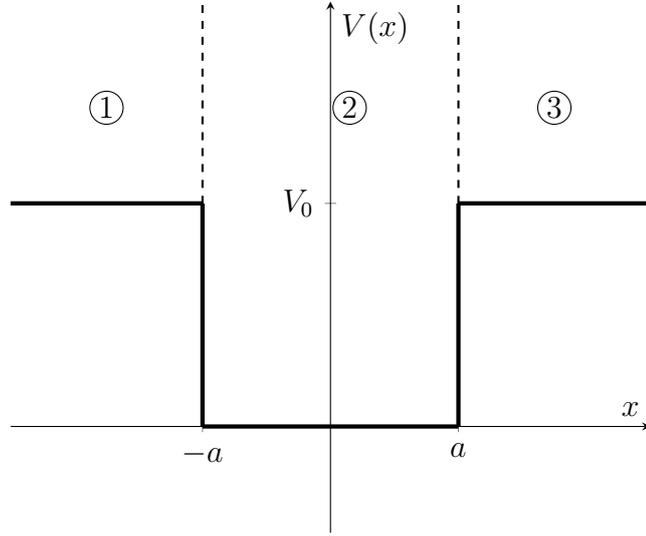


Figura 2.1: La buca finita di potenziale, definita dall'equazione (2.1).

$$\psi_E^{(3)}(x) = f \cdot e^{-\kappa(x-a)} \quad (2.3)$$

dove

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (2.4)$$

L'autofunzione relativa alla regione ②, cioè  $-a < x < a$  risulta essere invece:

$$\psi_E^{(2)}(x) = d_1 \sin(kx) + d_2 \cos(kx) \quad (2.5)$$

dove

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.6)$$

Siamo ora in grado di effettuare il raccordo delle funzioni d'onda e delle derivate prime delle stesse nei punti  $x = -a$  e  $x = +a$ , ottenendo le seguenti quattro equazioni:

$$\lim_{x \rightarrow -a^-} \psi_E^{(1)}(x) = c = -d_1 \sin(ka) + d_2 \cos(ka) = \lim_{x \rightarrow -a^+} \psi_E^{(2)}(x) \quad (2.7)$$

$$\lim_{x \rightarrow -a^-} \frac{d}{dx} \psi_E^{(1)}(x) = c \kappa = d_1 k \cos(ka) + d_2 k \sin(ka) = \lim_{x \rightarrow -a^+} \frac{d}{dx} \psi_E^{(2)}(x) \quad (2.8)$$

$$\lim_{x \rightarrow a^-} \psi_E^{(2)}(x) = d_1 \sin(ka) + d_2 \cos(ka) = f = \lim_{x \rightarrow a^+} \psi_E^{(3)}(x) \quad (2.9)$$

$$\lim_{x \rightarrow a^-} \frac{d}{dx} \psi_E^{(2)}(x) = d_1 k \cos(ka) - d_2 k \sin(ka) = -f \kappa = \lim_{x \rightarrow a^+} \frac{d}{dx} \psi_E^{(3)}(x) \quad (2.10)$$

Riscriviamo in modo più ordinato il sistema delle quattro equazioni precedenti nelle quattro incognite  $c$ ,  $d_1$ ,  $d_2$ ,  $f$ :

$$\begin{cases} c = -d_1 \sin(ka) + d_2 \cos(ka) & (2.11a) \\ c \kappa = d_1 k \cos(ka) + d_2 k \sin(ka) & (2.11b) \\ f = d_1 \sin(ka) + d_2 \cos(ka) & (2.11c) \\ f \kappa = -d_1 k \cos(ka) + d_2 k \sin(ka) & (2.11d) \end{cases}$$

Esplicitando  $d_2$  nella (2.11a) ed inserendo il risultato  $d_2 = \frac{c+d_1 \sin(ka)}{\cos(ka)}$  nella (2.11b) otteniamo la seguente equazione per  $d_1$ :

$$d_1 = c \left[ \frac{\kappa}{k} \cos(ka) - \sin(ka) \right] \quad (2.12)$$

Facendo uso ancora della (2.11a), alla luce del risultato (2.12), otteniamo inoltre:

$$d_2 = c \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(ka) + \cos(ka) \right] \quad (2.13)$$

L'inserimento delle formule (2.12) e (2.13) nelle equazioni (2.11c) e (2.11d) porta alla risoluzione delle equazioni (2.11c) e (2.11d) in funzione di  $f$  e alla riscrittura globale del sistema (2.11) come:

$$\begin{cases} d_1 = c \left[ \frac{\kappa}{k} \cos(ka) - \sin(ka) \right] & (2.14a) \\ d_2 = c \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(ka) + \cos(ka) \right] & (2.14b) \end{cases}$$

$$\begin{cases} f = c \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(2ka) + \cos(2ka) \right] & (2.14c) \\ \kappa f = c \left[ -\kappa \cos(2ka) + k \sin(2ka) \right] & (2.14d) \end{cases}$$

Ovviamente per ottenere le (2.14c) e (2.14d) si sono utilizzate le note [39] identità trigonometriche  $\sin(2\alpha) = 2 \sin \alpha \cos \alpha$  e  $\cos(2\alpha) = \cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha$ . Se si considerano ora le equazioni (2.14c) e (2.14d), si giunge, inserendo il valore della  $f$  fornito dalla (2.14c) nella (2.14d), all'equazione:

$$\kappa = \frac{-\kappa \cos(2ka) + k \sin(2ka)}{\frac{\kappa}{k} \sin(2ka) + \cos(2ka)} \implies 2\kappa \cos(2ka) = \left( k - \frac{\kappa^2}{k} \right) \sin(2ka)$$

ovvero:

$$\boxed{\tan(2ka) = \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}} \quad (2.15)$$

dove  $k$  e  $\kappa$  sono dati rispettivamente da (2.6) e (2.4) nel caso analizzato. La risoluzione di questa equazione trascendente genera direttamente lo spettro energetico della buca di potenziale (2.1).

Analizziamo, alla luce del risultato (2.15), il sistema (2.14) ancora una volta, al fine di comprendere quali siano i rapporti di parità e disparità delle autofunzioni. Per prima cosa otteniamo l'espressione per la tangente di  $ka$ , utilizzando la forma inversa della formula di duplicazione della tangente [39]  $\tan(2\alpha) = 2 \tan \alpha / (1 - \tan^2 \alpha)$ :

$$\begin{aligned} \tan(ka) &= -\frac{1}{\tan(2ka)} \pm \sqrt{1 + \frac{1}{\tan^2(2ka)}} \\ &= \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \pm \sqrt{1 + \frac{k^4 + \kappa^4 - 2k^2\kappa^2}{4k^2\kappa^2}} \\ &= \frac{\kappa^2 - k^2}{2k\kappa} \pm \frac{k^2 + \kappa^2}{2k\kappa} \\ &= \begin{cases} +\frac{\kappa}{k} & \text{caso (a)} \\ -\frac{k}{\kappa} & \text{caso (b)} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.16)$$

Osserviamo quindi che ci troviamo in presenza di due casi distinti, a seconda del valore che assume la tangente di  $ka$ . Denominiamo questi due casi (a) e (b). Alla luce del risultato (2.16) e delle formule parametriche delle funzioni trigonometriche [39] possiamo calcolare le altre funzioni trigonometriche con argomento  $2ka$ :

$$\sin(2ka) = \frac{2 \tan(ka)}{1 + \tan^2(ka)} = \begin{cases} \frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2} > 0 & \text{caso (a)} \\ -\frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2} < 0 & \text{caso (b)} \end{cases} \quad (2.17)$$

$$\cos(2ka) = \frac{1 - \tan^2(ka)}{1 + \tan^2(ka)} = \begin{cases} \frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} & \text{caso (a)} \\ -\frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} & \text{caso (b)} \end{cases} \quad (2.18)$$

Osserviamo immediatamente come il seno di  $2ka$  risulti sempre positivo nel caso (a) e sempre negativo nel caso (b), e di come il segno del coseno di  $2ka$  dipenda invece dal segno di  $k^2 - \kappa^2$ . In effetti questa proprietà è compatibile con l'espressione (2.15), secondo la quale risulta che  $\tan(2ka) > 0$  sotto l'ipotesi  $k^2 > \kappa^2$ , ed è quindi ovvio che seno e coseno di  $2ka$  abbiano segno concorde, e viceversa nel caso  $\kappa^2 > k^2$ .

Cerchiamo ora di capire quali siano le implicazioni della formula (2.16) nei casi (a) e (b)

riguardanti le autofunzioni energetiche, considerando nuovamente la equazioni (2.12) e (2.13):

$$d_1 = c \cdot \cos(ka) \left[ \frac{\kappa}{k} - \tan(ka) \right] = \begin{cases} c \cdot \cos(ka) \left[ \frac{\kappa}{k} - \frac{\kappa}{k} \right] = 0 & \text{caso } \textcircled{a} \\ c \cdot \cos(ka) \left[ \frac{\kappa}{k} + \frac{k}{\kappa} \right] \neq 0 & \text{caso } \textcircled{b} \end{cases} \quad (2.19)$$

$$d_2 = c \cdot \cos(ka) \left[ \frac{\kappa}{k} \tan(ka) + 1 \right] = \begin{cases} = c \cdot \cos(ka) \left[ \frac{\kappa}{k} \cdot \frac{\kappa}{k} + 1 \right] \neq 0 & \text{caso } \textcircled{a} \\ = c \cdot \cos(ka) \left[ \frac{\kappa}{k} \left( -\frac{k}{\kappa} \right) + 1 \right] = 0 & \text{caso } \textcircled{b} \end{cases} \quad (2.20)$$

Osserviamo come nel caso  $\textcircled{a}$  si annulli il coefficiente numerico  $d_1$ , mentre nel caso  $\textcircled{b}$  è il coefficiente  $d_2$  ad annullarsi. Poiché  $d_1$  moltiplica il termine dispari, ovvero il seno, mentre  $d_2$  moltiplica il termine pari, ovvero il coseno, possiamo concludere che il caso  $\textcircled{a}$  determina una funzione pari nella regione spaziale  $\textcircled{2}$ , mentre il caso  $\textcircled{b}$  determina una funzione dispari nella regione spaziale  $\textcircled{2}$ .

Verifichiamo ora che in realtà queste proprietà di parità/disparità sono relative a tutto l'asse reale, confrontando i valori numerici di  $c$  e  $f$  per mezzo della relazione (2.14c) e delle formule (2.17) e (2.18) ottenute:

$$f = c \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(2ka) + \cos(2ka) \right] = \begin{cases} c \left[ \frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{k} \frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right] = +c & \text{caso } \textcircled{a} \\ c \left[ -\frac{k^2 - \kappa^2}{k^2 + \kappa^2} + \frac{\kappa}{k} \left( -\frac{2k\kappa}{k^2 + \kappa^2} \right) \right] = -c & \text{caso } \textcircled{b} \end{cases} \quad (2.21)$$

Ovvero vale che  $f = c$  nel caso  $\textcircled{a}$ , e  $f = -c$  nel caso  $\textcircled{b}$ . Questo significa che  $\psi_E^{(1)}(x) = \psi_E^{(3)}(-x)$  nel caso  $\textcircled{a}$  e  $\psi_E^{(1)}(x) = -\psi_E^{(3)}(-x)$  nel caso  $\textcircled{b}$ , e di conseguenza il caso  $\textcircled{a}$  è quello di una autofunzione energetica globalmente pari su tutto l'asse reale e il caso  $\textcircled{b}$  quello di una autofunzione energetica dispari su tutto l'asse reale.

Nella prossima sezione cercheremo di generalizzare i risultati ottenuti nel caso della buca finita di potenziale al caso in interesse (1.1).

## 2.2 Equazione trascendente dello spettro energetico

Ritorniamo allo studio del potenziale (1.1), alla luce dei risultati acquisiti nella precedente sezione 2.1. Lo studio di questo potenziale (1.1) risulta analogo a quello più semplice presentato in (2.1), a meno della forma delle funzioni d'onda nelle regioni  $\textcircled{1}$  e  $\textcircled{3}$  (cfr. equazioni (1.24)-(2.2) e (1.27)-(2.3)). Si tenga presente anche delle analogie presenti nei sistemi (1.32) e (2.11).

A causa della completa simmetria dei calcoli nei due casi sopra citati, possiamo affermare che la forma dell'equazione trascendente sarà la stessa di prima (2.15):

$$\boxed{\tan(2ka) = \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2}} \quad (2.22)$$

dove  $k$  è il medesimo del caso della buca finita di potenziale (2.6), essendo legato alle soluzioni valide nella regione ②, immutate nei due casi:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Una sostanziale differenza risulta invece nella forma esplicita di  $\kappa$ , che è ora ben diverso, essendo differenti le funzioni d'onda nelle regioni ① e ③. Calcolando la derivata prima della funzione (1.24) si ottiene infatti (facciamo uso qui, per praticità, delle autofunzioni energetiche della buca di potenziale con pareti elastiche definite a partire dalle funzioni ipergeometriche confluenti):

$$\kappa = \left. \frac{d}{dx} \psi_E^{(1)}(x) \right|_{x=-a} = 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \quad (2.23)$$

$$\boxed{\kappa = 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}\right)}} \quad (2.24)$$

In questo modo abbiamo determinato completamente qual è l'equazione trascendente (2.22) che determina lo spettro energetico dell'hamiltoniana (1.3) relativa alla buca di potenziale con pareti elastiche. Inoltre l'analogia viene estesa anche alla parità delle autofunzioni che risultano avere sempre una parità definita, pari o dispari, a seconda del valore energetico dello spettro.

## 2.3 Limiti notevoli

Analizziamo il comportamento dello spettro energetico, attraverso lo studio dell'equazione (2.22) trascendente in  $E$ , in alcuni limiti notevoli che fanno tendere il sistema a condizioni note.

### 2.3.1 Limite $a \rightarrow 0$

Nel limite  $a \rightarrow 0$  ci attendiamo che il sistema tenda ad un oscillatore armonico standard.

Osserviamo innanzitutto che:

$$a \rightarrow 0 \implies \tan(2ka) \rightarrow 0$$

Il che, prendendo in considerazione l'equazione (2.22), accade nei casi  $\kappa = 0, \infty$  ovvero rispettivamente:

$$\Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}\right) \rightarrow \infty \quad \vee \quad \Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}\right) \rightarrow \infty \quad (2.25)$$

Ricordando che la funzione  $\Gamma$  di Eulero è singolare per argomenti interi negativi (o nulli), abbiamo:

$$E = \hbar\omega \left(2\eta + \frac{1}{2}\right) \quad \vee \quad E = \hbar\omega \left(2\eta + \frac{3}{2}\right) \quad (2.26)$$

dove  $\eta$  è un intero, zero compreso, per cui:

$$\frac{E}{\hbar\omega} = \frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{9}{2}, \frac{13}{2}, \dots \quad \vee \quad \frac{E}{\hbar\omega} = \frac{3}{2}, \frac{7}{2}, \frac{11}{2}, \frac{15}{2}, \dots \quad (2.27)$$

che può essere riscritto compattamente come:

$$\boxed{E = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)} \quad (2.28)$$

dove  $n$  è un intero, zero compreso. Osserviamo dunque che la condizione  $\kappa = 0$  genera le soluzioni corrispondenti a  $n$  pari mentre la condizione  $\kappa = \infty$  genera le soluzioni con  $n$  dispari. Risulta inoltre evidente che il limite è compatibile con il risultato atteso di un normale oscillatore armonico (D.6).

### 2.3.2 Limite $\omega \rightarrow \infty$

Nel limite  $\omega \rightarrow \infty$  ci attendiamo che il sistema tenda ad una buca di potenziale con pareti infinite, o se vogliamo a un potenziale del tipo (2.1) ma dove  $V_0 \rightarrow \infty$ .

Per prima cosa calcoliamo il comportamento del secondo membro della (2.22) nel limite  $\omega \rightarrow \infty$ , dopo aver definito il *numero*  $\gamma = \frac{\Gamma(\frac{3}{4})}{\Gamma(\frac{1}{4})} \approx 0,33799$  :

$$\frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2} \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\sqrt{\omega}} \left( \frac{4\gamma k \sqrt{\frac{m}{\hbar}}}{\frac{k^2}{\omega} - 4\gamma^2 \frac{m}{\hbar}} \right) \xrightarrow{\omega \rightarrow \infty} 0 \quad (2.29)$$

Ne consegue che lo spettro energetico nel limite  $\omega \rightarrow \infty$  è determinato dalla condizione:

$$\tan(2ka) = 0 \quad (2.30)$$

ovvero:

$$2 \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} a = n\pi \quad (2.31)$$

dalla quale troviamo:

$$\boxed{E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}} \quad (2.32)$$

che riproduce correttamente il comportamento atteso di una buca infinita di potenziale. [16]

### 2.3.3 Limite $k \rightarrow \infty$

Analizzando la struttura dell'equazione (2.22) nel limite  $k \rightarrow \infty$  osserviamo come il primo membro sia oscillante, mentre il secondo non appaia di immediata interpretazione. Per questo motivo partiamo dall'analisi del comportamento di  $\kappa$ , definito dall'equazione (2.24), per la quale è però necessario premettere alcune proprietà della funzione  $\Gamma$ :

$$\Gamma(-z + 1) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)\Gamma(z)} \quad (2.33)$$

inoltre è valida l'approssimazione asintotica per  $z \rightarrow \infty$  (formula di Stirling):

$$\Gamma(z) \underset{z \gg 1}{\sim} \sqrt{2\pi} z^{z-\frac{1}{2}} e^{-z} \quad (2.34)$$

Alla luce di queste due proprietà è possibile sviluppare il termine a numeratore nella formula (2.24) nell'ipotesi  $k \gg 1$ :

$$\begin{aligned} \Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}\right) &= \Gamma\left(-\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{3}{4}\right) \\ &= \frac{\pi}{\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{\pi}{4}\right)\Gamma\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{1}{4}\right)} \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{\left[\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) + \cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]\Gamma\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{1}{4}\right)} \\ &\approx \frac{\sqrt{\pi} \exp\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{1}{4}\right)}{\left[\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) + \cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{1}{4}\right)^{\frac{\hbar k^2}{4m\omega} - \frac{1}{4}}} \end{aligned} \quad (2.35)$$

In modo assolutamente analogo si può sviluppare anche il denominatore della formula (2.24), nell'ipotesi  $k \gg 1$ :

$$\begin{aligned} \Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}\right) &= \Gamma\left(-\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{1}{4}\right) \\ &= \frac{\pi}{\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{3}{4}\pi\right)\Gamma\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{3}{4}\right)} \\ &= \frac{\sqrt{2\pi}}{\left[\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) - \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]\Gamma\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{3}{4}\right)} \\ &\approx \frac{\sqrt{\pi} \exp\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{3}{4}\right)}{\left[\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) - \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]\left(\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{3}{4}\right)^{\frac{\hbar k^2}{4m\omega} + \frac{1}{4}}} \end{aligned} \quad (2.36)$$

Introduciamo una variabile ausiliaria per semplificare il calcolo:

$$\chi = \frac{\hbar k^2}{4m\omega} \quad (2.37)$$

I comportamenti asintotici, calcolati nel caso  $k \rightarrow \infty$ , ovviamente dopo il cambio di variabile valgono nel caso  $\chi \rightarrow \infty$ . Alla luce della definizione della  $\chi$  e delle due formule asintotiche per la  $\Gamma$  appena calcolate, l'espressione asintotica per la  $\kappa$  risulta essere:

$$\kappa \underset{\chi \gg 1}{\sim} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\cos(\pi\chi) - \sin(\pi\chi)}{\cos(\pi\chi) + \sin(\pi\chi)} e^{-\frac{1}{2}} \frac{(\chi + \frac{3}{4})^{\chi + \frac{1}{4}}}{(\chi + \frac{1}{4})^{\chi - \frac{1}{4}}} \quad (2.38)$$

ovvero, espandendo l'ultima frazione:

$$\kappa \underset{\chi \gg 1}{\sim} 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\cos(\pi\chi) - \sin(\pi\chi)}{\cos(\pi\chi) + \sin(\pi\chi)} \chi^{\frac{1}{2}} \quad (2.39)$$

Inserendo la definizione (2.37) di  $\chi$ , infine otteniamo:

$$\kappa \approx k \frac{\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) - \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)}{\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) + \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)} \quad (2.40)$$

Osserviamo che  $\kappa$  non ha un comportamento definito quando  $k \gg 1$ , poiché sebbene il termine  $k$  sia grande, il numeratore della frazione oscilla e si può anche annullare. Per poter sviluppare il secondo membro dell'equazione (2.22) occorre calcolarsi il quadrato di  $\kappa$ :

$$\kappa^2 \approx k^2 \frac{1 - 2\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)}{1 + 2\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)} \quad (2.41)$$

A questo punto, finalmente, possiamo calcolarci il secondo membro della (2.22):

$$\begin{aligned} \frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2} &= \frac{2\frac{\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) - \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)}{\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) + \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)}}{1 - \frac{1 - 2\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)}{1 + 2\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)}} \\ &= \frac{2\left[\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) - \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]\left[1 + 2\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]}{\left[\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) + \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\right]4\sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)\cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right)} \end{aligned} \quad (2.42)$$

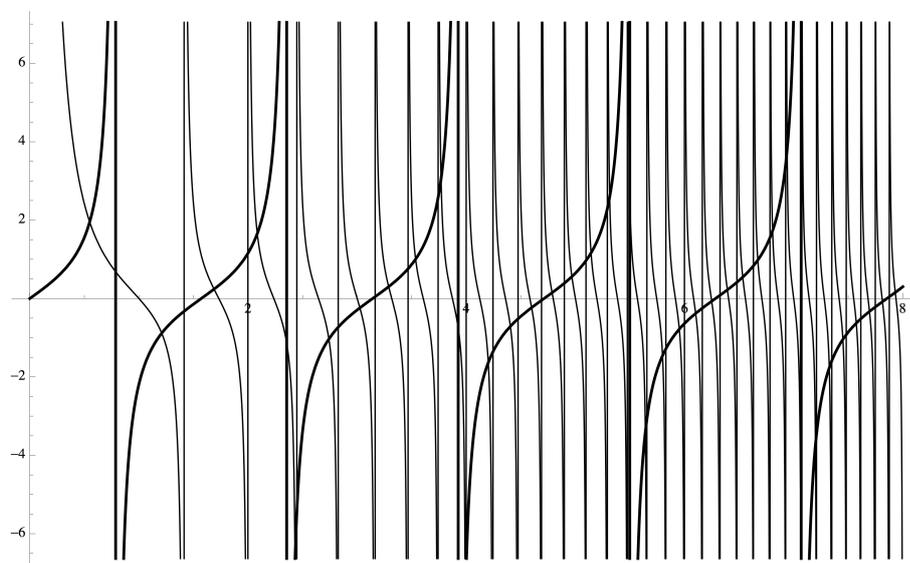


Figura 2.2: Grafico che mostra contemporaneamente il primo membro (linea spessa) e il secondo membro (linea sottile) dell'equazione (2.43), nelle seguenti ipotesi: unità naturali di Planck  $\hbar = c = 1$  e  $m = k = \omega = 1$ . Il grafico è tracciato nella regione  $0 < k < 8$ .

Lo spettro energetico, nel limite  $k \rightarrow \infty$ , è allora determinato dall'equazione trascendente

$$\tan(2ka) = \frac{\left[ \cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) - \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) \right] \left[ 1 + 2 \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) \cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) \right]}{2 \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) \cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) \left[ \cos\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) + \sin\left(\frac{\pi\hbar k^2}{4m\omega}\right) \right]} \quad (2.43)$$

in cui entrambi i membri oscillano, ma il secondo membro molto più violentemente per  $k$  grandi. Si faccia riferimento alla figura 2.2, ottenuta grazie al software *Mathematica*<sup>1</sup>, per avere un'idea della distribuzione delle soluzioni. Sempre dall'implementazione al calcolatore si osserva un addensarsi delle soluzioni per grandi  $k$ , ma senza un apparente ordine (tipicamente un'equidistanza fra i livelli energetici).

Di conseguenza possiamo affermare che sebbene un ragionamento intuitivo ci avesse portato a credere che lo spettro ad alti  $k$  tendesse a quello dell'oscillatore armonico standard, in effetti questa supposizione si è rivelata errata: la presenza di una zona centrale a potenziale nullo rompe l'equidistanza dei livelli energetici anche ad alte energie.

---

<sup>1</sup>Wolfram Research Inc., Mathematica 9.0, Wolfram Research, Champaign, 2012.

## 2.4 Comportamenti all'ordine più basso diverso da zero

Raffiniamo al primo ordine perturbativo i limiti analizzati in precedenza, ovvero i casi  $a \ll 1$  di un potenziale quasi armonico e  $\omega \gg 1$  di una buca con pareti quasi assolutamente rigide.

### 2.4.1 Analisi potenziale quasi-armonico: $a \ll 1$

Supponiamo  $a \ll 1$  ma non nullo e vediamo quali saranno le correzioni al prim'ordine in  $a$  allo spettro energetico.

Innanzitutto osserviamo che:

$$\tan(2ka) = 2ka + O(a^3) \quad (2.44)$$

Di conseguenza l'equazione (2.22) si riduce a:

$$a = \frac{\kappa}{k^2 - \kappa^2} \quad (2.45)$$

Nella sottosezione 2.3.1 abbiamo già osservato come il secondo membro della precedente equazione diventi piccolo quando  $\kappa \ll 1$  oppure  $\kappa \gg 1$ , rispettivamente corrispondenti alle soluzioni pari e dispari. Siamo nella necessità dunque di analizzare in maniera distinta i due casi, pari e dispari:

$$\Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}\right) \gg 1 \quad \vee \quad \Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}\right) \gg 1 \quad (2.46)$$

**Caso pari:**  $\kappa \ll 1$  cioè  $\Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}\right) \gg 1$

Partiamo dall'ipotesi che l'introduzione di un  $a$  piccolo non modifichi di molto lo spettro energetico, il quale sarà analogo a quello espresso nell'equazione (D.6), con  $n$  pari, a meno di una piccola correzione dipendente da  $a$  e da  $n$ :

$$\boxed{E = \hbar\omega \left(2n + \frac{1}{2} - 2\varepsilon_n(a)\right)} \quad (2.47)$$

Inoltre l'equazione (2.45) diventa, essendo  $\kappa \ll 1$ :

$$a = \frac{\kappa}{k^2} \quad (2.48)$$

Combinando le ultime due equazioni si verifica che l'equazione (2.45) assume la forma:

$$k^2 a = 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\Gamma\left(-n + \frac{1}{2} + \varepsilon_n(a)\right)}{\Gamma\left(-n + \varepsilon_n(a)\right)} \quad (2.49)$$

cioè, ricordando che  $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ :

$$k^2 a = 2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{\varepsilon_n(1-\varepsilon_n)\dots(n-\varepsilon_n)}{\left(\frac{1}{2}-\varepsilon_n\right)\left(\frac{3}{2}-\varepsilon_n\right)\dots\left(\frac{2n-1}{2}-\varepsilon_n\right)} \cdot \frac{\Gamma\left(\frac{1}{2}+\varepsilon_n\right)}{\Gamma(1+\varepsilon_n)} \quad (2.50)$$

sostituendo l'espressione (2.6) per  $k$  ed espandendo al prim'ordine in  $\varepsilon_n$  le funzioni  $\Gamma$  di Eulero:

$$2\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}(4n+1-4\varepsilon_n)a = \frac{\varepsilon_n(-\varepsilon_n)\dots(n-\varepsilon_n)}{\left(\frac{1}{2}-\varepsilon_n\right)\left(\frac{3}{2}-\varepsilon_n\right)\dots\left(\frac{2n-1}{2}-\varepsilon_n\right)} \frac{\sqrt{\pi}\left(1+\Psi\left(\frac{1}{2}\right)\varepsilon_n\right)}{1-\mathbf{C}\varepsilon_n} \quad (2.51)$$

dove  $\mathbf{C}$  è la costante di Eulero-Mascheroni e  $\Psi(x) = \frac{d \ln \Gamma(x)}{dx}$ . Approssimando al prim'ordine in  $\varepsilon_n(a)$  si ottiene il risultato lineare in  $a$ :

$$\boxed{\varepsilon_n(a) = 2\pi^{-1/2} \frac{(4n+1)(2n-1)!!}{2^n n!} \frac{a}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}}} \quad (2.52)$$

Dove con !! indichiamo il fattoriale doppio, definito come:

$$(2n)!! = 2 \cdot 4 \cdot \dots \cdot (2n-2) \cdot (2n) \quad (2n+1)!! = 3 \cdot 5 \cdot \dots \cdot (2n-1) \cdot (2n+1) \quad (2.53)$$

Il risultato è ragionevole poiché:

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{(4n+1)(2n-1)!!}{2^n n!} = \infty \quad (2.54)$$

Questo risultato suggerisce che questa formula sia valida solo per valori di  $n$  non troppo grandi.

**Caso dispari:**  $\kappa \gg 1$  cioè  $\Gamma\left(-\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}\right) \gg 1$

Partiamo dall'ipotesi che l'introduzione di un  $a$  piccolo non modifichi di molto lo spettro energetico, il quale sarà analogo a quello espresso nell'equazione (D.6), con  $n$  dispari, a meno di una piccola correzione dipendente da  $a$  e da  $n$ :

$$\boxed{E = \hbar\omega \left(2n + \frac{3}{2} - 2\varepsilon_n(a)\right)} \quad (2.55)$$

Inoltre l'equazione (2.45) diventa, essendo  $\kappa \gg 1$ :

$$a = -\frac{1}{\kappa} \quad (2.56)$$

Combinando le ultime due equazioni si verifica che l'equazione (2.45) assume la forma:

$$2a \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = -\frac{\Gamma(-n - \frac{1}{2} + \varepsilon_n(a))}{\Gamma(-n + \varepsilon_n(a))} \quad (2.57)$$

cioè, ricordando che  $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$ :

$$2a \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} = \frac{\varepsilon_n(1 - \varepsilon_n) \dots (n - \varepsilon_n)}{(\frac{1}{2} - \varepsilon_n)(\frac{3}{2} - \varepsilon_n) \dots (\frac{2n+1}{2} - \varepsilon_n)} \cdot \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + \varepsilon_n)}{\Gamma(1 + \varepsilon_n)} \quad (2.58)$$

Approssimando al prim'ordine in  $\varepsilon_n(a)$  si ottiene il risultato lineare in  $a$ :

$$\boxed{\varepsilon_n(a) = 2\pi^{-1/2} \frac{(2n+1)!!}{2^{n+1} n!} \frac{a}{\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}} } \quad (2.59)$$

Il risultato è ragionevole poiché

$$\lim_{n \rightarrow +\infty} \frac{(2n+1)!!}{2^{n+1} n!} = \infty \quad (2.60)$$

Questo risultato suggerisce che questa formula sia valida solo per valori di  $n$  non troppo grandi.

### 2.4.2 Analisi del potenziale con pareti quasi assolutamente rigide: $\omega \gg 1$

Cominciamo l'analisi al più basso ordine perturbativo in  $\frac{1}{\omega}$  partendo dal considerare  $\kappa$ , la cui espressione è data in (2.24). Espandendo in serie di potenze l'espressione (2.24) otteniamo:

$$\kappa = 2\gamma \sqrt{\frac{m}{\hbar}} \omega^{1/2} \left\{ 1 + \frac{1}{\omega} \frac{E}{2\hbar} \left[ \Psi\left(\frac{1}{4}\right) - \Psi\left(\frac{3}{4}\right) \right] + O\left(\frac{1}{\omega^2}\right) \right\} \quad (2.61)$$

Dove con  $\gamma$  indichiamo il numero finito già utilizzato e definito a pagina 19. Osserviamo quindi come  $\kappa$  sia anch'esso un numero grande, dell'ordine di  $\omega^{1/2}$ , per cui possiamo scrivere il secondo membro dell'equazione (2.22), approssimando all'ordine più basso, come:

$$\frac{2k\kappa}{k^2 - \kappa^2} = -\frac{k}{\gamma} \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \omega^{-1/2} + O\left(\frac{1}{\omega^{3/2}}\right) \quad (2.62)$$

mentre il primo membro della (2.22) non dipende da  $\omega$ . Una prima approssimazione della formula (2.22) nel caso  $\kappa \gg 1$  può essere quindi:

$$\tan(2ka) \approx -\frac{k}{\gamma} \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \omega^{-1/2} \quad (2.63)$$

Assumiamo ora che lo spettro energetico per  $\kappa \gg 1$  non si discosti troppo da quello (2.32) già calcolato nel limite  $\kappa \rightarrow \infty$ :

$$\boxed{E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} + \varepsilon(\omega)} \quad (2.64)$$

dove appunto  $\varepsilon(\omega)$  è una quantità piccola rispetto a  $E$ . Inserendo dapprima la forma esplicita (2.6) di  $k$  e poi quest'ultima espressione dentro la (2.63) otteniamo:

$$\tan \left( \frac{a\sqrt{8m}}{\hbar} \sqrt{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} + \frac{\varepsilon(\omega)\sqrt{8ma^2}}{2\sqrt{n^2 \pi^2 \hbar^2}}} \right) = -\frac{\sqrt{2}}{\gamma\sqrt{\hbar\omega}} \sqrt{\frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} + \varepsilon(\omega)} \quad (2.65)$$

Utilizziamo l'espansione  $\sqrt{a+\varepsilon} = \sqrt{a} + \frac{\varepsilon}{2\sqrt{a}} + O(\varepsilon^2)$  e trascuriamo l'ultimo termine risultante a secondo membro, di ordine inferiore, più precisamente  $O\left(\frac{\varepsilon(\omega)}{\sqrt{\omega}}\right)$ , ottenendo infine:

$$\tan \left( n\pi + \frac{4ma^2}{n\pi\hbar^2} \varepsilon(\omega) \right) = -\frac{n\pi}{2\gamma a} \sqrt{\frac{\hbar}{m}} \omega^{-1/2} \quad (2.66)$$

Ovviamente il termine  $n\pi$  a primo membro si può elidere a causa della periodicità della funzione tangente. Inoltre poiché l'argomento della funzione tangente è piccolo, utilizzando il fatto che  $\tan(x) = x + O(x^2)$ , si giunge infine a:

$$\boxed{\varepsilon(\omega) = -\frac{n^2 \pi^2 \hbar^{5/2}}{8m^{3/2} a^3 \gamma} \frac{1}{\sqrt{\omega}}} \quad (2.67)$$

---

## Miscellanea di propagatori

---

Per prima cosa si intende ricordare brevemente la definizione di propagatore quantistico, come *kernel* della funzione d'onda e come valor medio dell'operatore di evoluzione. In seguito discuteremo l'approssimazione semiclassica del propagatore e la formula di Pauli - van Vleck - Morette, infine illustreremo alcune computazioni di propagatori relativi a potenziali interessanti, forma "esatta" e in forma "semiclassica".

Il propagatore viene definito come nucleo integrale: [14]

$$\psi(t_2, x_2) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 K(x_1, t_1; x_2, t_2) \psi(t_1, x_1) \quad (3.1)$$

Ricordando la definizione dell'operatore di evoluzione per un'hamiltoniana  $H$  indipendente dal tempo [8]

$$U(t_1, t_2) = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} H t \right\} \quad (3.2)$$

che ha come proprietà fondamentale

$$|\psi(t')\rangle = U(t', t) |\psi(t)\rangle \quad (3.3)$$

possiamo scrivere la seguente relazione per  $\psi(t_2, x_2)$ :

$$\begin{aligned} \psi(t_2, x_2) &= \langle x_2 | \psi(t_2) \rangle \\ &= \langle x_2 | U(t_2, t_1) \psi(t_1) \rangle \\ &= \langle x_2 | U(t_2, t_1) \left( \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 |x_1\rangle \langle x_1| \right) \psi(t_1) \rangle \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \langle x_2 | U(t_2, t_1) |x_1\rangle \langle x_1 | \psi(t_1) \rangle \end{aligned} \quad (3.4)$$

Il confronto di quest'ultimo risultato con l'equazione (3.1) porta alla nota equazione:

$$\boxed{K(x_1, t_1; x_2, t_2) = \langle x_2 | e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_2-t_1)} | x_1 \rangle} \quad (3.5)$$

Questa formula garantisce come risultato quella che denoteremo come forma "esatta" del propagatore.

Talvolta però non sarà possibile computare il propagatore quantistico nella sua forma "esatta" fornita dalla formula (3.5), per cui si rende necessaria un'ulteriore formula, questa volta approssimata. A questo scopo utilizzeremo la formula di Pauli - van Vleck - Morette: [27], [31], [36], [29] [30]

$$\boxed{K_{sc}(x_1, t_1; x_2, t_2) = \sqrt{\frac{1}{2i\pi\hbar}} \sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|} e^{\frac{i}{\hbar}S_{cl}}} \quad (3.6)$$

dove con  $S_{cl}$  denotiamo l'azione classica del sistema.

Il fattore

$$\sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_{cl}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|}$$

assume il nome di determinante di van Vleck.

### 3.1 Propagatore gradino infinito di potenziale

Al fine di comprendere il calcolo del propagatore per la buca di potenziale finita ed infinita che tratteremo nel seguito, analizziamo prima di tutto il caso di un potenziale a gradino di altezza infinita, ovvero:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & x \geq 0 \end{cases} \quad (3.7)$$

Innanzitutto cerchiamo le autofunzioni per un potenziale di questo tipo, cominciando con l'osservare come siano di tipo sinusoidale nell'unica zona non banale, ovvero per  $x > 0$ . Infatti, come tutte le zone in cui il potenziale è piatto, possiamo scrivere le autofunzioni come  $Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ , ed imponendo l'annullamento dell'autofunzione nel punto  $x = 0$  otteniamo che:

$$\psi(x) = C \cdot \sin(kx) \quad (3.8)$$

dove

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.9)$$

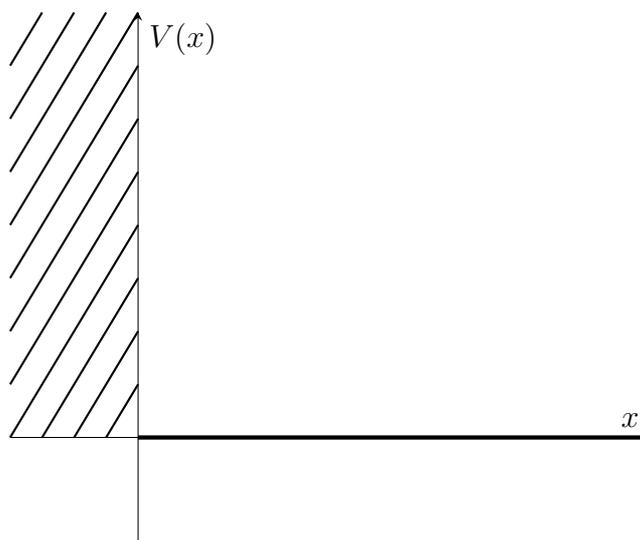


Figura 3.1: Il potenziale del gradino infinito, definito dall'equazione (3.7).

Procediamo dunque alla normalizzazione, imponendo che sia verificata la condizione  $\int_0^\infty dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x) = \delta(E_1 - E_2)$ :

$$\begin{aligned} \int_0^\infty dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x) &= C^2 \int_0^\infty dx \sin(k_1 x) \sin(k_2 x) \\ &= C^2 \pi \hbar \sqrt{\frac{E_1}{2m}} \delta(E_1 - E_2) \end{aligned} \quad (3.10)$$

dove per calcolare l'integrale si è fatto riferimento ai risultati esposti nella sezione B.1 dell'appendice B. Ne consegue che  $C = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 E}\right)^{1/4}$  e in definitiva l'autofunzione normalizzata sia:

$$\psi(x) = \left(\frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 E}\right)^{1/4} \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x\right) \quad (3.11)$$

Possiamo dunque calcolarci il propagatore inserendo la risoluzione dell'identità, valida nel caso di spettro continuo positivo:

$$\int_0^\infty dE |E\rangle \langle E| = \mathbf{1} \quad (3.12)$$

Il propagatore, utilizzando la formula (3.5), sarà:

$$\begin{aligned}
 K(x_1, x_2; t) &= \langle x_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | x_1 \rangle \\
 &= \int_0^\infty dE \langle x_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | E \rangle \langle E | x_1 \rangle \\
 &= \int_0^\infty dE e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \langle x_2 | E \rangle \langle E | x_1 \rangle \\
 &= \int_0^\infty dE e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \left( \frac{2m}{\pi^2 \hbar^2 E} \right)^{\frac{1}{2}} \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x_1 \right) \sin \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} x_2 \right)
 \end{aligned} \tag{3.13}$$

A questo punto è naturale effettuare il cambio di variabile  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , per cui  $dE = \frac{\hbar^2 k}{m} dk$ . Inoltre utilizziamo la formula di Eulero per riscrivere i seni:

$$\begin{aligned}
 K(x_1, x_2; t) &= \int_0^\infty dk \frac{\hbar^2 k}{m} e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} \frac{2m}{\pi \hbar^2 k} \frac{e^{ikx_1} - e^{-ikx_1}}{2i} \frac{e^{ikx_2} - e^{-ikx_2}}{2i} \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} [-e^{ikx_1} + e^{-ikx_1}] [e^{ikx_2} - e^{-ikx_2}] \\
 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} [-e^{i(x_1+x_2)k} + e^{-i(x_2-x_1)k} + e^{i(x_2-x_1)k} - e^{-i(x_1+x_2)k}] \\
 &= \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^\infty dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} [-e^{i(x_1+x_2)k} + e^{-i(x_2-x_1)k} + e^{i(x_2-x_1)k} - e^{-i(x_1+x_2)k}]
 \end{aligned} \tag{3.14}$$

A questo punto utilizziamo per tutti e quattro gli integrali la nota formula dell'integrale gaussiano: [18]

$$\int_{-\infty}^\infty dx e^{-\alpha x^2 + \beta x} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \tag{3.15}$$

Attraverso la quale otteniamo:

$$\begin{aligned}
 K(x_1, x_2; t) &= \frac{1}{4\pi} \sqrt{\frac{2m\pi}{i\hbar t}} \left[ -e^{-\frac{m(x_1+x_2)^2}{2i\hbar t}} + e^{-\frac{m(x_2-x_1)^2}{2i\hbar t}} + e^{-\frac{m(x_2-x_1)^2}{2i\hbar t}} - e^{-\frac{m(x_1+x_2)^2}{2i\hbar t}} \right] \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \left[ -e^{-\frac{m(x_1+x_2)^2}{2i\hbar t}} + e^{-\frac{m(x_2-x_1)^2}{2i\hbar t}} \right]
 \end{aligned} \tag{3.16}$$

Ovvero otteniamo per il propagatore nella sua forma “esatta” il risultato:

$$\boxed{K(x_1, x_2; t) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \left[ e^{-\frac{m(x_2-x_1)^2}{2i\hbar t}} - e^{-\frac{m(x_1+x_2)^2}{2i\hbar t}} \right]} \tag{3.17}$$

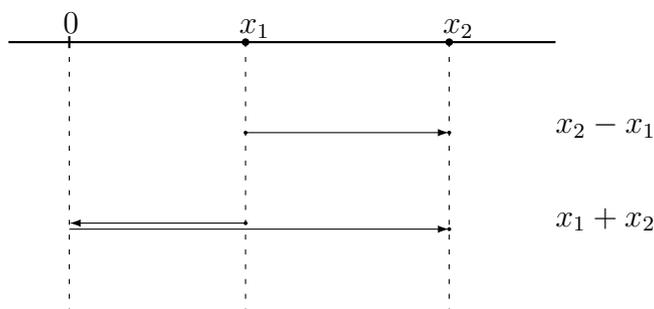


Figura 3.2: Schema per la comprensione della formula del propagatore del gradino finito di potenziale in approssimazione semiclassica (3.17). Si sottolinea la presenza di due possibili cammini di lunghezza  $l = x_2 - x_1$  e  $l = x_1 + x_2$  fra i punti  $x_1$  e  $x_2$ .

Lo stesso risultato è ottenibile in maniera differente, in approssimazione semiclassica, utilizzando la nota forma (C.8) del propagatore della particella libera, la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) e con l'ausilio dello schema in figura 3.2: consideriamo infatti i due casi separati in cui  $l = x_2 - x_1$  e  $l = x_1 + x_2$ , quest'ultimo con l'accortezza di un cambio di segno<sup>1</sup>.

$$K(x_1, x_2; t) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{im(x_2-x_1)^2}{2\hbar t}} - \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} e^{\frac{im(x_1+x_2)^2}{2\hbar t}} \quad (3.18)$$

Che ovviamente coincide con la formula (3.17) appena ottenuta.

## 3.2 Propagatore buca infinita di potenziale

Torniamo, come nella sezione 2.1, a considerare una buca di potenziale di larghezza  $2a$  del tipo definito dall'equazione (2.1). Adesso però trasliamo la buca di potenziale verso destra di  $a$  al fine di poter utilizzare come autofunzioni solo quelle pari e non, come si sarebbe dovuto fare nel caso dell'equazione (2.1), sia pari che dispari. Inoltre ipotizziamo che  $V_0$  assuma un valore grande rispetto all'energia, in modo tale da poter utilizzare l'approssimazione semiclassica, e per semplicità consideriamo direttamente il limite  $V_0 \rightarrow \infty$ .

<sup>1</sup>Il cambio di segno in questione è di particolare rilevanza, non solo per la quantità di volte che ci si imbatte in questa necessità nel seguito della tesi. Tale fattore  $(-1)$  da aggiungere nei casi in cui la traiettoria classica prevede un "rimbalzo" elastico è messo in evidenza dagli articoli che presentano il metodo delle immagini per il calcolo semiclassico dei propagatori quantistici, per esempio [17], e può trovare una semplice spiegazione sia nell'analogia con il metodo delle cariche immagini in elettrostatica oppure, ancor meglio, con la seguente osservazione: nel punto di "rimbalzo", in questo caso  $x = 0$ , vogliamo imporre che la funzione di Green si annulli, annullando in tal modo la probabilità di trovare una particella nel punto in questione; ma l'unico modo per ottenere questa proprietà è proprio quella inserire un fattore  $(-1)$  nel secondo termine che compare nel propagatore.

Il potenziale, nelle ipotesi sopra esposte, sarà nella forma:

$$V(x) = \begin{cases} \infty & \text{se } x < 0 \vee x > 2a \\ 0 & \text{se } x \geq 0 \geq 2a \end{cases} \quad (3.19)$$

Il grafico del potenziale è mostrato in figura 3.3.

Il vantaggio dell'aver compiuto questa traslazione è che possiamo considerare le stesse autofunzioni già trovate in (2.5), ovvero somma di seni e coseni, ma ora dovendo imporre la condizione al contorno  $\psi(0) = 0$ , in pratica selezioniamo solo le soluzioni dispari, cioè i seni. Allora conosciamo già le autofunzioni, non nulle solo nella regione  $0 < x < 2a$ :

$$\psi_l(x) \propto \sin(k_l x) = \sin\left(\frac{\sqrt{2mE_l}}{\hbar} x\right) \quad (3.20)$$

Ricordando inoltre che lo spettro energetico della buca infinita di potenziale cioè il valore di  $E_l$  è in effetti già stato calcolato implementando il limite  $\omega \rightarrow \infty$  (2.32):  $E_l = \frac{l^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2}$ , possiamo scrivere, sottintendendo che  $l \in \mathbb{N}$ :

$$\psi_l(x) \propto \sin\left(\frac{l\pi}{2a} x\right) \quad (3.21)$$

Questa autofunzione va ovviamente normalizzata, svolgendo il seguente integrale:

$$\begin{aligned} \int_0^{2a} dx \sin^2\left(\frac{l\pi}{2a} x\right) &= \frac{1}{2} \int_0^{2a} dx \left[1 - \cos\left(\frac{l\pi}{a} x\right)\right] \\ &= \frac{2a}{2} - \frac{a}{2l\pi} \int_0^{2l\pi} dt \cos t \\ &= a - \frac{a}{2l\pi} \sin(2l\pi) \\ &= a \end{aligned} \quad (3.22)$$

Di conseguenza l'autofunzione normalizzata sarà:

$$\boxed{\psi_l(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \sin\left(\frac{l\pi}{2a} x\right)} \quad (3.23)$$

### 3.2.1 Forma “esatta” del propagatore

Da una parte il propagatore della buca di potenziale è noto, almeno formalmente, grazie all'inserimento della risoluzione dell'identità  $\mathbf{1} = \sum_{l=0}^{\infty} |E_l\rangle \langle E_l|$  e al fatto che le

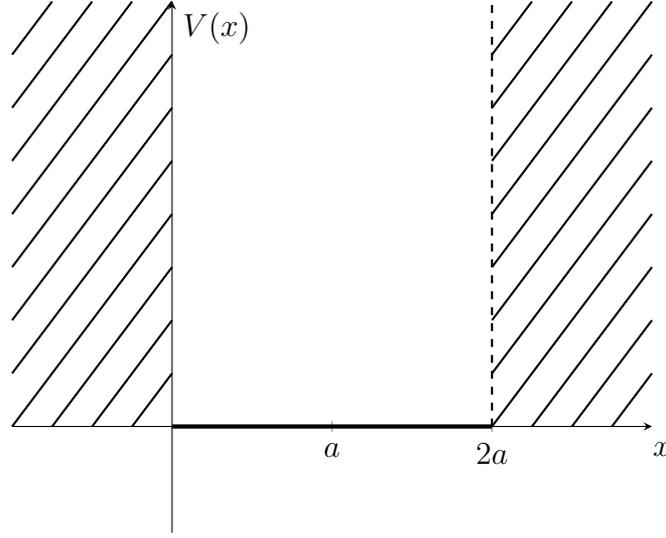


Figura 3.3: La buca infinita di potenziale, definita dall'equazione (3.19).

autofunzioni normalizzate nel caso della buca di potenziale siano state appena calcolate nella forma (3.23) (semplifichiamo la notazione definendo  $t = t_2 - t_1$ )

$$\begin{aligned}
 K(x_1, t_1; x_2, t_2) &= \langle x_2 | e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | x_1 \rangle \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_l t \right\} \langle x_2 | E_l \rangle \langle E_l | x_1 \rangle \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \exp \left\{ -i \frac{l^2 \pi^2 \hbar}{8ma^2} t \right\} \frac{\sin \left( \frac{l\pi x_2}{2a} \right)}{\sqrt{a}} \frac{\sin \left( \frac{l\pi x_1}{2a} \right)}{\sqrt{a}} \\
 &= \sum_{l=0}^{\infty} \exp \left\{ -i \frac{l^2 \pi^2 \hbar}{8ma^2} t \right\} \frac{e^{i \frac{l\pi x_2}{2a}} - e^{-i \frac{l\pi x_2}{2a}}}{2i\sqrt{a}} \cdot \frac{e^{i \frac{l\pi x_1}{2a}} - e^{-i \frac{l\pi x_1}{2a}}}{2i\sqrt{a}} \\
 &= \frac{1}{4a} \sum_{l=1}^{\infty} e^{-i \frac{l^2 \pi^2 \hbar}{8ma^2} t} \left( -e^{i \frac{l\pi(x_1+x_2)}{2a}} + e^{i \frac{l\pi(x_1-x_2)}{2a}} + e^{i \frac{l\pi(x_2-x_1)}{2a}} - e^{-i \frac{l\pi(x_1+x_2)}{2a}} \right)
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

Si potrebbe inizialmente pensare di proseguire la computazione per mezzo della formula di Euler - Mac Laurin o di Abel - Plana [19], ma questa strada, che è stata inizialmente intrapresa, non si è rivelata conclusiva. Pertanto si è ricercata una via alternativa per performare il calcolo, e un'occasione di risoluzione è data dalla formula (A.10) per la funzione speciale  $\theta_3$  (vedi appendice A.2), per sfruttare la quale dobbiamo utilizzare il

propagatore in una forma intermedia della (3.24):

$$K(x_1, x_2; t) = \frac{1}{2a} \sum_{l=1}^{\infty} \exp \left\{ -i \frac{l^2 \pi^2 \hbar}{8ma^2} t \right\} \left[ \cos \left( \frac{l\pi}{2a} (x_2 - x_1) \right) - \cos \left( \frac{l\pi}{2a} (x_1 + x_2) \right) \right] \quad (3.25)$$

Con una intuitiva identificazione degli argomenti nella (A.10), ovvero ponendo  $q = \exp \left\{ -i \frac{\pi^2 \hbar t}{8ma^2} \right\}$  cioè  $\tau = \frac{-\pi \hbar t}{8ma^2}$ ,  $z_- = \frac{\pi}{4a} (x_2 - x_1)$  e  $z_+ = \frac{\pi}{4a} (x_1 + x_2)$  otteniamo una forma esatta per il propagatore dipendente dalla funzione speciale  $\theta_3$ :

$$\begin{aligned} K(x_1, x_2; t) &= \frac{1}{2a} \left[ \frac{1}{2} \theta_3(z_-, \tau) - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \theta_3(z_+, \tau) + \frac{1}{2} \right] \\ &= \frac{1}{4a} [\theta_3(z_-, \tau) - \theta_3(z_+, \tau)] \end{aligned} \quad (3.26)$$

o più esplicitamente: [15]

$$K(x_1, x_2; t_2, t_1) = \frac{1}{4a} \left[ \theta_3 \left( \frac{\pi}{4a} (x_2 - x_1), \frac{-\pi \hbar t}{8ma^2} \right) - \theta_3 \left( \frac{\pi}{4a} (x_1 + x_2), \frac{-\pi \hbar t}{8ma^2} \right) \right] \quad (3.27)$$

### 3.2.2 Forma “semiclassica” del propagatore

Vogliamo confrontare la formula (3.27) appena ottenuta con quella che otterremo utilizzando la formula semiclassica di Pauli - van Vleck - Morette (3.6), per cui sarà necessario esplicitare l’azione classica. Questo problema è di semplice risoluzione se si osserva che l’azione della buca di potenziale è in effetti l’azione della particella libera (C.6) analizzata nell’appendice C, una volta che si sia tenuto conto delle possibili variazioni della lunghezza  $l$  percorsa nel tempo  $t = t_2 - t_1$ . Con un po’ di attenzione (si veda la figura 3.4) si verifica che le possibili lunghezze  $l$  delle traiettorie classiche possono essere raggruppate in quattro classi:

- $l = 4na + (x_2 - x_1)$ , dove  $n = 0, 1, 2, \dots$  (indicata con  $A = 1$ )
- $l = 4n'a - (x_1 + x_2)$ , dove  $n' = 1, 2, 3, \dots$  (indicata con  $A = 2$ )
- $l = 4na + (x_1 + x_2)$ , dove  $n = 0, 1, 2, \dots$  (indicata con  $A = 3$ )
- $l = 4n'a - (x_2 - x_1)$ , dove  $n' = 1, 2, 3, \dots$  (indicata con  $A = 4$ )

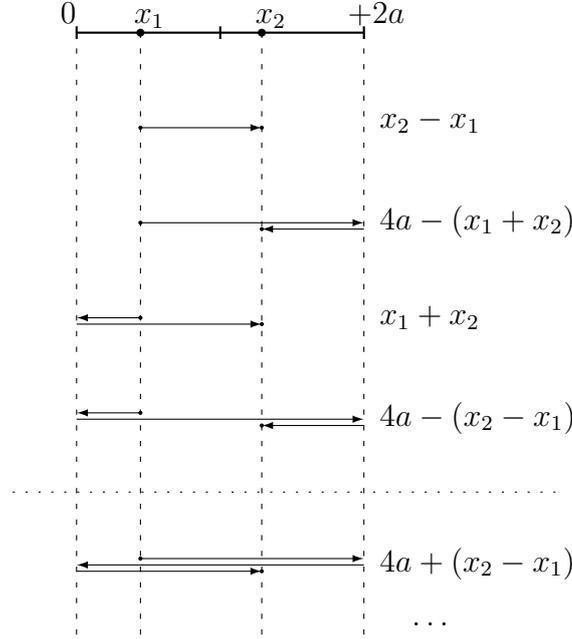


Figura 3.4: Schema per la compressione delle lunghezze  $l$ . Il quinto e ultimo percorso, disegnato sotto la linea orizzontale tratteggiata, è esprimibile come un percorso del tipo  $x_2 - x_1$  con l'aggiunta di un  $4a$ .

Osserviamo subito come i percorsi indicizzati con  $A = 1, 4$  dipendano dalla combinazione  $x_1 + x_2$  mentre quelli indicizzati da  $A = 2, 3$  dipendono da  $x_2 - x_1$ .

L'azione classica è un funzionale dipendente dalla traiettoria classica, per cui si avrà una dipendenza dell'azione dalla classe di appartenenza (fra le quattro sopra elencate) nonché dall'indice intero  $n$  oppure  $n'$ . Indichiamo con  $A = 1, 2, 3, 4$  la classe di appartenenza mentre  $n = 0, 1, 2, 3, \dots$  oppure  $n' = 1, 2, 3, \dots$  (a seconda della classe), per cui possiamo scrivere l'azione classica  $S_d^{(A)}(n)$  come:

$$S_d^{(1)}(n) = \frac{m}{2t} [16n^2 a^2 + (x_2 - x_1)^2 + 8na(x_2 - x_1)] \quad (3.28)$$

$$S_d^{(2)}(n') = \frac{m}{2t} [16n'^2 a^2 + (x_1 + x_2)^2 - 8n'a(x_1 + x_2)] \quad (3.29)$$

$$S_d^{(3)}(n) = \frac{m}{2t} [16n^2 a^2 + (x_1 + x_2)^2 + 8na(x_1 + x_2)] \quad (3.30)$$

$$S_d^{(4)}(n') = \frac{m}{2t} [16n'^2 a^2 + (x_2 - x_1)^2 - 8n'a(x_2 - x_1)] \quad (3.31)$$

Il calcolo dei determinanti di van Vleck, ovvero il termine con la derivata seconda che compare in (3.6), è piuttosto semplice e risulta essere indipendente sia da  $n$  che da  $A$ , essendo in ogni caso pari a  $\sqrt{\frac{m}{t}}$  (Sottolineiamo qui la crucialità della presenza del valore assoluto nella formula (3.6)). Di conseguenza è facile scrivere i propagatori nell'approssimazione semiclassica (anch'essi dipendenti dalla traiettoria) utilizzando la formula (3.6) con l'accortezza di cambiar segno ai propagatori in cui la traiettoria classica compie un numero dispari di "rimbalzi" (cioè i casi in cui compare  $x_1 + x_2$ , ovvero quelli indicati con  $A = 2, 3$ ), in analogia al caso della parete infinita analizzato nel paragrafo precedente, vedi nota a piè della pagina 31:

$$\begin{aligned}
 K_{sc}^{(1)}(n) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} [16n^2 a^2 + (x_2 - x_1)^2 + 8na(x_2 - x_1)] \right\} \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ i \frac{8ma^2}{\hbar t} n^2 + i \frac{4ma(x_2 - x_1)}{\hbar t} n + i \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.32}$$

$$\begin{aligned}
 K_{sc}^{(2)}(n') &= -\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} [16a^2 n'^2 + (x_1 + x_2)^2 - 8n'a(x_1 + x_2)] \right\} \\
 &= -\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ i \frac{8ma^2}{\hbar t} n'^2 - i \frac{4ma(x_1 + x_2)}{\hbar t} n' + i \frac{m(x_1 + x_2)^2}{2\hbar t} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
 K_{sc}^{(3)}(n) &= -\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} [16n^2 a^2 + (x_1 + x_2)^2 + 8na(x_1 + x_2)] \right\} \\
 &= -\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ i \frac{8ma^2}{\hbar t} n^2 + i \frac{4ma(x_1 + x_2)}{\hbar t} n + i \frac{m(x_1 + x_2)^2}{2\hbar t} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
 K_{sc}^{(4)}(n') &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} [16a^2 n'^2 + (x_2 - x_1)^2 - 8n'a(x_2 - x_1)] \right\} \\
 &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ i \frac{8ma^2}{\hbar t} n'^2 - i \frac{4ma(x_2 - x_1)}{\hbar t} n' + i \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t} \right\}
 \end{aligned} \tag{3.35}$$

In definitiva il propagatore nell'approssimazione semiclassica sarà:

$$K_{sc} = \sum_{n=0}^{\infty} [K_{sc}^{(1)}(n) + K_{sc}^{(3)}(n)] + \sum_{n'=1}^{\infty} [K_{sc}^{(2)}(n') + K_{sc}^{(4)}(n')] \tag{3.36}$$

Dobbiamo confrontare questa espressione semiclassica con quella esatta del propagatore ottenuta in (3.27), e per farlo risulta comodo analizzare separatamente la parte di propagatore dipendente da  $x_2 - x_1$  e da  $x_1 + x_2$ .

Partiamo dall'analisi della parte del propagatore "semiclassico" dipendente da  $x_2 - x_1$ , ovvero  $\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n')$ :

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t}\right\} \\ &\cdot \left[ \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left\{i\frac{8ma^2}{\hbar t}n^2 + i\frac{4ma(x_2 - x_1)}{\hbar t}n\right\} + \sum_{n'=1}^{\infty} \exp\left\{i\frac{8ma^2}{\hbar t}n'^2 + i\frac{4ma(x_1 - x_2)}{\hbar t}n'\right\} \right] \end{aligned} \quad (3.37)$$

Ovvero:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t}\right\} \\ &\cdot \left[ 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{i\frac{8ma^2}{\hbar t}n^2\right\} \left( \exp\left\{i\frac{4ma(x_2 - x_1)}{\hbar t}n\right\} + \exp\left\{-i\frac{4ma(x_2 - x_1)}{\hbar t}n\right\} \right) \right] \end{aligned} \quad (3.38)$$

Utilizzando la formula di Eulero per il coseno:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t}\right\} \\ &\cdot \left[ 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{i\frac{8ma^2}{\hbar t}n^2\right\} \cos\left(\frac{4ma}{\hbar t}(x_2 - x_1)n\right) \right] \end{aligned} \quad (3.39)$$

Infine, utilizzando la definizione (A.10) della funzione  $\theta_3$  otteniamo per la parte del propagatore dipendente da  $x_2 - x_1$ :

$$\boxed{\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') &= \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t}\right\} \\ &\cdot \theta_3\left(\frac{2ma}{\hbar t}(x_2 - x_1), \frac{8ma^2}{\pi\hbar t}\right) \end{aligned}} \quad (3.40)$$

Dimostriamo ora, grazie all'utilizzo di una proprietà peculiare della funzione  $\theta_3$  di Jacobi nota come formula di Poisson (A.13), che quanto appena ottenuto è effettivamente

identico alla parte dipendente da  $x_2 - x_1$  della forma “esatta” del propagatore (3.27):

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t}\right\} \cdot \theta_3\left(\frac{-\pi(x_2 - x_1)}{4a}, -\frac{1}{\frac{-\pi\hbar t}{8ma^2}}\right) \quad (3.41)$$

Per comodità riscriviamo adesso la forma inversa della formula di Poisson (A.13):

$$\theta_3\left(\frac{z}{\tau}, -\frac{1}{\tau}\right) = \sqrt{-i\tau} e^{\frac{iz^2}{\pi\tau}} \theta_3(z, \tau) \quad (3.42)$$

E applichiamo all’ultima espressione per  $\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n')$ , ottenendo:

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \cdot \sqrt{\frac{i\pi\hbar t}{8ma^2}} \cdot \exp\left\{i\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2\hbar t}\right\} \cdot \exp\left\{\frac{m(x_2 - x_1)^2}{2i\hbar t}\right\} \cdot \theta_3\left(-\frac{\pi}{4a}(x_2 - x_1), \frac{-\pi\hbar t}{8ma^2}\right) \quad (3.43)$$

Ovvero (sfruttando anche la parità della funzione  $\theta_3$ , cfr. sezione A.2 in appendice A):

$$\boxed{\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(1)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(4)}(n') = \frac{1}{4a} \theta_3\left(\frac{\pi}{4a}(x_2 - x_1), \frac{-\pi\hbar t}{8ma^2}\right)} \quad (3.44)$$

coincidente con il primo termine della (3.27).

Passiamo adesso all’analisi della parte del propagatore “semiclassico” dipendente da  $x_1 + x_2$ , ovvero  $\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(3)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(2)}(n')$ , calcolabile in maniera assolutamente analoga al caso precedente:

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(3)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(2)}(n') = -\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_1 + x_2)^2}{2\hbar t}\right\} \cdot \left[1 + \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{i\frac{8ma^2}{\hbar t}n^2\right\} \left(\exp\left\{-i\frac{4ma(x_1 + x_2)}{\hbar t}n\right\} + \exp\left\{i\frac{4ma(x_1 + x_2)}{\hbar t}n\right\}\right)\right] \quad (3.45)$$

con la formula di Eulero per il coseno:

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(3)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(2)}(n') = -\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_1+x_2)^2}{2\hbar t}\right\} \cdot \left[1 + 2\sum_{n=1}^{\infty} \exp\left\{i\frac{8ma^2}{\hbar t}n^2\right\} \cos\left(\frac{4ma(x_1+x_2)}{\hbar t}n\right)\right] \quad (3.46)$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(3)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(2)}(n') = -\sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left\{i\frac{m(x_1+x_2)^2}{2\hbar t}\right\} \cdot \theta_3\left(\frac{2ma}{\hbar t}(x_1+x_2), \frac{8ma^2}{\pi\hbar t}\right) \quad (3.47)$$

Con un procedimento del tutto analogo al caso precedente, utilizzando la formula (A.13) di Poisson, troviamo:

$$\sum_{n=0}^{\infty} K_{sc}^{(3)}(n) + \sum_{n'=1}^{\infty} K_{sc}^{(2)}(n') = -\frac{1}{4a} \theta_3\left(\frac{\pi}{4a}(x_1+x_2), \frac{-\pi\hbar t}{8ma^2}\right) \quad (3.48)$$

Il confronto fra la somma della (3.44) e (3.48) con la forma “esatta” (3.27) del propagatore evidenzia una completa coincidenza fra le due formule.

### 3.3 Parete elastica

Analizziamo il potenziale con una singola parete elastica, illustrato in figura 3.5:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2 x^2}{2} & x < 0 \\ 0 & x \geq 0 \end{cases} \quad (3.49)$$

con l'intento di calcolare il propagatore fra due punti  $x_1$  e  $x_2$  entrambi positivi. Dividiamo l'asse  $x$  in due regioni, l'asse negativo e quello positivo: regione ① per  $x < 0$  e regione ② per  $x > 0$ .

Lo spettro energetico sarà in questo caso continuo per ogni valore di  $E > 0$ , non essendo la traiettoria classica limitata in una regione compatta dell'asse  $x$ . [8]

Al fine di individuare l'autofunzione nella regione ① possiamo seguire un ragionamento del tutto analogo a quello svolto nel capitolo 1 al fine di giungere alla funzione

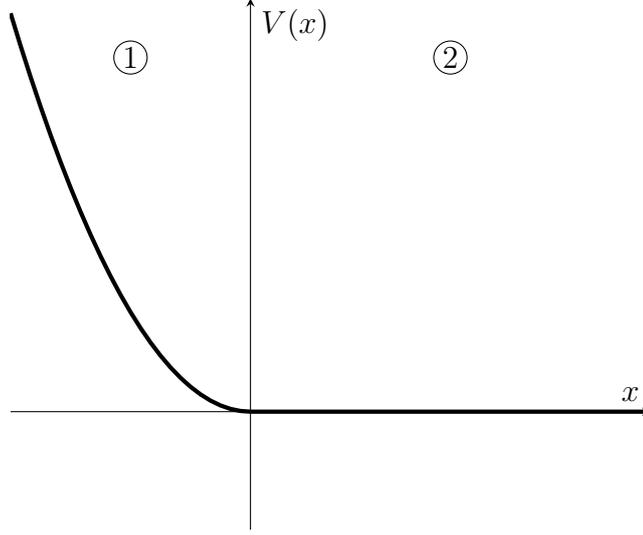


Figura 3.5: Il potenziale con singola parete elastica definito dall'equazione (3.49).

d'onda (1.24). Assumendo che  $\zeta = \frac{m\omega}{\hbar}x^2$ ,  $\tilde{\psi}_E^{(1)}(\zeta) = e^{\zeta/2}\psi_E^{(1)}(\zeta)$ ,  $\lambda_E = \frac{2E}{\hbar\omega} - 1$  possiamo scrivere l'equazione differenziale di Kummer:

$$\zeta \frac{d^2}{d\zeta^2} \tilde{\psi}_E^{(1)}(\zeta) + \left(\frac{1}{2} - \zeta\right) \frac{d}{d\zeta} \tilde{\psi}_E^{(1)}(\zeta) + \frac{\lambda_E}{4} \tilde{\psi}_E^{(1)}(\zeta) = 0 \quad (3.50)$$

Abbiamo già visto nel capitolo 1 come sia possibile, passando attraverso la risoluzione di un'equazione differenziale di Kummer e l'utilizzo di funzioni ipergeometriche, scrivere la soluzione come:

$$\begin{aligned} \psi_E^{(1)}(x) &\propto e^{-\frac{m\omega}{2\hbar}x^2} \cdot \left[ {}_1F_1\left(-\frac{\lambda}{4}, \frac{1}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) + \frac{\Gamma\left(\frac{2-\lambda}{4}\right)}{\Gamma\left(-\frac{\lambda}{4}\right)} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x {}_1F_1\left(\frac{2-\lambda}{4}, \frac{3}{2}, \frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \right] \end{aligned} \quad (3.51)$$

Tuttavia in questo modo non appare semplice calcolare la normalizzazione della funzione d'onda, necessaria per il calcolo del propagatore in forma esatta. Utilizziamo quindi il fatto che l'equazione di Kummer sia riconducibile a quella di Whittaker (cfr. sezione A.3) e che sia possibile esprimere la soluzione generale dell'equazione di Kummer attraverso le funzioni  $M_{\lambda,\mu}(z)$  e  $W_{\lambda,\mu}(z)$ . Riportiamo qui per semplicità il risultato (A.23), applicato all'equazione di Kummer  $\zeta \frac{d^2}{d\zeta^2} \tilde{\psi}(\zeta) + (\gamma - \zeta) \frac{d}{d\zeta} \tilde{\psi}(\zeta) - \alpha \tilde{\psi}(\zeta) = 0$  in analisi:

$$\tilde{\psi}_E^{(1)}(\zeta) = A \cdot e^{\zeta/2} \zeta^{-\gamma/2} M_{\frac{\gamma}{2}-\alpha, \frac{\gamma-1}{2}}(\zeta) + B \cdot e^{\zeta/2} \zeta^{-\gamma/2} W_{\frac{\gamma}{2}-\alpha, \frac{\gamma-1}{2}}(\zeta)$$

Esplicitando ulteriormente:

$$\psi_E^{(1)}(x) = A \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)^{-\frac{1}{4}} M_{\frac{1-\lambda}{4}, \frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) + B \cdot \left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right)^{-\frac{1}{4}} W_{\frac{1-\lambda}{4}, \frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar}x^2\right) \quad (3.52)$$

Possiamo determinare i coefficienti  $A$  e  $B$ , semplificando notevolmente la formula precedente, imponendo l'integrabilità sull'asse reale della funzione d'onda e di conseguenza l'annullarsi della funzione d'onda stessa nel limite  $x \rightarrow -\infty$ . Osserviamo poi che la funzione d'onda  $\psi_E^{(1)}(x)$  è formalmente pari, per cui possiamo considerare per praticità il limite  $x \rightarrow +\infty$ , imponendo:

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} \psi_E^{(1)}(x) = 0 \quad (3.53)$$

Osserviamo, partendo dagli andamenti (A.25) e (A.24), che solo la funzione  $W_{\frac{1-\lambda}{4}, \frac{1}{4}}$  è compatibile con il limite sopra indicato, per cui necessariamente avremo:

$$\psi_E^{(1)}(x) \propto \left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right)^{-\frac{1}{4}} W_{\frac{1-\lambda}{4}, \frac{1}{4}}\left(\frac{m\omega}{\hbar} x^2\right) \quad (3.54)$$

La struttura di questa funzione è interessante, poiché compatibile con la definizione della funzione parabolica del cilindro (A.30):

$$D_p(z) \propto W_{\alpha(p), \frac{1}{4}}\left(\frac{z^2}{2}\right) \quad (3.55)$$

Ci si attende quindi che sia possibile esprimere la funzione d'onda tramite una funzione parabolica del cilindro con argomento  $\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}x$ . Ma poiché la funzione parabolica del cilindro è soluzione dell'equazione differenziale di Weber, tutto ciò suggerisce che sussista, in questo caso, un'equivalenza fra questa particolare equazione di Kummer (e quindi quella di Whittaker, cfr. A.3) e l'equazione differenziale di Weber (A.38).

Ripartiamo quindi dal principio e vediamo se vi è un modo di trovare un'equazione di Weber partendo dall'equazione di Schrödinger relativa alla regione ① delle  $x$  negative:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} x^2\right) \psi_E^{(1)}(x) = E \psi_E^{(1)}(x) \quad (3.56)$$

Il riscaldamento della variabile reale  $x$  che segue è dettato essenzialmente dal confronto fra la formula sopra ottenuta (3.54) con la definizione della funzione parabolica del cilindro (A.30):

$$y = \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{2m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{dy^2} \quad (3.57)$$

Per cui:

$$\left(-\hbar\omega \frac{d^2}{dy^2} + \frac{\hbar\omega}{4} y^2\right) \psi_E^{(1)}(y) = E \psi_E^{(1)}(y) \quad (3.58)$$

Cioè:

$$\frac{d^2}{dy^2} \psi_E^{(1)}(y) + \left( \frac{E}{\hbar\omega} - \frac{y^2}{4} \right) \psi_E^{(1)}(y) = 0 \quad (3.59)$$

Che è esattamente un'equazione di Weber (A.38) che qui riportiamo nella sua forma generale:

$$\frac{d^2}{dy^2} \psi(y) + \left( p + \frac{1}{2} - \frac{y^2}{4} \right) \psi(y) = 0 \quad (3.60)$$

Allora, tenendo presente che la soluzione dell'equazione di Weber è una funzione parabolica del cilindro (A.30), possiamo concludere che (si noti come si scelga di inserire il segno meno nell'argomento della  $D_p$ , scelta resa possibile dalle proprietà delle soluzioni dell'equazione di Weber, cfr. sezione A.4):

$$\boxed{\psi_E^{(1)}(x) = C \cdot D_{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right)} \quad (3.61)$$

Nella regione ② l'autofunzione sarà più semplicemente:

$$\boxed{\psi_E^{(2)}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)} \quad \text{dove } k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.62)$$

Al fine di determinare le tre costanti  $A$ ,  $B$  e  $C$  imponiamo la continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima nel punto  $x = 0$  ed in seguito la normalizzazione ad 1 dell'integrale del modulo quadro della funzione d'onda fra  $-\infty$  e  $+\infty$ .

Utilizzando il limite della  $D_p(z)$  per  $z = 0$  (A.32) otteniamo che:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \psi_E^{(1)}(x) = C \cdot \frac{\sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{4}}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \quad (3.63)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \psi_E^{(2)}(x) = B \quad (3.64)$$

Il calcolo dei limiti delle derivate comporta, utilizzando (A.37) e (A.32), invece che:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \frac{d}{dx} \psi_E^{(1)}(x) = +C \cdot \frac{\sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}}}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \quad (3.65)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{d}{dx} \psi_E^{(2)}(x) = A \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (3.66)$$

Ciò significa che possiamo eliminare la dipendenza dalle due costanti  $A$  e  $B$ , scrivendo le relazioni:

$$B = C \frac{\sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{4}}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \quad A = C \frac{\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{1}{4}}}{k \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \quad (3.67)$$

Ovvero:

$$\psi_E(x) = \theta(-x) \left[ C \cdot D_{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right) \right] + \theta(x) \sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega}} C \left[ \frac{2^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}}{k \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \sin(kx) + \frac{2^{-1/4}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \cos(kx) \right] \quad (3.68)$$

Rimane quindi il solo coefficiente numerico  $C$  da determinare, imponendo la condizione di ortonormalità:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) = \delta(E_1 - E_2) \quad (3.69)$$

Per calcolare questo integrale, dividiamo il cammino di integrazione in semiasse positivo e semiasse negativo, ed analizziamo i due contributi separatamente:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) &= C^2 \int_{-\infty}^0 dx D_{\frac{E_1}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right) D_{\frac{E_2}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right) \\ &= C^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \int_0^{+\infty} dy D_{\frac{E_1}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}}(y) D_{\frac{E_2}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}}(y) \end{aligned} \quad (3.70)$$

Al fine di calcolare questo integrale, utilizziamo la seguente formula, compendio delle formule (A.35) e (A.36):

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} dx D_{\mu}(x) D_{\nu}(x) &= \sqrt{\pi} 2^{-3/2} \frac{\psi\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}\mu\right) - \psi\left(-\frac{1}{2}\mu\right)}{\Gamma(-\mu)} \delta(\mu - \nu) + \\ &+ \frac{\pi 2^{\frac{1}{2}(\mu+\nu+1)}}{\mu - \nu} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1-\mu}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{\mu}{2}\right)} \right] \end{aligned} \quad (3.71)$$

Otteniamo quindi:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) &= C^2 \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \cdot \left\{ \sqrt{\pi} 2^{-3/2} \frac{\psi\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) - \psi\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E_1}{\hbar\omega}\right)} \hbar\omega \delta(E_1 - E_2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\pi 2^{\frac{1}{2}\left(\frac{E_1}{\hbar\omega} + \frac{E_2}{\hbar\omega}\right)}}{\frac{E_1 - E_2}{\hbar\omega}} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \right] \right\} \quad (3.72)
 \end{aligned}$$

Che possiamo riscrivere come:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) &= C^2 \hbar^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi\omega}{m}} \frac{\psi\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) - \psi\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E_1}{\hbar\omega}\right)} \delta(E_1 - E_2) + \\
 &\quad + C^2 \hbar^{3/2} \pi \sqrt{\frac{\omega}{m}} \frac{2^{\frac{E_1 + E_2}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}}}{E_1 - E_2} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \right] \quad (3.73)
 \end{aligned}$$

Andiamo ora ad analizzare l'integrale (3.69) nella regione  $x > 0$ ,

$$\begin{aligned}
 \int_0^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) &= \\
 &= C^2 \pi 2^{\frac{E_1 + E_2}{2\hbar\omega}} \int_0^{\infty} dx \left[ \frac{2^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}}{k_1 \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \sin(k_1 x) + \frac{2^{-1/4}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \cos(k_1 x) \right] \cdot \\
 &\quad \cdot \left[ \frac{2^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}}{k_2 \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} \sin(k_2 x) + \frac{2^{-1/4}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} \cos(k_2 x) \right] \quad (3.74)
 \end{aligned}$$

il quale può esser calcolato facendo uso delle formule (B.7), (B.13), (B.14), giungendo a:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) &= \\
 &= C^2 \pi 2^{\frac{E_1 + E_2}{2\hbar\omega}} \left\{ \frac{2^{3/2} \frac{m\omega}{\hbar}}{k_1^2 \left[\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)\right]^2} + \frac{2^{-1/2}}{\left[\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)\right]^2} \right\} \frac{\pi \hbar^2 k_1}{2m} \delta(E_1 - E_2) + \\
 &\quad + C^2 \pi 2^{\frac{E_1 + E_2}{2\hbar\omega}} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} \frac{k_2}{k_2^2 - k_1^2} + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \frac{k_1}{k_1^2 - k_2^2} \right] \quad (3.75)
 \end{aligned}$$

Ovvero, scritto in maniera più compatta:

$$\begin{aligned}
 & \int_0^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) = \\
 & = C^2 \frac{\pi^2 \hbar^2 k_1}{m} 2^{\frac{E_1}{\hbar\omega} - 1} \left\{ \frac{2^{3/2} m \omega}{\hbar k_1^2 \left[ \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \right]^2} + \frac{2^{-1/2}}{\left[ \Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \right]^2} \right\} \delta(E_1 - E_2) + \\
 & + C^2 \pi \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} 2^{\frac{E_1+E_2}{2\hbar\omega} + \frac{1}{2}} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \right] \frac{1}{k_2^2 - k_1^2}
 \end{aligned} \tag{3.76}$$

Osserviamo, nelle formule (3.73) e (3.76) appena ottenute, che compaiono dei termini non proporzionali alla  $\delta(E_1 - E_2)$  inattesi, poiché appaiono in contrasto con la natura hermitiana dell'operatore energetico che implica l'ortonormalità delle autofunzioni. Vediamo quindi come effettivamente questi due termini non proporzionali alla  $\delta$  si elidano a vicenda, utilizzando la relazione  $k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ :

$$\begin{aligned}
 & C^2 \hbar^{3/2} \pi \sqrt{\frac{\omega}{m}} \frac{2^{\frac{E_1+E_2}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}}}{E_1 - E_2} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \right] + \\
 & + C^2 \pi \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{2^{\frac{E_1+E_2}{2\hbar\omega} + \frac{1}{2}}}{k_2^2 - k_1^2} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \right] = \\
 & = C^2 \pi 2^{\frac{E_1+E_2}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_2}{2\hbar\omega}\right) \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)} \right] \cdot \\
 & \quad \cdot \left[ \hbar^{3/2} \sqrt{\frac{\omega}{m}} \frac{1}{E_1 - E_2} + \frac{\hbar^2}{m} \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{1}{E_2 - E_1} \right] = \\
 & = 0
 \end{aligned} \tag{3.77}$$

Siamo quindi in grado di esplicitare la forma definitiva dell'integrale delle due autofunzioni (3.69), prendendo nuovamente in considerazione i risultati (3.73) e (3.76):

$$\begin{aligned}
 & \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x) \psi_{E_2}(x) = \\
 & = C^2 \hbar^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi\omega}{m}} \frac{\psi\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) - \psi\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E_1}{\hbar\omega}\right)} \delta(E_1 - E_2) + \\
 & + C^2 \frac{\pi^2 \hbar^2 k_1}{m} 2^{\frac{E_1}{\hbar\omega} - 1} \left\{ \frac{2^{3/2} m \omega}{\hbar k_1^2 \left[ \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \right]^2} + \frac{2^{-1/2}}{\left[ \Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) \right]^2} \right\} \delta(E_1 - E_2)
 \end{aligned} \tag{3.78}$$

La normalizzazione comporta che:

$$C_1 = \left[ \hbar^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi\omega}{m}} \frac{\psi\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right) - \psi\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E_1}{\hbar\omega}\right)} + \frac{\pi^2 \hbar^2 k_1}{m} 2^{\frac{E_1}{\hbar\omega} - 1} \left( \frac{2^{3/2} m \omega}{\hbar k_1^2 [\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)]^2} + \frac{2^{-1/2}}{[\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E_1}{2\hbar\omega}\right)]^2} \right) \right]^{-1/2} \quad (3.79)$$

Abbiamo quindi ottenuto l'autofunzione normalizzata relativa al potenziale (3.49) di una singola parete elastica:

$$\psi_E(x) = \left[ \hbar^{3/2} \frac{1}{4} \sqrt{\frac{\pi\omega}{m}} \frac{\psi\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right) - \psi\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\hbar\omega}\right)} + \frac{\pi^2 \hbar^2 k}{m} 2^{\frac{E}{\hbar\omega} - 1} \left( \frac{2^{3/2} m \omega}{\hbar k^2 [\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)]^2} + \frac{2^{-1/2}}{[\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)]^2} \right) \right]^{-1/2} \cdot \left\{ \theta(-x) D_{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right) + \theta(x) \sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega}} \left[ \frac{2^{1/4} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}}}{k \Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \sin(kx) + \frac{2^{-1/4}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \cos(kx) \right] \right\} \quad (3.80)$$

Purtroppo la complessità della funzione d'onda normalizzata impedisce la computazione diretta del propagatore in forma esatta tramite l'inserimento della risoluzione dell'identità  $\mathbb{1} = \int_0^\infty dE |E\rangle \langle E|$ , ragion per cui esponiamo la forma semiclassica del propagatore nella prossima sottosezione.

### 3.3.1 Forma “semiclassica” del propagatore

Con l'intento di utilizzare la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) fra due punti iniziali nel semiasse positivo, analizziamo quali possono essere i percorsi che una particella classica può seguire per passare in un tempo  $t$  dal punto  $x_1 > 0$  al punto  $x_2 > 0$ . Per semplicità i due cammini possibili effettivi risultanti sono raffigurati in figura 3.6. Osserviamo come il secondo tipo di cammino possibile penetri nella parte negativa dell'asse  $x$  reale per una lunghezza reale  $\chi$  dipendente dalla velocità iniziale con cui la particella classica transita in  $x = 0$ . Tuttavia il ragionamento che seguiremo non necessita della conoscenza del punto di inversione  $\chi$ , in quanto si fa uso del ben noto risultato [35] di isocronia tipico del potenziale quadratico: il tempo  $\tau$  che intercorre fra il primo transito dal punto  $x = 0$  con velocità negativa e il secondo transito con velocità

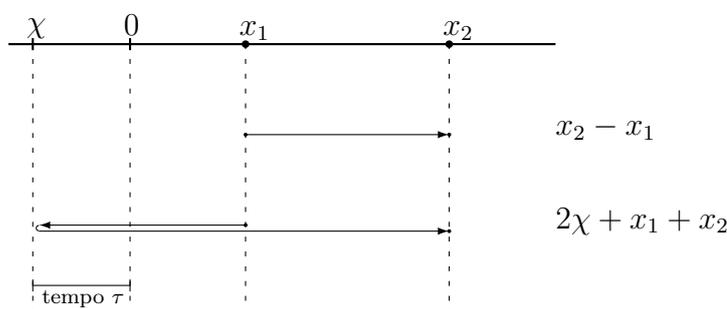


Figura 3.6: Schema raffigurante le due possibili traiettorie classiche fra i punti  $x_1 > 0$  e  $x_2 > 0$  nel caso di un potenziale con una parete armonica (3.49).

Tabella 3.1: Tabella riassuntiva del ragionamento effettivo seguito.

	zona $x < 0$	zona $x > 0$	su tutto $x \in \mathbb{R}$
tempo	$\tau$	$t - \tau$	$t$
lunghezza reale	$2\chi$	$x_1 + x_2$	$x_1 + x_2 + 2\chi$
lunghezza “effettiva”	$l$	$x_1 + x_2$	$x_1 + x_2 + l$
velocità reale	variabile	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$	variabile
velocità “effettiva”	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$

positiva è la metà del periodo tipico dell’oscillatore, indipendentemente dalla posizione del punto di inversione:

$$\tau = \frac{1}{2} \cdot \frac{2\pi}{\omega} = \frac{\pi}{\omega} \quad (3.81)$$

Questo fatto è molto utile poiché ci permette di ignorare il comportamento reale della particella classica nella regione  $x < 0$ , e di considerare invece un comportamento di più semplice trattazione ma del tutto equivalente, assumendo che la particella si comporti nella regione  $x < 0$  come una particella libera, percorrendo una ipotetica lunghezza totale  $l$  in un tempo  $\tau$ . Questo fatto è possibile proprio grazie all’isocronia delle oscillazioni armoniche e al principio di conservazione dell’energia e al fatto notevole che l’azione classica si annulli in una traiettoria armonica di durata pari a semiperiodo che abbia inizio e termine nel punto di minimo del potenziale. Per giustificare quest’ultimo fatto, si faccia riferimento alla sezione D.1.1 in appendice D denominata significativamente “Il contributo all’azione classica di un rimbalzo elastico su un potenziale armonico è nullo”. La tabella 3.1 mostra sinteticamente il ragionamento effettivo che si è seguito.

Rimane solamente da calcolarsi la “lunghezza effettiva”  $l$  che la particella avrebbe compiuto se fosse stata libera nella regione  $x < 0$  e fosse stata vincolata a tornare

nell'origine dopo un urto elastico in un tempo  $\tau$ :

$$l = |v| \cdot \tau = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau} \cdot \tau = \frac{x_1 + x_2}{\frac{t}{\tau} - 1} \quad (3.82)$$

Di conseguenza lo spazio totale "equivalente" che sarebbe stato percorso dalla particella se fosse stata libera anche nella regione  $x < 0$  è:

$$x_1 + x_2 + l = (x_1 + x_2) \left( \frac{1}{\frac{t}{\tau} - 1} + 1 \right) = (x_1 + x_2) \left( 1 - \frac{\tau}{t} \right)^{-1} \quad (3.83)$$

Concludiamo dunque questa trattazione "equivalente" dell'azione nella regione di interesse  $x_1 > 0$  e  $x_2 > 0$ , esplicitando l'azione classica nei due casi illustrati in figura 3.6 facendo uso della nota formula per l'azione della particella libera (C.6):

$$S_{cl}^{(1)} = \frac{m(x_2 - x_1)^2}{2t} \quad (3.84)$$

$$S_{cl}^{(2)} = \frac{m(x_1 + x_2)^2}{2t} \left( 1 - \frac{\tau}{t} \right)^{-2} \quad (3.85)$$

I rispettivi determinanti di van Vleck sono:

$$\sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_{cl}^{(1)}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|} = \sqrt{\frac{m}{t}} \quad (3.86)$$

$$\sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_{cl}^{(2)}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|} = \sqrt{\frac{m}{t}} \left( 1 - \frac{\tau}{t} \right)^{-1} \quad (3.87)$$

L'utilizzo della formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) porta infine ai risultati:  
*N.B.* Il secondo percorso comporta un cambio di segno nel corrispondente propagatore, come già visto in precedenza: si faccia riferimento alla nota a piè della pagina 31

$$K_{sc}^{(1)} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_2 - x_1)^2 \right\} \quad (3.88)$$

$$K_{sc}^{(2)} = -\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \left( 1 - \frac{\tau}{t} \right)^{-1} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_1 + x_2)^2 \left( 1 - \frac{\tau}{t} \right)^{-2} \right\} \quad (3.89)$$

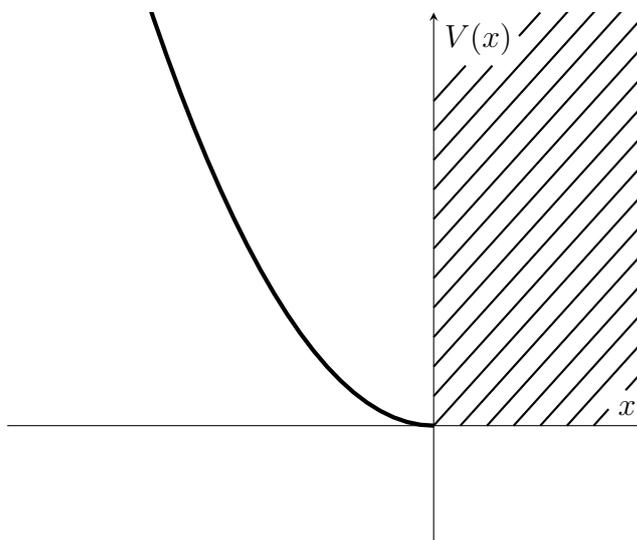


Figura 3.7: Il mezzo oscillatore armonico definito dall'equazione (3.91).

Ricordando la condizione necessaria affinché il secondo tipo di percorso sia percorribile, cioè  $t > \tau = \frac{\pi}{\omega}$ , possiamo riassumere il propagatore semiclassico fra due punti nel semiasse positivo nella forma definitiva: [32]

$$\begin{aligned}
 K_{sc}(x_1 > 0; x_2 > 0; t = t_2 - t_1) = & \\
 & = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_2 - x_1)^2 \right\} - \\
 & - \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \theta \left( t - \frac{\pi}{\omega} \right) \left( 1 - \frac{\pi}{\omega t} \right)^{-1} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_1 + x_2)^2 \left( 1 - \frac{\pi}{\omega t} \right)^{-2} \right\} \quad (3.90)
 \end{aligned}$$

Osserviamo come il propagatore in forma “semiclassica” sia costituito dalla somma della parte caratteristica della particella libera e di una parte aggiuntiva peculiare, presente solo per tempi grandi ovvero per piccole energie.

### 3.4 Mezzo oscillatore armonico

Analizziamo il potenziale costituito dalla metà sinistra di un oscillatore armonico, illustrato in figura 3.7:

$$V(x) = \begin{cases} \frac{m\omega^2 x^2}{2} & \text{se } x < 0 \\ \infty & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (3.91)$$

Del potenziale (3.91) possiamo facilmente intuire lo spettro energetico e le autofunzioni [33], imponendo la condizione  $\psi(0) = 0$  alle autofunzioni dell'oscillatore armonico,

presentate in appendice D e dipendenti dai polinomi di Hermite. Ne consegue che le autofunzioni energetiche normalizzate di (3.91) sono (osserviamo come il fattore  $\sqrt{2}$  a numeratore derivi dal fatto che l'autofunzione sia non nulla solo quando  $x < 0$ ):

$$\psi_{2n+1}(x) = \theta(-x) \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2^{2n+1}(2n+1)!}} \exp \left\{ -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right\} H_{2n+1} \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (3.92)$$

Questa formula deriva direttamente dall'osservazione che la richiesta dell'annullamento della funzione d'onda in  $x = 0$  comporta  $H_n(0) = 0$ , condizione che seleziona solo i polinomi di Hermite di ordine dispari. Allora anche lo spettro verrà selezionato di conseguenza come:

$$E_n = \hbar\omega \left( 2n + \frac{3}{2} \right) \quad (3.93)$$

Un modo equivalente all'introduzione di  $2n + 1$  è quello del mantenimento della variabile  $n$  ma con l'imposizione della sua natura dispari:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{2^n n!}} \cdot \exp \left\{ -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right\} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad \text{con } n \text{ dispari e } x < 0 \end{aligned} \quad (3.94)$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad \text{con } n \text{ dispari} \quad (3.95)$$

### 3.4.1 Forma “esatta” del propagatore

Possiamo calcolare il propagatore del mezzo oscillatore, almeno in modo formale, come:

$$\begin{aligned} K(x_1; x_2; t) &= \langle x_2 | e^{\frac{i}{\hbar} H t} | x_1 \rangle \\ &= \sum_{\substack{n=1, \\ n \text{ dispari}}}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle x_2 | E_n \rangle \langle E_n | x_1 \rangle \end{aligned} \quad (3.96)$$

Sostituendo ora le due formule precedenti (3.94) e (3.95):

$$\begin{aligned} K(x_1; x_2; t) = \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega x_1^2}{2\hbar} \right\} \exp \left\{ -\frac{m\omega x_2^2}{2\hbar} \right\} e^{\frac{i\omega t}{2}} \cdot 2 \sum_{\substack{n=1, \\ n \text{ dispari}}}^{\infty} \frac{e^{in\omega t}}{2^n n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) \end{aligned} \quad (3.97)$$

Adesso utilizziamo un trucco per ottenere una serie con tutti i termini, pari e dispari, valido in generale:

$$\begin{aligned}
 2 \sum_{\substack{n=1, \\ n \text{ dispari}}}^{\infty} f(n) &= 2f(1) + 2f(3) + 2f(5) + \dots \\
 &= [f(0) - f(0)] + [f(1) + f(1)] + [f(2) - f(2)] + [f(3) + f(3)] + \dots \\
 &= \sum_{n=0}^{\infty} [f(n) - (-1)^n f(n)] \tag{3.98}
 \end{aligned}$$

Allora nel nostro caso:

$$\begin{aligned}
 2 \sum_{\substack{n=1, \\ n \text{ dispari}}}^{\infty} \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) &= \\
 = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) - \right. \\
 \left. - (-1)^n \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) \right] \tag{3.99}
 \end{aligned}$$

Utilizzando la proprietà di parità dei polinomi di Hermite  $H_n(-x) = (-1)^n H_n(x)$ :

$$\begin{aligned}
 2 \sum_{\substack{n=1, \\ n \text{ dispari}}}^{\infty} \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) &= \\
 = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) - \right. \\
 \left. - \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( -\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) \right] \tag{3.100}
 \end{aligned}$$

Di conseguenza il propagatore del mezzo oscillatore armonico è esprimibile, tramite la serie completa di termini pari e dispari, come:

$$\begin{aligned}
 K(x_1; x_2; t) &= \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \exp \left\{ -\frac{m\omega x_1^2}{2\hbar} \right\} \exp \left\{ -\frac{m\omega x_2^2}{2\hbar} \right\} \exp \left\{ \frac{i\omega t}{2} \right\} \cdot \\
 &\cdot \sum_{n=0}^{\infty} \frac{e^{in\omega t}}{2^{2n} n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) \left[ H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) - H_n \left( -\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) \right] \tag{3.101}
 \end{aligned}$$

Non si è in grado di calcolare direttamente o in modo esplicito la serie sopra esposta, tuttavia è di grande aiuto la conoscenza della forma esplicita del propagatore dell'oscillatore

armonico, grazie alla quale possiamo dire di conoscere il risultato che avrà questa serie, vedi appendice D e in particolare la formula (D.12) che qui riportiamo per semplicità:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{e^{i\omega t}}{2} \right)^n \frac{1}{n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) = \\ = e^{\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)-\frac{i\omega t}{2}} \sqrt{\frac{1}{2i\sin(\omega t)}} \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar\sin(\omega t)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega t) - 2x_1x_2] \right\} \end{aligned}$$

e ovviamente di conseguenza:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{e^{i\omega t}}{2} \right)^n \frac{1}{n!} H_n \left( -\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) = \\ = e^{\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)-\frac{i\omega t}{2}} \sqrt{\frac{1}{2i\sin(\omega t)}} \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar\sin(\omega t)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega t) + 2x_1x_2] \right\} \end{aligned}$$

Applicando queste due formule alla precedente espressione del propagatore (3.101) otteniamo:

$$\begin{aligned} K(x_1; x_2; t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}} \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} (x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega t) \right\} \cdot \\ \cdot \left[ \exp \left\{ -i \frac{m\omega}{\hbar \sin(\omega t)} x_1 x_2 \right\} - \exp \left\{ +i \frac{m\omega}{\hbar \sin(\omega t)} x_1 x_2 \right\} \right] \quad (3.102) \end{aligned}$$

Cioè, ponendo  $t = t_2 - t_1$ :

$$\boxed{K(x_1, t_1; x_2, t_2) = \sqrt{\frac{2im\omega}{\pi \hbar \sin(\omega t)}} \sin \left( \frac{m\omega}{\hbar} x_1 x_2 \csc(\omega t) \right) \cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar} (x_1^2 + x_2^2) \cot(\omega t) \right\}} \quad (3.103)$$

### 3.4.2 Forma “semiclassica” del propagatore

Al fine di utilizzare la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) è necessario esplicitare l'azione classica del mezzo oscillatore armonico, non difficile da intuire tenendo presente quella del “normale” oscillatore armonico (D.1) e facendo attenzione ai possibili percorsi fra due punti  $x_1 < 0$  e  $x_2 < 0$ , nonchè alla già citata proprietà dell'azione dell'oscillatore armonico di annullarsi in un semiperiodo, dimostrata in sezione D.1.1 in appendice D. Nelle figure 3.8 e 3.9 sono rappresentati alcuni tipi di possibili traiettorie classiche che partono da un punto  $x_1$  e finiscono nel punto  $x_2$ . Queste traiettorie classiche si possono suddividere in due raggruppamenti ben distinti:

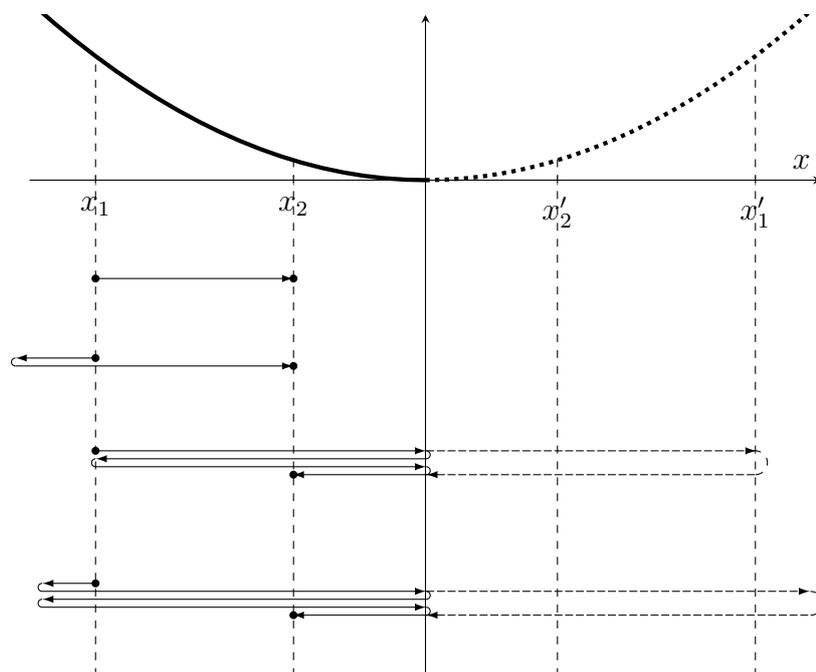


Figura 3.8: Schema per la comprensione della forma dell'azione classica nel caso del mezzo oscillatore armonico (3.91). Sono qui riportati solo i percorsi con un numero nullo o pari di “rimbalzi” in  $x = 0$ . La parte destra tratteggiata denota la parte non fisica della traiettoria.

- In figura 3.8 sono rappresentati i cammini in cui il punto finale  $x_2$  è raggiunto dopo un numero nullo o pari di “rimbalzi” contro la parete infinita di potenziale nel punto  $x = 0$ . Ciò implica che, anche supponendo di avere a che fare con un potenziale “completo” (in cui la particella può accedere anche al semipiano positivo), la traiettoria si completa nel esattamente nel punto  $x_2 < 0$ . Si verifica come sia la traiettoria fisica, realmente seguita dalla particella fisica, sia la traiettoria immaginaria (supponendo il potenziale armonico completo anche nel semipiano positivo) terminino nel punto  $x_2 < 0$  e non nella sua immagine  $x'_2 > 0$ . Questa casistica viene indicizzata con l’etichetta  $A = 1$ .
- In figura 3.9 sono rappresentati i cammini in cui il punto finale  $x_2$  è raggiunto dopo un numero dispari di “rimbalzi” contro la parete infinita di potenziale nel punto  $x = 0$ . Ciò implica che, supponendo di avere a che fare con un potenziale “completo”, ovvero supponendo che la particella abbia la possibilità di entrare anche nel semipiano  $x > 0$ , tale particella “virtuale” avrebbe terminato la sua traiettoria nel semipiano positivo e più di preciso nella controimmagine  $x'_2 > 0$  di  $x_2$ . Si verifica come la traiettoria fisica, realmente seguita dalla particella fisica termini nel punto  $x_2 < 0$ ; mentre la traiettoria immaginaria (supponendo il potenziale armonico completo anche nel semipiano positivo) termini nel punto  $x'_2 > 0$ . Questa casistica viene indicizzata con l’etichetta  $A = 2$ .

L’azione classica, essendo un funzionale dipendente dal percorso, dipende anche dal tipo di percorso seguito, e quindi dall’etichetta  $A = 1, 2$ . Indicheremo quindi l’azione classica con  $S_{cl}^{(A=1)}$  nel primo caso analizzato e descritto in figura 3.8 e  $S_{cl}^{(A=2)}$  nel secondo caso, analizzato e descritto in figura 3.9.

Nel caso  $A = 1$  l’azione è molto semplicemente, in analogia all’azione del potenziale armonico completo (D.1):

$$S_{cl}^{(1)}(x_2; x_1, t) = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x_2^2 + x_1^2) \cos(\omega t) - 2x_1 x_2] \quad (3.104)$$

Nel caso  $A = 2$  l’azione ha la medesima forma della precedente, con l’accortezza di effettuare la sostituzione  $x_2 \rightarrow x'_2$ , ovvero un cambio di segno per  $x_2$ :

$$S_{cl}^{(2)}(x_2; x_1, t) = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x_2^2 + x_1^2) \cos(\omega t) + 2x_1 x_2] \quad (3.105)$$

Possiamo ora applicare la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6). Il calcolo del determinante di van Vleck in entrambi i casi ( $A = 1, 2$ ) porta al risultato  $\sqrt{\frac{m\omega}{\sin(\omega t)}}$ . Allora otterremo i due propagatori (ricordando che un numero dispari di “rimbalzi” comporta un cambiamento di segno nel propagatore, cfr. nota a piè della pagina 31):

$$K_{sc}^{(1)}(x_2; x_1, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar \sin(\omega t)}} \exp \left\{ \frac{im\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x_2^2 + x_1^2) \cos(\omega t) - 2x_1 x_2] \right\} \quad (3.106)$$

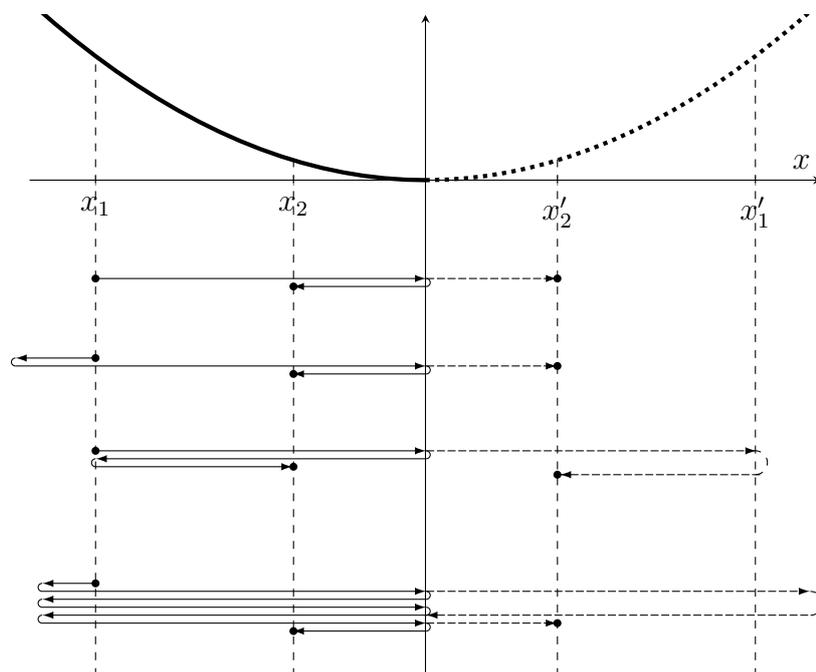


Figura 3.9: Schema per la comprensione della forma dell'azione classica nel caso del mezzo oscillatore armonico (3.91). Sono qui riportati solo i percorsi con un numero dispari di “rimbalzi” in  $x = 0$ . La parte destra tratteggiata denota la parte non fisica della traiettoria.

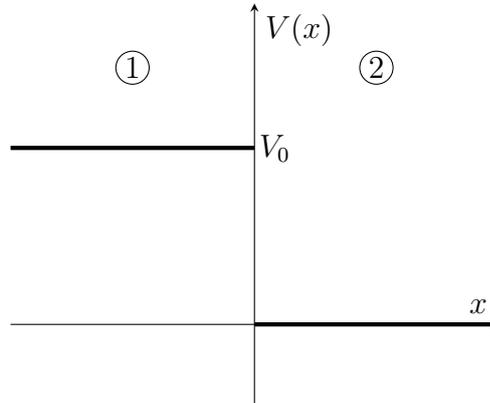


Figura 3.10: Gradino di potenziale. La forma analitica del potenziale è (3.110).

$$K_{sc}^{(2)}(x_2; x_1, t) = -\sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar\sin(\omega t)}} \exp\left\{\frac{i m\omega}{2\hbar\sin(\omega t)}[(x_2^2 + x_1^2)\cos(\omega t) + 2x_1x_2]\right\} \quad (3.107)$$

Questi due contributi si sommano per formare il propagatore semiclassico nella sua forma definitiva:

$$K_{sc}(x_2; x_1, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2i\pi\hbar\sin(\omega t)}} \exp\left\{\frac{i m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\cot(\omega t)\right\} \cdot \left[\exp\left\{-i\frac{m\omega}{\hbar\sin(\omega t)}x_1x_2\right\} - \exp\left\{+i\frac{m\omega}{\hbar\sin(\omega t)}x_1x_2\right\}\right] \quad (3.108)$$

ovvero:

$$K_{sc}(x_1, t_1, t) = \sqrt{\frac{2im\omega}{\pi\hbar\sin(\omega t)}} \sin\left(\frac{m\omega}{\hbar\sin(\omega t)}x_1x_2\right) \cdot \exp\left\{\frac{i m\omega}{2\hbar}(x_1^2 + x_2^2)\cot(\omega t)\right\} \quad (3.109)$$

coincidente con la formula esatta già calcolata in (3.103).

### 3.5 Gradino finito di potenziale

Analizziamo ora il potenziale a gradino finito, ovvero:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{se } x < 0 \\ 0 & \text{se } x > 0 \end{cases} \quad (3.110)$$

Analizziamo prima il caso in cui  $E < V_0$ , nel quale la parte sinistra dell'autofunzione sarà costituita da un esponenziale reale crescente:

$$\psi_{E < V_0}^{(1)}(x) = C \cdot e^{+\kappa x} \quad (3.111)$$

dove

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar} \quad (3.112)$$

Mentre nel semiasse positivo delle  $x$  avremo un normale comportamento ad onda piana:

$$\psi_{E < V_0}^{(2)}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (3.113)$$

dove, ancora una volta:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Imponendo la continuità della funzione d'onda nel punto  $x = 0$  otteniamo:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \psi_{E < V_0}^{(1)}(x) = C = B = \lim_{x \rightarrow 0^+} \psi_{E < V_0}^{(2)}(x) \quad (3.114)$$

Per quanto riguarda invece la continuità della derivata prima calcolata in  $x = 0$  si trova:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \frac{d}{dx} \psi_{E < V_0}^{(1)}(x) = C\kappa = Ak = \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{d}{dx} \psi_{E < V_0}^{(2)}(x) \quad (3.115)$$

Mettendo a sistema queste due condizioni avremo la seguente funzione d'onda:

$$\psi_{E < V_0}(x) = C \left\{ \theta(-x)e^{\kappa x} + \theta(x) \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(kx) + \cos(kx) \right] \right\} \quad (3.116)$$

Vogliamo ora determinare il valore della costante numerica  $C$ , ovvero normalizzare la funzione d'onda, imponendo l'ortonormalità fra due autofunzioni dell'hamiltoniana relative a differenti valori dell'energia (essendo l'operatore hamiltoniano hermitiano ci aspettiamo un termine proporzionale alla distribuzione delta di Dirac della differenza energetica). Al fine di calcolare  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x)$  dividiamo tale integrazione nel semiasse positivo e in quello negativo. Partiamo col considerare l'integrale nella regione  $x < 0$ :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x) &= C^2 \int_{-\infty}^0 dx e^{\kappa_1 x} e^{\kappa_2 x} \\ &= C^2 \frac{e^{(\kappa_1 + \kappa_2)x}}{\kappa_1 + \kappa_2} \Big|_{-\infty}^0 \\ &= C^2 \frac{1}{\kappa_1 + \kappa_2} \end{aligned} \quad (3.117)$$

L'integrazione nel semiasse positivo risulta essere la somma dei seguenti quattro contributi:

$$\begin{aligned}
 & C^2 \int_0^\infty dx \left[ \frac{\kappa_1}{k_1} \sin(k_1 x) + \cos(k_1 x) \right] \left[ \frac{\kappa_2}{k_2} \sin(k_2 x) + \cos(k_2 x) \right] = \\
 & = C^2 \frac{\kappa_1 \kappa_2}{k_1 k_2} \int_0^\infty dx \sin(k_1 x) \sin(k_2 x) + C^2 \int_0^\infty dx \cos(k_1 x) \cos(k_2 x) + \\
 & \quad + C^2 \frac{\kappa_1}{k_1} \int_0^\infty dx \sin(k_1 x) \cos(k_2 x) + C^2 \frac{\kappa_2}{k_2} \int_0^\infty dx \sin(k_2 x) \cos(k_1 x) \quad (3.118)
 \end{aligned}$$

Il primo tipo di integrale è già stato affrontato in precedenza nella sezione 3.1 ed è descritto in appendice B:

$$\frac{\kappa_1 \kappa_2}{k_1 k_2} \int_0^\infty dx \sin(k_1 x) \sin(k_2 x) = \frac{\kappa_1 \kappa_2}{k_1 k_2} \pi \hbar \sqrt{\frac{E_1}{2m}} \delta(E_1 - E_2) \quad (3.119)$$

Anche il secondo integrale (quello con i due coseni come argomento) è illustrato in appendice B ed è risolvibile in maniera assolutamente analoga al precedente, contribuendo con:

$$\int_0^\infty dx \cos(k_1 x) \cos(k_2 x) = \pi \hbar \sqrt{\frac{E_1}{2m}} \delta(E_1 - E_2) \quad (3.120)$$

Proseguiamo l'analisi con lo sviluppo dei due integrali del tipo  $\int_0^\infty dx \sin(kx) \cos(k'x)$ , anch'essi descritti ampiamente nell'appendice B:

$$\frac{\kappa_1}{k_1} \int_0^\infty dx \sin(k_1 x) \cos(k_2 x) = \frac{\kappa_1}{k_1} \frac{k_1}{k_1^2 - k_2^2} = \frac{\kappa_1}{k_1^2 - k_2^2} \quad (3.121)$$

E analogamente:

$$\frac{\kappa_2}{k_2} \int_0^\infty dx \sin(k_2 x) \cos(k_1 x) = \frac{\kappa_2}{k_2} \frac{k_2}{k_2^2 - k_1^2} = -\frac{\kappa_2}{k_1^2 - k_2^2} \quad (3.122)$$

Collecionando i quattro termini derivanti dal calcolo dei quattro integrali otteniamo, per la parte d'integrazione relativa al semiasse positivo:

$$\begin{aligned}
 \int_0^\infty dx \psi_{E_1 < V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 < V_0}(x) & = \\
 & = C^2 \left( 1 + \frac{\kappa_1 \kappa_2}{k_1 k_2} \right) \hbar \pi \sqrt{\frac{E_1}{2m}} \delta(E_1 - E_2) + C^2 \frac{\kappa_1 - \kappa_2}{k_1^2 - k_2^2} \quad (3.123)
 \end{aligned}$$

Ricordando che l'integrale nella regione  $x < 0$  contribuiva (3.117) con un  $\frac{1}{\kappa_1 + \kappa_2}$ , otteniamo infine:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x) = C^2 \left( 1 + \frac{\kappa_1\kappa_2}{k_1k_2} \right) \hbar\pi\sqrt{\frac{E_1}{2m}}\delta(E_1 - E_2) + C^2 \frac{\kappa_1 - \kappa_2}{k_1^2 - k_2^2} + \frac{C^2}{\kappa_1 + \kappa_2} \quad (3.124)$$

Verifichiamo ora come il termine non proporzionale alla delta di Dirac sia in effetti nullo (come l'hermiticit  della hamiltoniana in effetti garantisce), sebbene a prima vista possa non sembrare tale:

$$\begin{aligned} \frac{\kappa_1 - \kappa_2}{k_1^2 - k_2^2} + \frac{1}{\kappa_1 + \kappa_2} &= \frac{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_1^2} - \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_2^2}}{k_1^2 - k_2^2} + \frac{1}{\sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_1^2} + \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_2^2}} \\ &= \frac{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_1^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2} + k_2^2 + k_1^2 - k_2^2}{(k_1^2 - k_2^2) \left( \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_1^2} + \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k_2^2} \right)} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.125)$$

Riscriviamo dunque la formula finale per  $\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x)$ , che ci consente di effettuare la normalizzazione della funzione d'onda nel caso  $E < V_0$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1}(x)\psi_{E_2}(x) = C^2 \left( 1 + \frac{\kappa_1\kappa_2}{k_1k_2} \right) \hbar\pi\sqrt{\frac{E_1}{2m}}\delta(E_1 - E_2) \quad (3.126)$$

L'imposizione della condizione di normalizzazione coincide con l'equazione:

$$C^2 \left( 1 + \frac{\kappa_1^2}{k_1^2} \right) \hbar\pi\sqrt{\frac{E_1}{2m}} = 1 \quad (3.127)$$

Da cui   possibile ricavare il valore della costante  $C$ :

$$C = \left[ \pi\hbar \left( 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right) \right]^{-1/2} \left( \frac{2m}{E} \right)^{1/4} = \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2 k}} \left( 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right)^{-1/2} \quad (3.128)$$

In ragione di questo risultato, l'autofunzione dell'hamiltoniana normalizzata per energie minori di  $V_0$  sar :

$$\boxed{\psi_{E < V_0}(x) = \left( 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right)^{-1/2} \sqrt{\frac{2m}{\pi\hbar^2 k}} \left\{ \theta(-x)e^{\kappa x} + \theta(x) \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(kx) + \cos(kx) \right] \right\}} \quad (3.129)$$

Procediamo ora alla determinazione dell'autofunzione dell'hamiltoniana nel caso in cui  $E > V_0$ . In questo caso anche nella regione  $x < 0$  risulta che la funzione d'onda

è un'onda piana, ovvero una somma di seni e coseni, il cui argomento è però adesso proporzionale a  $\chi$ :

$$\chi = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} \quad (3.130)$$

Avremo dunque nella regione ① dove  $x < 0$ :

$$\psi_{E>V_0}^{(1)}(x) = C \sin(\chi x) + D \cos(\chi x) \quad (3.131)$$

Mentre nella regione ② dove  $x > 0$ :

$$\psi_{E>V_0}^{(2)}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (3.132)$$

dove, come di consueto,  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ .

Imponendo la continuità della funzione d'onda nel punto  $x = 0$  otteniamo:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \psi_{E>V_0}^{(1)}(x) = D = B = \lim_{x \rightarrow 0^+} \psi_{E>V_0}^{(2)}(x) \quad (3.133)$$

Per quanto riguarda invece la continuità della derivata prima calcolata in  $x = 0$  si trova:

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \frac{d}{dx} \psi_{E>V_0}^{(1)}(x) = C\chi = Ak = \lim_{x \rightarrow 0^+} \frac{d}{dx} \psi_{E>V_0}^{(2)}(x) \quad (3.134)$$

Risolvendo il sistema otteniamo:

$$\begin{cases} \psi_{E>V_0}^{(1)}(x) = A \frac{k}{\chi} \sin(\chi x) + B \cos(\chi x) \\ \psi_{E>V_0}^{(2)}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \end{cases} \quad (3.135)$$

Vogliamo quindi normalizzare la seguente autofunzione, dipendente dalle due costanti  $A$  e  $B$ :

$$\psi_{E>V_0}(x) = \theta(-x) \left[ A \frac{k}{\chi} \sin(\chi x) + B \cos(\chi x) \right] + \theta(x) [A \sin(kx) + B \cos(kx)] \quad (3.136)$$

Al fine di normalizzare l'autofunzione (3.136), vogliamo calcolare l'integrale

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1>V_0}(x) \cdot \psi_{E_2>V_0}(x)$$

e come nel caso precedente analizziamo il comportamento nel semiasse positivo e in quello negativo. Gli integrali che compariranno sono dello stesso tipo (trigonometrici e divergenti formalmente) del caso  $E < V_0$  ed esposti in appendice B.

Sfruttando la totale analogia al caso precedente possiamo scrivere brevemente che l'integrale nella regione  $x > 0$  è:

$$\begin{aligned}
 \int_0^{\infty} dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) &= (A^2 + B^2) \hbar \pi \sqrt{\frac{E_1}{2m}} \delta(E_1 - E_2) + AB \frac{k_1}{k_1^2 - k_2^2} + AB \frac{k_2}{k_2^2 - k_1^2} \\
 &= (A^2 + B^2) \hbar \pi \sqrt{\frac{E_1}{2m}} \delta(E_1 - E_2) + \frac{AB}{k_1 + k_2} \\
 &= (A^2 + B^2) \frac{\pi \hbar^2 k}{2m} \delta(E_1 - E_2) + \frac{AB}{k_1 + k_2} \quad (3.137)
 \end{aligned}$$

Il livello di analogia della regione delle  $x$  negative è leggermente minore, ragion per cui si ritiene utile esplicitare maggiormente la computazione:

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) &= \\
 &= \int_{-\infty}^0 dx \left[ A \frac{k_1}{\chi_1} \sin(\chi_1 x) + B \cos(\chi_1 x) \right] \left[ A \frac{k_2}{\chi_2} \sin(\chi_2 x) + B \cos(\chi_2 x) \right] = \\
 &= \int_0^{+\infty} dx \left[ -A \frac{k_1}{\chi_1} \sin(\chi_1 x) + B \cos(\chi_1 x) \right] \left[ -A \frac{k_2}{\chi_2} \sin(\chi_2 x) + B \cos(\chi_2 x) \right] \quad (3.138)
 \end{aligned}$$

Moltiplicando gli oggetti all'interno delle due parentesi quadre troviamo quattro integrali che contribuiscono all'integrale  $\int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x)$ :

$$\begin{aligned}
 \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) &= \\
 &= A^2 \frac{k_1 k_2}{\chi_1 \chi_2} \int_0^{+\infty} dx \sin(\chi_1 x) \sin(\chi_2 x) + B^2 \int_0^{+\infty} dx \cos(\chi_1 x) \cos(\chi_2 x) - \\
 &\quad - AB \frac{k_1}{\chi_1} \int_0^{+\infty} dx \sin(\chi_1 x) \cos(\chi_2 x) - AB \frac{k_2}{\chi_2} \int_0^{+\infty} dx \sin(\chi_2 x) \cos(\chi_1 x) \quad (3.139)
 \end{aligned}$$

Analizziamo i quattro integrali che compaiono nella formula presente, cominciando dai termini pari nello scambio  $x \leftrightarrow -x$  e più precisamente dall'integrale con i due seni come argomento. Si faccia nuovamente riferimento all'appendice B.

$$\begin{aligned}
 \int_0^{+\infty} dx \sin(\chi_1 x) \sin(\chi_2 x) &= \frac{\pi}{2} \delta(\chi_1 - \chi_2) \\
 &= \frac{\pi \hbar}{2} \delta(\sqrt{2m(E_1 - V_0)} - \sqrt{2m(E_2 - V_0)}) \\
 &= \pi \hbar \sqrt{\frac{E_1 - V_0}{2m}} \delta(E_1 - E_2) \\
 &= \frac{\pi \hbar^2 \chi_1}{2m} \delta(E_1 - E_2) \quad (3.140)
 \end{aligned}$$

E in maniera assolutamente analoga, cfr. appendice B, abbiamo che:

$$\int_0^{+\infty} dx \cos(\chi_1 x) \cos(\chi_2 x) = \frac{\pi \hbar^2 \chi_1}{2m} \delta(E_1 - E_2) \quad (3.141)$$

Gli altri due integrali sono perfettamente riconducibili a quello ampiamente analizzato in appendice B:

$$\int_0^{+\infty} dx \sin(\chi_1 x) \cos(\chi_2 x) = \frac{\chi_1}{\chi_1^2 - \chi_2^2} \quad (3.142)$$

$$\int_0^{+\infty} dx \sin(\chi_2 x) \cos(\chi_1 x) = \frac{\chi_2}{\chi_2^2 - \chi_1^2} \quad (3.143)$$

Collezionando tutti i quattro contributi dei quattro integrali sopra esposti, otteniamo:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) &= \\ &= \left( A^2 \frac{k_1 k_2}{\chi_1 \chi_2} + B^2 \right) \frac{\pi \hbar^2 \chi_1}{2m} \delta(E_1 - E_2) - AB \frac{k_1 - k_2}{\chi_1^2 - \chi_2^2} + AB \frac{k_2}{\chi_1^2 - \chi_2^2} \end{aligned} \quad (3.144)$$

Ovvero:

$$\int_{-\infty}^0 dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) = \left( A^2 \frac{k^2}{\chi} + B^2 \chi \right) \frac{\pi \hbar^2}{2m} \delta(E_1 - E_2) + AB \frac{k_2 - k_1}{\chi_1^2 - \chi_2^2} \quad (3.145)$$

Globalmente l'integrale su tutto l'asse reale risulta essere:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) &= \\ &= \left[ A^2 \left( \frac{k^2}{\chi} + k \right) + B^2 (\chi + k) \right] \frac{\pi \hbar^2}{2m} \delta(E_1 - E_2) - AB \frac{k_1}{\chi_1^2 - \chi_2^2} - AB \frac{k_2}{\chi_2^2 - \chi_1^2} + \frac{AB}{k_1 + k_2} \end{aligned} \quad (3.146)$$

Anche in questo caso ci attendiamo che i termini non proporzionali alla delta si annullino a vicenda, e in effetti è così: è sufficiente utilizzare la definizione della quantità  $\chi$  (2.37):

$$\begin{aligned} -AB \frac{k_1}{\chi_1^2 - \chi_2^2} - AB \frac{k_2}{\chi_2^2 - \chi_1^2} + \frac{AB}{k_1 + k_2} &= AB \left( \frac{k_2 - k_1}{\chi_1^2 - \chi_2^2} + \frac{1}{k_1 + k_2} \right) \\ &= AB \left[ \frac{k_2 - k_1}{(k_1^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}) - (k_2^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2})} + \frac{1}{k_1 + k_2} \right] \\ &= AB \left( -\frac{k_1 - k_2}{k_1^2 - k_2^2} + \frac{1}{k_1 + k_2} \right) \\ &= AB \left( -\frac{1}{k_1 + k_2} + \frac{1}{k_1 + k_2} \right) \\ &= 0 \end{aligned} \quad (3.147)$$

Ragion per cui, in effetti, la formula definitiva per l'integrale ricercato è:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \psi_{E_1 > V_0}(x) \cdot \psi_{E_2 > V_0}(x) = \left[ A^2 \left( \frac{k^2}{\chi} + k \right) + B^2(\chi + k) \right] \frac{\pi \hbar^2}{2m} \delta(E_1 - E_2) \quad (3.148)$$

La condizione di normalizzazione è imposta dall'equazione per  $A$  e  $B$ :

$$\left[ A^2 \left( \frac{k^2}{\chi} + k \right) + B^2(\chi + k) \right] \frac{\pi \hbar^2}{2m} = 1 \quad (3.149)$$

Ovvero:

$$A^2 \frac{k^2 + k\chi}{\chi} + B^2(\chi + k) = \frac{2m}{\pi \hbar^2} \quad (3.150)$$

A questo punto può esser vantaggioso effettuare il seguente cambio di variabile (parametrizziamo attraverso la variabile  $\alpha$  la dipendenza da  $A$ ):

$$A = B \cos \alpha \quad (3.151)$$

Allora:

$$B^2 \left( \frac{k^2 + k\chi}{\chi} \cos^2 \alpha + \chi + k \right) = \frac{2m}{\pi \hbar^2} \quad (3.152)$$

$$\begin{aligned} B &= \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2m}{\pi}} \left( \frac{k^2 + k\chi}{\chi} \cos^2 \alpha + \chi + k \right)^{-1/2} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar^2 k}} \left( \frac{k + \chi}{\chi} \cos^2 \alpha + \frac{\chi}{k} + 1 \right)^{-1/2} \end{aligned} \quad (3.153)$$

Allora l'autofunzione normalizzata è:

$$\boxed{\psi_{E > V_0}(x) = \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar^2 k}} \left( \frac{k + \chi}{\chi} \cos^2 \alpha + \frac{\chi}{k} + 1 \right)^{-1/2} \cdot \left\{ \theta(-x) \left[ \cos^2 \alpha \frac{k}{\chi} \sin(\chi x) + \cos(\chi x) \right] + \theta(x) \left[ \cos^2 \alpha \sin(kx) + \cos(kx) \right] \right\}} \quad (3.154)$$

### 3.5.1 Forma “esatta” del propagatore

Si è ora in grado di calcolare la forma esatta del propagatore, nella regione di interesse  $x_1 > 0$ ,  $x_2 > 0$ ; utilizzando la seguente espressione, ricavata dalle equazioni (3.129) e

(3.154), per l'autofunzione energetica normalizzata, valida per  $x > 0$ :

$$\begin{aligned} \psi_E(x) = & \theta(E - V_0) \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar^2 k}} \left( \frac{k + \chi}{\chi} \cos^2 \alpha + \frac{\chi}{k} + 1 \right)^{-1/2} [\cos^2 \alpha \sin(kx) + \cos(kx)] + \\ & + \theta(V_0 - E) \left( 1 + \frac{\kappa^2}{k^2} \right)^{-1/2} \sqrt{\frac{2m}{\pi \hbar^2 k}} \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(kx) + \cos(kx) \right] \end{aligned} \quad (3.155)$$

Di conseguenza il propagatore, in forma esatta benché non calcolabile analiticamente, sarà:

$$\begin{aligned} K(x_1, x_2; t = t_2 - t_1) &= \langle x_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H t} | x_1 \rangle \\ &= \int_0^\infty dE \langle x_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} E t} | E \rangle \langle E | x_1 \rangle \\ &= \int_0^\infty dE e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \psi_E(x_1) \psi_E(x_2) \end{aligned} \quad (3.156)$$

dove  $\psi_E(x_1)$  e  $\psi_E(x_2)$  sono dati dall'equazione (3.155), e ciò comporta la valutazione di due integrali energetici separati, il primo nel caso  $E > V_0$  e il secondo  $E < V_0$ :

$$\begin{aligned} K(x_1, x_2; t = t_2 - t_1) &= \\ &= \int_0^{V_0} dE e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \frac{\frac{2m}{\pi \hbar^2 k}}{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}} \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(kx_1) + \cos(kx_1) \right] \left[ \frac{\kappa}{k} \sin(kx_2) + \cos(kx_2) \right] + \\ &+ \int_{V_0}^\infty dE e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \frac{\frac{2m}{\pi \hbar^2 k}}{1 + \frac{\chi}{k} + \frac{k+\chi}{\chi} \cos^2 \alpha} [\cos^2 \alpha \sin(kx_1) + \cos(kx_1)] [\cos^2 \alpha \sin(kx_2) + \cos(kx_2)] \end{aligned} \quad (3.157)$$

Risulta conveniente cambiare la variabile di integrazione in  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ , ottenendo così:

$$\begin{aligned} K(x_1, x_2; t) &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}} dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} \cdot \\ &\cdot \frac{\frac{\kappa^2}{k^2} \sin(kx_1) \sin(kx_2) + \frac{\kappa}{k} [\sin(kx_1) \cos(kx_2) + \cos(kx_1) \sin(kx_2)] + \cos(kx_1) \cos(kx_2)}{1 + \frac{\kappa^2}{k^2}} + \\ &+ \frac{2}{\pi} \int_{\frac{\sqrt{2mV_0}}{\hbar}}^\infty dk e^{-\frac{i\hbar t}{2m} k^2} \cdot \\ &\cdot \frac{\cos^4 \alpha \sin(kx_1) \sin(kx_2) + \cos^2 \alpha [\sin(kx_1) \cos(kx_2) + \cos(kx_1) \sin(kx_2)] + \cos(kx_1) \cos(kx_2)}{1 + \frac{\chi}{k} + \frac{k+\chi}{\chi} \cos^2 \alpha} \end{aligned} \quad (3.158)$$

Non si è trovato un metodo analitico per integrare esattamente queste difficoltose espressioni, ma, ricordando nuovamente che  $\kappa = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2} - k^2}$  e  $\chi = \sqrt{k^2 - \frac{2mV_0}{\hbar^2}}$ , si è in grado di graficare, per mezzo del calcolatore, il propagatore nella sua forma “esatta”. Alcuni grafici relativi a questa forma esatta del propagatore e a quella in approssimazione semiclassica, che calcoleremo nella prossima sottosezione, sono contenuti nella sottosezione 3.5.3.

### 3.5.2 Forma “semiclassica” del propagatore

Al fine di utilizzare la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) per il propagatore in approssimazione semiclassica, esplicitiamo l’azione classica del gradino finito di potenziale.

Siamo interessati alla regione delle  $x$  positive, e qui le possibili traiettorie classiche seguite dalla particella sono classificabili in due tipi differenti: si faccia riferimento nuovamente alla figura 3.2 relativa al caso del gradino infinito di potenziale per comprendere quali siano le due classi qui di seguito esposte.

- La prima classe è quelle delle traiettorie senza alcun “rimbalzo” sulla barriera di potenziale posta in  $x = 0$ . Il termine caratteristico che compare nell’azione classica relativa a questo tipo di traiettoria classica è  $x_2 - x_1$ , cfr. figura 3.2.
- La seconda classe è quelle delle traiettorie classiche che prevedono un “rimbalzo” sulla barriera di potenziale posta in  $x = 0$ . Ricordiamo già fin da subito come i contributi al propagatore derivanti da questa classe vengano pesati con un fattore  $(-1)$ , come già osservato nella nota a piè della pagina 31. Il termine caratteristico che compare nell’azione classica relativa a questo tipo di traiettoria classica è  $x_1 + x_2$ , cfr. figura 3.2.

Tuttavia si evidenzia a questo punto una sostanziale differenza fra il gradino finito di potenziale e il gradino infinito di potenziale: se nel caso infinito abbiamo visto come questa classe di traiettorie classiche fosse sempre presente, indipendentemente dal valore energetico, ora è evidente che queste traiettorie classiche siano possibili solo nel caso in cui  $E < V_0$ :

$$E < V_0 \implies \frac{1}{2}m \left( \frac{x_1 + x_2}{t} \right)^2 < V_0 \implies \frac{m}{2t^2}(x_1 + x_2)^2 < V_0 \quad (3.159)$$

Questo secondo tipo di traiettoria classica è presente solo sotto la condizione  $V_0 > \frac{m}{2t^2}(x_1 + x_2)^2$ . Osserviamo infine che nel limite  $V_0 \rightarrow \infty$  questa condizione risulti sempre verificata, e si giustifica in questo modo il fatto che nell’analisi dello scalino infinito di potenziale non si presentasse questa condizione.

Etichettando i due tipi di traiettoria classica descritti sopra con  $A = 1, 2$  rispettivamente, possiamo concludere che l'azione classica, utilizzando la formula (C.6) per l'azione classica della particella libera, risulti essere:

$$S_{cl}^{(1)} = \frac{m}{2t^2}(x_2 - x_1)^2 \quad (3.160)$$

$$S_{cl}^{(2)} = \frac{m}{2t^2}(x_1 + x_2)^2, \quad \text{possibile a condizione che } V_0 > \frac{m}{2t^2}(x_1 + x_2)^2 \quad (3.161)$$

Osservando che entrambi i determinanti di van Vleck risultano essere pari a  $\sqrt{\frac{m}{t}}$ , ricordando la prescrizione del cambio di segno relativa alla seconda classe di traiettorie classiche (cfr. nota a piè della pagina 31) e formalizzando la condizione sull'energia con una funzione  $\theta$  di Heaviside, la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) porta alla seguente espressione per il propagatore dello scalino finito di potenziale in approssimazione semiclassica:

$$\boxed{K_{sc}(x_1, x_2; t = t_2 - t_1) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_2 - x_1)^2 \right\} - \theta \left( V_0 - \frac{m(x_1 + x_2)^2}{2t^2} \right) \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_1 + x_2)^2 \right\}} \quad (3.162)$$

Osserviamo come il propagatore del gradino finito di potenziale, in approssimazione semiclassica, sia composto dalla differenza del propagatore della particella libera (C.8) e di un altro termine presente solo in condizioni di bassa energia, ovvero ad alti tempi  $t$ . Questo aspetto è evidente nelle figure 3.11 e 3.12.

### 3.5.3 Grafici dei propagatori ottenuti

In questa sezione si presentano alcuni grafici, ottenuti tramite l'utilizzo del software di analisi numerica *Mathematica*<sup>2</sup>, che confrontano le parti reali e immaginarie dei propagatori calcolati in questa sezione.

Al fine di graficare i propagatori in funzione del tempo  $t$  posto sull'asse delle ascisse si è supposto sempre, in questa sottosezione, di utilizzare le unità naturali di Planck  $\hbar = c = 1$  e che  $m = 1$ ,  $x_1 = 1$ ,  $x_2 = 2$ ,  $V_0 = 2$ . Inoltre, nel caso del propagatore in forma esatta, si è supposto che  $\cos \alpha = \frac{1}{2}$  (scelta che in ogni modo non influisce sul risultato finale).

I primi due grafici 3.11 e 3.12 raffigurano il confronto fra il propagatore della forma "semiclassica" del propagatore del gradino finito di potenziale e la particella libera (C.8). Tutte le altre figure, 3.13, 3.14, 3.15, 3.16, 3.17, 3.18, mostrano invece, su scale diverse dell'asse  $t$  delle ascisse, il confronto fra la forma "esatta" del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) e sua forma "semiclassica" (3.162).

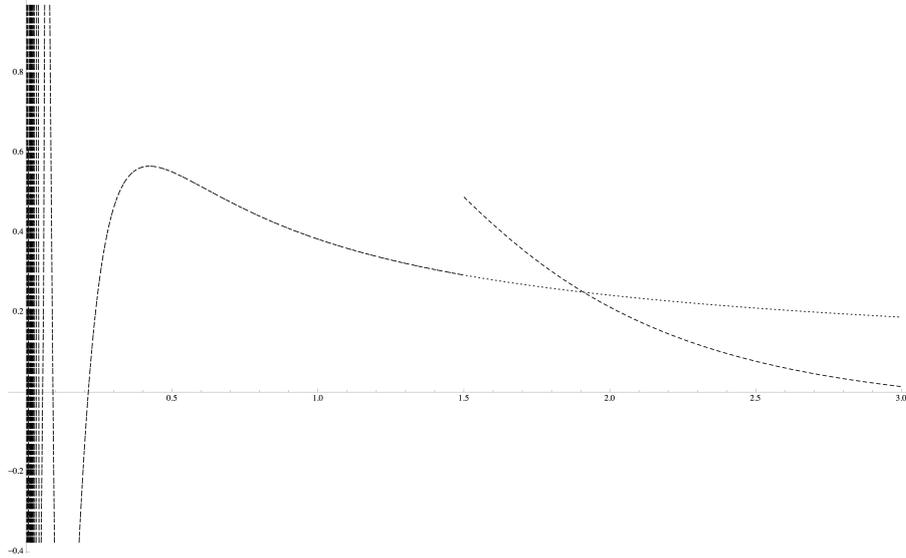


Figura 3.11: Grafico delle parti reali del propagatore di particella libera (C.8) (punteggiato) e forma semiclassica del propagatore del gradino finito di potenziale (3.162) (tratteggiato), in funzione del tempo. Si evidenzia la discontinuità del propagatore del gradino finito di potenziale in  $t = \frac{3}{2}$ , sotto le ipotesi numeriche fatte.

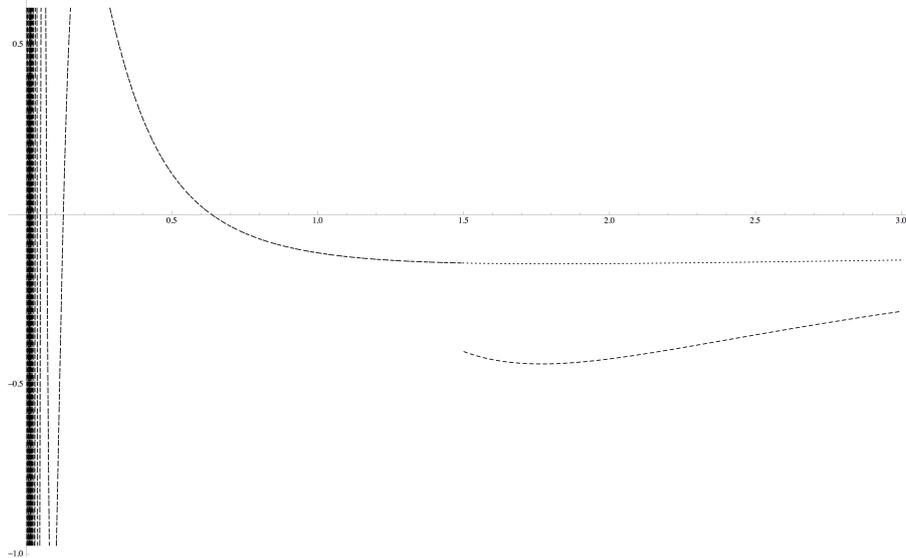


Figura 3.12: Grafico delle parti immaginarie del propagatore di particella libera (punteggiato) e forma semiclassica del propagatore del gradino finito di potenziale (tratteggiato), in funzione del tempo. Si evidenzia la discontinuità del propagatore del gradino finito di potenziale in  $t = \frac{3}{2}$ , sotto le ipotesi numeriche fatte.

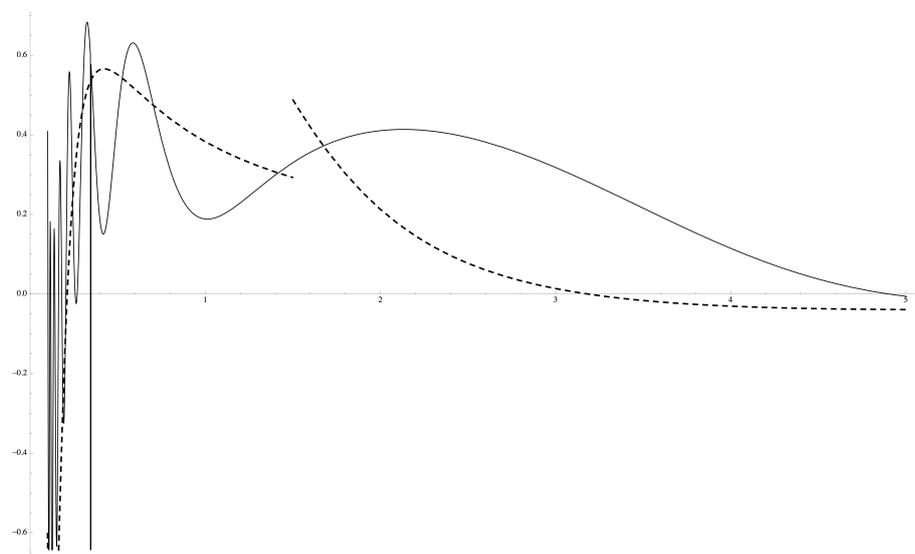


Figura 3.13: Grafico delle parti reali della forma “esatta” del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) (linea continua) e della sua forma approssimata “semiclassica” (tratteggiata) (3.162) in funzione di un tempo compreso fra 0 e 5. Si evidenzia la discontinuità della forma “semiclassica” del propagatore nel punto  $t = \frac{3}{2}$ , sotto le ipotesi numeriche fatte.

Osserviamo in particolare nelle figure 3.17 e 3.18 come le due espressioni (3.158) e (3.162) per il propagatore del gradino finito di potenziale tendano ad avvicinarsi nel limite  $t \gg 1$ .

---

<sup>2</sup>Wolfram Research Inc., Mathematica 9.0, Wolfram Research, Champaign, 2012.

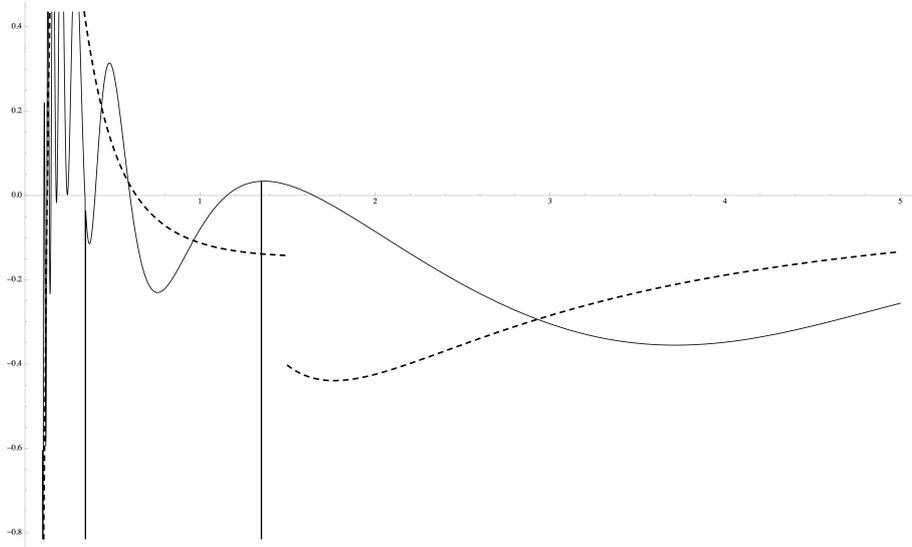


Figura 3.14: Grafico delle parti immaginarie della forma “esatta” del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) (linea continua) e della sua forma approssimata “semiclassica” (3.162) (tratteggiata) in funzione di un tempo compreso fra 0 e 5. Si evidenzia la discontinuità della forma “semiclassica” del propagatore nel punto  $t = \frac{3}{2}$ , sotto le ipotesi numeriche fatte, nonché una appartenente singolarità della forma “esatta” in un punto  $t'$  non lontano.

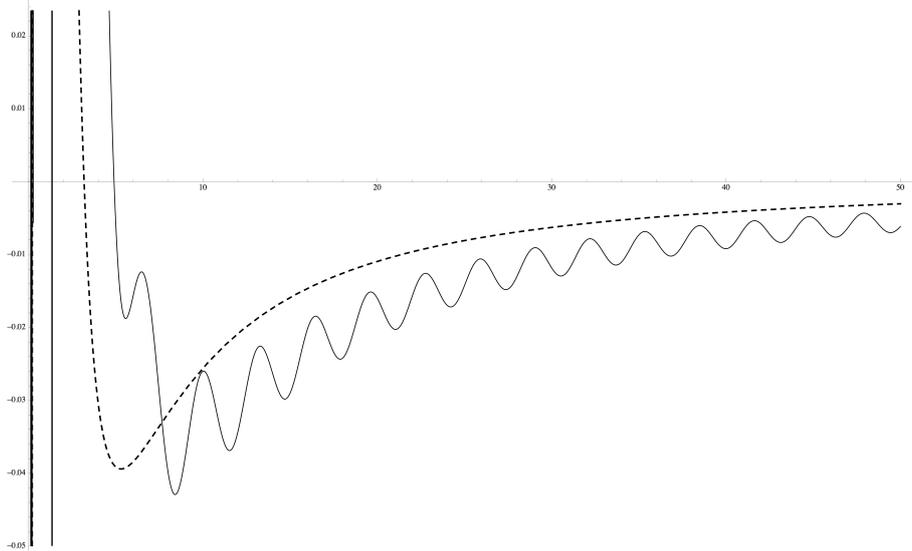


Figura 3.15: Grafico delle parti reali della forma “esatta” del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) (linea continua) e della sua forma approssimata “semiclassica” (tratteggiata) (3.162) in funzione di un tempo compreso fra 0 e 50.

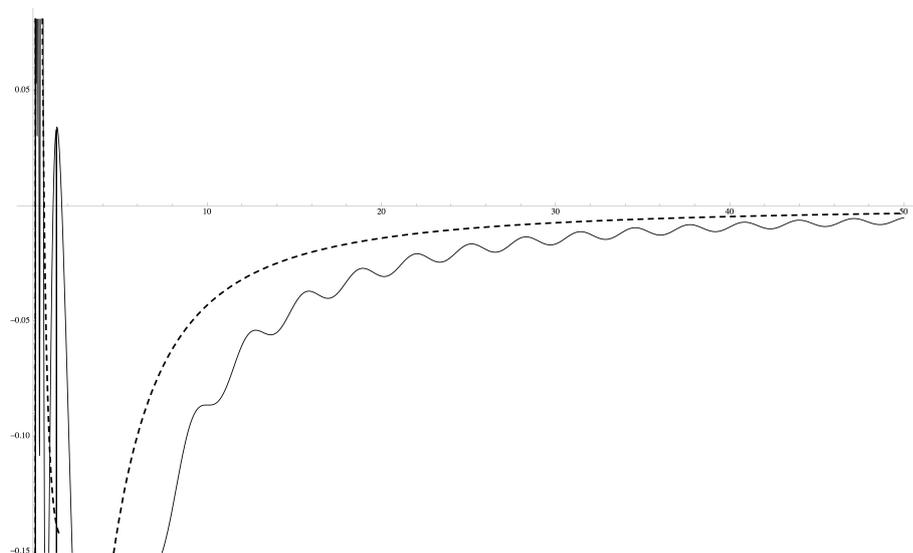


Figura 3.16: Grafico delle parti immaginarie della forma “esatta” del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) (linea continua) e della sua forma approssimata “semiclassica” (tratteggiata) (3.162) in funzione di un tempo compreso fra 0 e 50.

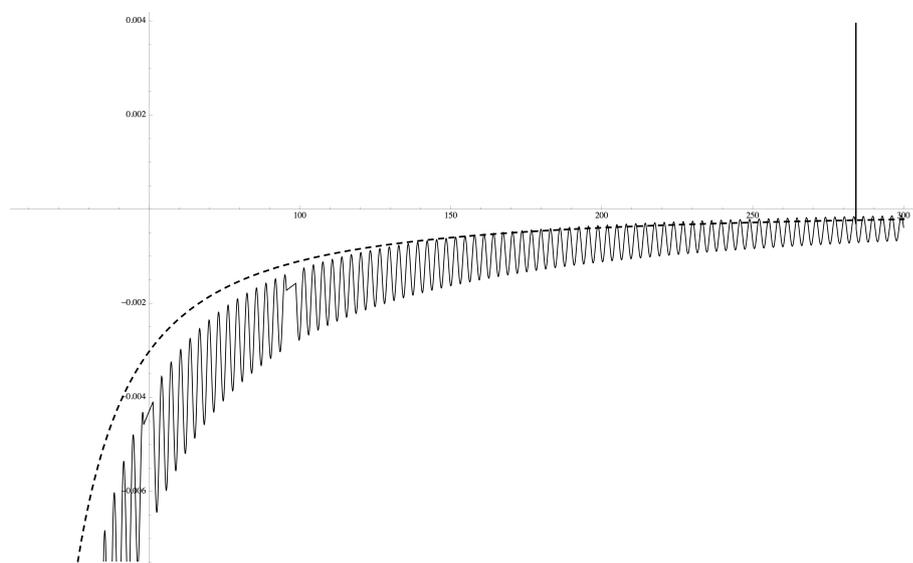


Figura 3.17: Grafico delle parti reali della forma “esatta” del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) (linea continua) e della sua forma approssimata “semiclassica” (tratteggiata) (3.162) in funzione di un tempo compreso fra 0 e 300. Osserviamo come nel limite di tempi grandi, nonostante le oscillazioni del propagatore in forma “esatta”, le due forme tendano ad avvicinarsi.

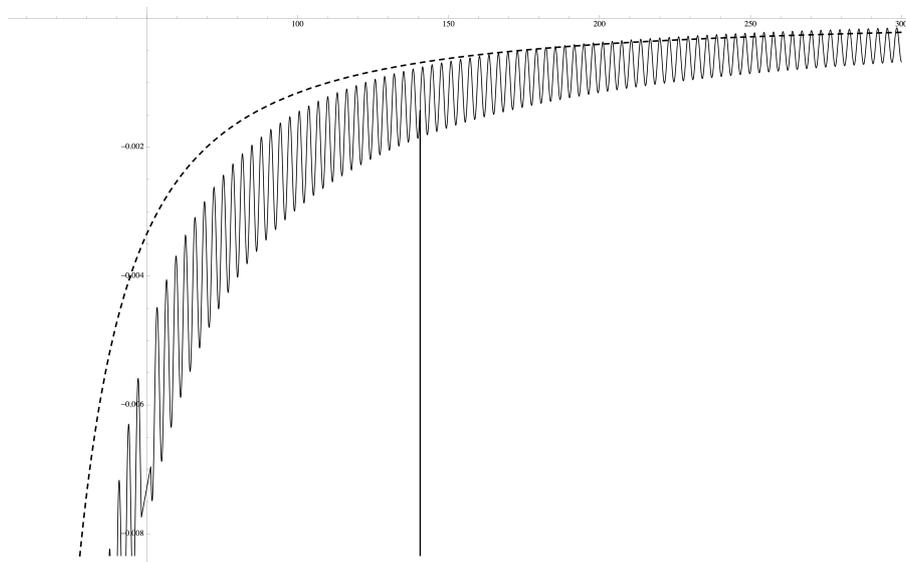


Figura 3.18: Grafico delle parti immaginarie della forma “esatta” del propagatore del gradino finito di potenziale (3.158) (linea continua) e della sua forma approssimata “semiclassica” (tratteggiata) (3.162) in funzione di un tempo compreso fra 0 e 300. Osserviamo come nel limite di tempi grandi, nonostante le oscillazioni del propagatore in forma “esatta”, le due forme tendano ad avvicinarsi.



---

## Propagatore della buca di potenziale a pareti elastiche

---

Prendiamo nuovamente in considerazione il potenziale della buca di potenziale con pareti elastiche (1.1), ma ora trasliamo il tutto a destra di  $a$ . Esponiamo brevemente le difficoltà presenti nella computazione analitica del propagatore in forma “esatta” e nella successiva sezione 4.1 andremo a calcolarci il propagatore in approssimazione semiclassica facendo uso della formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6).

Per prima cosa esplicitiamo nuovamente le autofunzioni relative all’hamiltoniana per evidenziare le difficoltà presenti nel calcolo diretto del propagatore. Abbiamo già visto nel capitolo 1 come fosse possibile esprimere le autofunzioni dell’hamiltoniana in oggetto attraverso seni e coseni nella regione ② (ovvero nella regione  $-a < x < a$ , cfr. figura (1.1)) e attraverso somma o differenza di funzioni ipergeometriche confluenti nelle regioni ① e ③. Questo approccio è risultato proficuo nel capitolo 2, nel corso nel quale abbiamo determinato l’equazione trascendente dello spettro energetico (2.22), tuttavia l’espressione delle autofunzioni attraverso le funzioni ipergeometriche confluenti non risulta comoda per quanto concerne la normalizzazione delle autofunzioni stesse.

Utilizziamo ancora una volta l’analogia che abbiamo verificato sussistere fra la particolare equazione di Kummer in oggetto, e quindi quella di Whittaker (cfr. sezione A.3 in appendice A) e l’equazione differenziale di Weber (A.38) che conduce alla funzione parabolica del cilindro (A.30), al fine di riscrivere l’espressione dell’autofunzione nelle regioni ① e ③ sotto forma di funzioni paraboliche del cilindro. Abbiamo già visto nella parte finale del capitolo 1 la forma esplicita dell’autofunzione (1.31), che qui modifichiamo

traslando il potenziale verso destra di una quantità  $a$ :

$$\psi_E(x) = \begin{cases} c \cdot D_{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( -\sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} x \right) & \text{se } x < 0 \\ d_1 \sin(kx) + d_2 \cos(kx) & \text{se } 0 \leq x \leq 2a \\ f \cdot D_{\frac{E}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}} \left( \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} (x - 2a) \right) & \text{se } x > 2a \end{cases} \quad (4.1)$$

L'analogo del sistema (1.32), derivante dal raccordo delle autofunzioni in  $x = -a$  e  $x = +a$ , sarà:

$$\begin{cases} c \cdot \frac{\sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{4}}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} = d_2 & (4.2a) \\ f \cdot \frac{\sqrt{\pi} 2^{\frac{E}{2\hbar\omega} - \frac{1}{4}}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} = d_1 \sin(2ka) + d_2 \cos(2ka) & (4.2b) \\ c \cdot \sqrt{\frac{m\omega\pi}{\hbar}} \frac{2^{\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}}}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} = d_1 k & (4.2c) \\ -f \cdot \sqrt{\frac{m\omega\pi}{\hbar}} \frac{2^{\frac{E}{2\hbar\omega} + \frac{3}{4}}}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} = d_1 k \cos(2ka) - d_2 k \sin(2ka) & (4.2d) \end{cases}$$

Nella regione ②, di interesse per il calcolo del propagatore, avremo:

$$\psi_E^{(2)}(x) = c \cdot \sqrt{\pi} 2^{E/2\hbar\omega} \left[ \frac{1}{k} \sqrt{\frac{2m\omega}{\hbar}} \frac{2^{1/4}}{\Gamma\left(\frac{1}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \sin(kx) + \frac{2^{-1/4}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \frac{E}{2\hbar\omega}\right)} \cos(kx) \right] \quad (4.3)$$

La normalizzazione di tale autofunzione, moderatamente laboriosa, comporta malauguratamente l'introduzione di ulteriori funzioni  $\Gamma$  di Eulero che non rendono possibile la computazione analitica dell'integrale della forma "esatta" del propagatore  $\int_0^\infty dE \psi_E^{(2)}(x_1) \psi_E^{(2)}(x_2)$ . Ciò ci obbliga alla computazione del propagatore in forma semiclassica, che svolgiamo nella sezione seguente.

## 4.1 Propagatore in approssimazione semiclassica

Al fine di utilizzare la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6) necessitiamo di esplicitare l'azione classica relativa al potenziale della buca di potenziale a pareti elastiche. Nella sezione 3.2 abbiamo già visto come sia conveniente, dal punto di vista del calcolo numerico, traslare il potenziale di  $a$  verso destra. Ovviamente questa traslazione non inficia quello che sarà il risultato finale, ma tenuto presente dai vantaggi conseguiti in passato con questa traslazione, la attueremo anche qui. Andremo inoltre a seguire un ragionamento che presenta varie analogie con quello presentato in sezione 3.3, basato

sull'isocronia dell'oscillazione armonica, ovvero all'invarianza del tempo di permanenza della particella classica nelle regioni ① e ③ rispetto alla velocità iniziale e finale della particella stessa, nonché sull'annullarsi dell'azione classica dell'oscillatore armonico in un semiperiodo che inizia e termina nel minimo del potenziale, cfr. sezione D.1.1. Anche qui, come in sezione 3.3, indichiamo con

$$\tau = \frac{\pi}{\omega}$$

il tempo costante di permanenza nelle regioni ① e ③.

Poiché la nostra regione di interesse per il calcolo del propagatore è la regione ②, ovvero  $0 < x < 2a$ , tratteremo in maniera “effettiva” o “equivalente” il comportamento della particella nelle regioni ① e ③, supponendo che si comportino qui come particelle classiche libere fino ad essere sottoposte ad un “rimbalzo effettivo” con una ipotetica barriera infinita di potenziale posta ad una distanza opportuna, tale da riportare la particella in zona ② esattamente in un tempo  $\tau$ .

Per comprendere questo tipo di ragionamento si può far riferimento alla figura 4.1, dove si evidenzia il fatto che ogni singolo transito nelle regioni dove il potenziale è non nullo si protrae per un tempo  $\tau$  e che questo percorso può essere descritto da un moto libero con un “rimbalzo” elastico dopo una lunghezza effettiva  $l$ . In figura 4.1 sono raffigurate solo le prime quattro tipologie di percorsi possibili, con il numero minore di transizioni nelle regioni a potenziale armonico. In analogia a quanto già fatto nella sezione 3.2, etichettiamo con  $A = 1, 2, 3, 4$  queste quattro classi. Ad ognuna di queste classi apparterranno in generale altre traiettorie classiche (etichettate con  $n$ ), generate da un numero crescente di transizioni nella regione a potenziale armonico a destra e a sinistra.

Evidenziamo a questo punto un aspetto cruciale:

se nel caso della buca infinita di potenziale 3.2 avevamo che ognuna delle quattro classi  $A = 1, 2, 3, 4$  possedeva un numero infinito di traiettorie classiche, in questo caso non sarà più così. Infatti, considerando per esempio la seconda traiettoria raffigurata in figura 4.1, osserviamo come debba essere necessariamente verificata la condizione  $t > \tau$ , affinché il tempo totale di percorrenza della traiettoria classica sia maggiore del tempo di percorrenza di un sottoinsieme proprio della traiettoria stessa. Ovviamente questo discorso è valido in generale: per una traiettoria con  $n$  transizioni nelle regioni a potenziale elastico dovremo imporre la condizione, necessaria per poter descrivere la traiettoria con quel numero  $n$  di transizioni:

$$t > n\tau \tag{4.4}$$

Rimane ora la questione della determinazione della lunghezza “equivalente”  $l$  alla quale supponiamo che la particella, descritta come se fosse libera anche nelle regioni ① e ③, rimbalza in modo elastico, tornando in un tempo  $\tau$  nella regione ②. L'idea di fondo è, in analogia a quanto già fatto nella sezione 3.3.1, individuare la velocità  $v$  nella

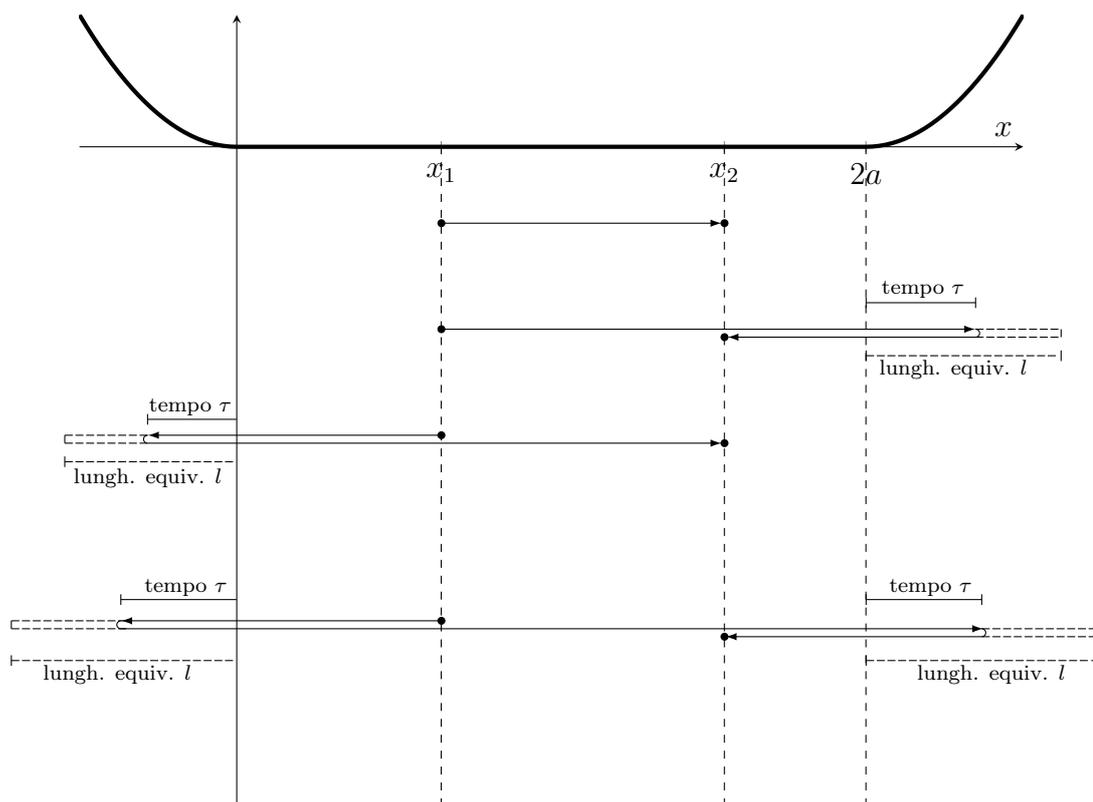


Figura 4.1: Schema delle quattro possibili traiettorie con minor numero di transiti nelle regioni dove il potenziale è non nullo. Le traiettorie rappresentate in figura sono quelle etichettate rispettivamente da  $A = 1$ ,  $A = 2$ ,  $A = 3$  e  $A = 4$ . Tutti gli altri percorsi sono ottenibili tramite iterazione a partire da queste quattro tipologie. Osserviamo che la lunghezza equivalente  $l$ , raffigurata mediante linee tratteggiate, varia a seconda della “classe”  $A$  di appartenenza nonché dal numero di transizioni successive nelle regioni dove il potenziale non è nullo (questo secondo aspetto non è mostrato in figura, ma è abbastanza intuitivo).

---

4.1. Propagatore in approssimazione semiclassica

---

Tabella 4.1: Tabella per la determinazione della lunghezza “equivalente”  $l$  nel caso della seconda traiettoria classica mostrata in figura 4.1, appartenente alla classe  $A = 2$ . Indichiamo con  $2\chi$  la lunghezza reale percorsa nella regione a potenziale non nullo  $x > 2a$ .

	regione ③	regione ②	su tutto $x \in \mathbb{R}$
tempo	$\tau$	$t - \tau$	$t$
lunghezza reale	$2\chi$	$4a - (x_1 + x_2)$	$4a - (x_1 + x_2) + 2\chi$
lunghezza “equivalente”	$2l$	$4a - (x_1 + x_2)$	$4a - (x_1 + x_2) + 2l$
velocità reale	variabile	$ v  = \frac{4a - (x_1 + x_2)}{t - \tau}$	variabile
velocità “equivalente”	$ v  = \frac{4a - (x_1 + x_2)}{t - \tau}$	$ v  = \frac{4a - (x_1 + x_2)}{t - \tau}$	$ v  = \frac{4a - (x_1 + x_2)}{t - \tau}$
$\implies 2l = \frac{4a - (x_1 + x_2)}{t - \tau} \cdot \tau$			

Tabella 4.2: Tabella per la determinazione della lunghezza “equivalente”  $l$  nel caso della terza traiettoria classica mostrata in figura 4.1, appartenente alla classe  $A = 3$ . Indichiamo con  $2\chi$  la lunghezza reale percorsa nella regione a potenziale non nullo  $x < 0$ .

	regione ①	regione ②	su tutto $x \in \mathbb{R}$
tempo	$\tau$	$t - \tau$	$t$
lunghezza reale	$2\chi$	$x_1 + x_2$	$x_1 + x_2 + 2\chi$
lunghezza “equivalente”	$2l$	$x_1 + x_2$	$x_1 + x_2 + 2l$
velocità reale	variabile	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$	variabile
velocità “equivalente”	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$	$ v  = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau}$
$\implies 2l = \frac{x_1 + x_2}{t - \tau} \cdot \tau$			

Tabella 4.3: Tabella per la determinazione della lunghezza “equivalente”  $l$  nel caso della quarta traiettoria classica mostrata in figura 4.1, appartenente alla classe  $A = 4$ . Indichiamo con  $2\chi$  la lunghezza reale percorsa nella regione  $x < 0$ , che è pari a quella percorsa nella regione  $x > 2a$ .

	regioni ① e ③	regione ②	su tutto $x \in \mathbb{R}$
tempo	$2\tau$	$t - 2\tau$	$t$
lunghezza reale	$4\chi$	$4a - (x_2 - x_1)$	$4a - (x_2 - x_1) + 4\chi$
lunghezza “equivalente”	$4l$	$4a - (x_2 - x_1)$	$4a - (x_2 - x_1) + 4l$
velocità reale	variabile	$ v  = \frac{4a - (x_2 - x_1)}{t - \tau}$	variabile
velocità “equivalente”	$ v  = \frac{4a - (x_2 - x_1)}{t - 2\tau}$	$ v  = \frac{4a - (x_2 - x_1)}{t - 2\tau}$	$ v  = \frac{4a - (x_2 - x_1)}{t - 2\tau}$
$\implies 4l = \frac{4a - (x_2 - x_1)}{t - 2\tau} \cdot 2\tau$			

---

regione ② e, sotto le ipotesi di “equivalenza” fatte, imporre che la particella effettiva si muova anche nelle regioni ① e ③ con la stessa velocità  $v$ .

Il calcolo è reso più comprensibile attraverso l’ausilio delle tabelle 4.1, 4.2 e 4.3, relative rispettivamente alla seconda (classe  $A=2$ ), terza (classe  $A=3$ ) e quarta (classe  $A=4$ ) traiettorie classiche rappresentate in figura 4.1. Nelle suddette tabelle sono riportati anche i risultati per le lunghezze “effettive” corrispondenti. Tali risultati, insieme alla formula (C.6) per l’azione della particella libera, consentono di esplicitare l’azione classica relativa alle quattro traiettorie mostrate in figura 4.1:

$$S_{cl}^{(A=1)}(n=0) = \frac{m}{2t}(x_2 - x_1)^2 \quad (4.5)$$

$$S_{cl}^{(A=2)}(n=1) = \frac{m}{2t} \left[ 4a - (x_1 + x_2) + \frac{4a - (x_1 + x_2)}{t - \tau} \cdot \tau \right]^2 \quad \text{con } t > \tau \quad (4.6)$$

$$S_{cl}^{(A=3)}(n=0) = \frac{m}{2t} \left[ x_1 + x_2 + \frac{x_1 + x_2}{t - \tau} \cdot \tau \right]^2 \quad \text{con } t > \tau \quad (4.7)$$

$$S_{cl}^{(A=4)}(n=1) = \frac{m}{2t} \left[ 4a - (x_2 - x_1) + \frac{4a - (x_2 - x_1)}{t - 2\tau} \cdot 2\tau \right]^2 \quad \text{con } t > 2\tau \quad (4.8)$$

Evidenziamo il fatto che si è esplicitata la dipendenza delle azioni classiche non solo dalla classe  $A$ , anche dal numero naturale  $n$ , supponendo, in analogia al caso della buca infinita di potenziale analizzato nella sezione 3.2, che le classi  $A = 1, 3$  partano da  $n = 0$ , mentre le classi  $A = 2, 4$  partano da  $n = 1$ .

Possiamo quindi generalizzare i risultati delle singole classi al caso successivo  $n \mapsto n + 1$ , la cui traiettoria classica prevede ulteriori due “rimbalzi elastici” sulle barriere armoniche di potenziale rispetto al caso  $n$  precedente della medesima classe. A tal fine utilizziamo la funzione a valori interi *floor*, detta anche parte intera, definita da

$$\lfloor x \rfloor = \max\{n \in \mathbb{N} | n \leq x\} \quad (4.9)$$

utile per esplicitare il limite superiore al valore di  $n$  per le varie classi  $A = 1, 2, 3, 4$ . Infatti la condizione necessaria (4.4) si può esprimere anche facendo uso della funzione parte principale:

$$t > n\tau \quad \implies \quad n < \left\lfloor \frac{t}{\tau} \right\rfloor \quad (4.10)$$

Possiamo perciò generalizzare i risultati dell'azione classica delle traiettorie delle singole classi come segue:

$$\begin{aligned}
 S_d^{(1)}(n) &= \frac{m}{2t} \left[ 4na + (x_2 - x_1) + \frac{4na + (x_2 - x_1)}{t - 2n\tau} \cdot 2n\tau \right]^2 \\
 &= \frac{m}{2t} [4na + (x_2 - x_1)]^2 \left[ 1 - \frac{2n\pi}{\omega t} \right]^{-2} \\
 &\quad \text{dove i valori di } n \text{ accettabili sono } n = 0, 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} \right\rfloor. \quad (4.11)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_d^{(2)}(n) &= \frac{m}{2t} \left[ 4na - (x_1 + x_2) + \frac{4na - (x_1 + x_2)}{t - (2n - 1)\tau} \cdot (2n - 1)\tau \right]^2 \\
 &= \frac{m}{2t} [4na - (x_1 + x_2)]^2 \left[ 1 - \frac{(2n - 1)\pi}{\omega t} \right]^{-2} \\
 &\quad \text{dove i valori di } n \text{ accettabili sono } n = 1, 2, 3, \dots, \left\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} + \frac{1}{2} \right\rfloor. \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_d^{(3)}(n) &= \frac{m}{2t} \left[ 4na + (x_1 + x_2) + \frac{4na + (x_1 + x_2)}{t - (2n + 1)\tau} \cdot (2n + 1)\tau \right]^2 \\
 &= \frac{m}{2t} [4na + (x_1 + x_2)]^2 \left[ 1 - \frac{(2n + 1)\pi}{\omega t} \right]^{-2} \\
 &\quad \text{dove i valori di } n \text{ accettabili sono } n = 0, 1, 2, \dots, \left\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} - \frac{1}{2} \right\rfloor. \quad (4.13)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 S_d^{(4)}(n) &= \frac{m}{2t} \left[ 4na - (x_2 - x_1) + \frac{4na - (x_2 - x_1)}{t - 2n\tau} \cdot 2n\tau \right]^2 \\
 &= \frac{m}{2t} [4na - (x_2 - x_1)]^2 \left[ 1 - \frac{2n\pi}{\omega t} \right]^{-2} \\
 &\quad \text{dove i valori di } n \text{ accettabili sono } n = 1, 2, 3, \dots, \left\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} \right\rfloor. \quad (4.14)
 \end{aligned}$$

Prendendo in oggetto tali formule per l'azione classica (che essendo un funzionale dipendente dalla traiettoria dipende dalla classe  $A$  e dal numero naturale  $n$ ), siamo in grado di utilizzare la formula di Pauli - van Vleck - Morette (3.6). Per prima cosa osserviamo che il determinante di van Vleck risulta essere indipendente da  $A$  e da  $n$ :

$$\sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_d^{(A)}(n)}{\partial x_1 \partial x_2} \right|} = \sqrt{\frac{m}{t}} \quad (4.15)$$


---

Ricordiamo inoltre che le traiettorie che prevedono un numero dispari di “rimbalzi elastici”, ovvero quelle delle classi  $A = 2$  e  $A = 3$ , entrano nel propagatore con un fattore  $(-1)$ , come già ampiamente visto in precedenza, in particolare nella nota a piè della pagina 31.

Alla luce di queste osservazioni, possiamo esprimere il propagatore nella sua forma semiclassica come (ricordiamo che  $t = t_2 - t_1$ ):

$$\begin{aligned}
 K_{sc}(x_1, x_2, t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \cdot \left\{ \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} \rfloor} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na + (x_2 - x_1)}{1 - \frac{2n\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] + \sum_{n=1}^{\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} \rfloor} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na - (x_2 - x_1)}{1 - \frac{2n\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \sum_{n=0}^{\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} - \frac{1}{2} \rfloor} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na + (x_1 + x_2)}{1 - \frac{(2n+1)\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] - \sum_{n=1}^{\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} + \frac{1}{2} \rfloor} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na - (x_1 + x_2)}{1 - \frac{(2n-1)\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] \right\} \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

Possiamo anche esplicitare la dipendenza dal suddetto propagatore in forma “semiclassica” in funzione del propagatore della particella libera:

$$\begin{aligned}
 K_{sc}(x_1, x_2; t) &= \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_2 - x_1)^2 \right\} - \\
 &\quad - \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar t} (x_1 + x_2)^2 \right\} + \\
 &\quad + \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \left\{ \sum_{n=1}^{\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} \rfloor} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na + (x_2 - x_1)}{1 - \frac{2n\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] + \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na - (x_2 - x_1)}{1 - \frac{2n\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] \right\} - \\
 &\quad - \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar t}} \left\{ \sum_{n=1}^{\lfloor \frac{\omega t}{2\pi} - \frac{1}{2} \rfloor} \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na + (x_1 + x_2)}{1 - \frac{(2n+1)\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] + \exp \left[ \frac{im}{2\hbar t} \left( \frac{4na - (x_1 + x_2)}{1 - \frac{(2n-1)\pi}{\omega t}} \right)^2 \right] \right\} \quad (4.17)
 \end{aligned}$$

## A.1 Funzione ipergeometrica confluyente ${}_1F_1$

La funzione ipergeometrica confluyente  ${}_1F_1(\alpha, \gamma, z)$  è definita tramite la serie ipergeometrica: [18], [1]

$${}_1F_1(\alpha, \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma} \frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)} \frac{z^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)} \frac{z^3}{3!} + \dots \quad (\text{A.1})$$

Il nostro interesse per la funzione  ${}_1F_1$  risiede nel fatto che esprime le soluzioni dell'equazione di Kummer (1.15): [2]

$$\zeta w''(\zeta) + (\gamma - \zeta)w'(\zeta) - \alpha w(\zeta) = 0 \quad (\text{A.2})$$

che ha soluzione: [18], [23]

$$w(\zeta) = A {}_1F_1(\alpha, \gamma, \zeta) + B \zeta^{1-\gamma} {}_1F_1(\alpha - \gamma + 1, 2 - \gamma, \zeta) \quad (\text{A.3})$$

Altre proprietà interessanti sono le seguenti:

$${}_1F_1(\alpha, \gamma, 0) = 1 \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{d}{dz} {}_1F_1(\alpha, \gamma, z) = \frac{\alpha}{\gamma} {}_1F_1(\alpha + 1, \gamma + 1, z) \quad (\text{A.5})$$

Vale inoltre la seguente importante condizione asintotica: [23], [40]

$$\begin{aligned}
 {}_1F_1(\alpha, \gamma, z) \underset{z \gg 1}{\sim} e^{-i\pi\alpha} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} z^{-\alpha} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\alpha)_s (\alpha - \gamma + 1)_s}{s!} (-z)^{-s} + \\
 + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\gamma - \alpha)_s (1 - \alpha)_s}{s!} z^{-s} \quad (\text{A.6})
 \end{aligned}$$

Il primo termine è sottodominante rispetto al secondo, a meno che  $\alpha$  non assuma il valore 0 oppure quello di un intero negativo. Escludendo questi casi particolari, in cui in realtà la funzione ipergeometrica confluyente diventa un polinomio a causa del troncamento della sua serie definitiva (A.1), possiamo assumere il seguente andamento asintotico per la funzione  ${}_1F_1(\alpha, \gamma, z)$  sotto l'ipotesi  $z \gg 1$ :

$${}_1F_1(\alpha, \gamma, z) \underset{z \gg 1}{\sim} \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z z^{\alpha-\gamma} \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(\gamma - \alpha)_s (1 - \alpha)_s}{s!} z^{-s} \quad (\text{A.7})$$

dove con  $(a)_s$  indichiamo il simbolo di Pochhammer:

$$(a)_s = \frac{\Gamma(a + s)}{\Gamma(a)} = a(a + 1)(a + 2) \dots (a + s - 1) \quad (\text{A.8})$$

## A.2 Funzione $\theta_3(z, \tau)$ di Jacobi

Innanzitutto evidenziamo la definizione di “nome” relativo ad un parametro  $\tau$ :

$$q = e^{i\pi\tau} \quad (\text{A.9})$$

Grazie a questa definizione possiamo definire [6] [11] la funzione  $\theta_3$  come:

$$\boxed{\theta_3(z, \tau) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} q^{n^2} \cos(2nz)} \quad (\text{A.10})$$

Osserviamo immediatamente come  $\theta_3(z, \tau)$  sia una funzione pari rispetto alla variabile  $z$ , ereditando questa proprietà dalla funzione coseno. Inoltre possiamo evidenziare le proprietà di periodicità della funzione  $\theta_3(z, \tau)$ :

$$\theta_3(z, \tau) = \theta_3(z + \pi, \tau) \quad (\text{A.11})$$

$$\theta_3(z, \tau) = q e^{2iz} \theta_3(z + \pi\tau, \tau) \quad (\text{A.12})$$

Una ulteriore importante proprietà è la formula, ricavata da Poisson nel 1827: [6]

$$\boxed{\theta_3(z, \tau) = (-i\tau)^{-1/2} e^{\frac{z^2}{i\pi\tau}} \theta_3\left(\frac{z}{\tau}, -\frac{1}{\tau}\right)} \quad (\text{A.13})$$

## A.3 Equazione differenziale e funzioni di Whittaker

Il nostro interesse alla funzione di Whittaker  $W_{\lambda,\mu}(z)$  risiede nel fatto che è una possibile soluzione dell'equazione differenziale di Whittaker: [38] [5]

$$\frac{d^2W(z)}{dz^2} + \left( -\frac{1}{4} + \frac{\lambda}{z} + \frac{\frac{1}{4} - \mu^2}{z^2} \right) W(z) = 0 \quad (\text{A.14})$$

che ha come due soluzioni linearmente indipendenti le funzioni di Whittaker  $M_{\lambda,\mu}(z)$  e  $W_{\lambda,\mu}(z)$ , definite da:

$$M_{\lambda,\mu}(z) = z^{\mu+\frac{1}{2}} e^{\frac{z}{2}} {}_1F_1 \left( \mu - \lambda + \frac{1}{2}, 2\mu + 1, z \right) \quad (\text{A.15})$$

$$W_{\lambda,\mu}(z) = \frac{\Gamma(-2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} - \mu\lambda)} M_{\lambda,\mu}(z) + \frac{\Gamma(2\mu)}{\Gamma(\frac{1}{2} + \mu\lambda)} M_{\lambda,-\mu}(z) \quad (\text{A.16})$$

Il nostro interesse all'equazione (A.14) di Whittaker deriva dalla sua effettiva equivalenza all'equazione di Kummer, che viene dimostrata nella seguente sottosezione.

### A.3.1 Equivalenza equazioni differenziali di Kummer e Whittaker

Partiamo dall'equazione (1.15) di Kummer e vediamo come sia possibile giungere all'equazione di Whittaker. Prendiamo l'equazione di Kummer:

$$z \frac{d^2}{dz^2} f(z) + (\gamma - z) \frac{d}{dz} f(z) - \alpha f(z) = 0 \quad (\text{A.17})$$

e definiamo la funzione  $W(z) = z^{\gamma/2} e^{-z/2} f(z)$ , allora:

$$f(z) = z^{-\gamma/2} e^{z/2} W(z) \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{d}{dz} f(z) = e^{z/2} \left( -\frac{\gamma}{2} z^{-\frac{\gamma}{2}-1} W(z) + z^{-\gamma/2} \frac{dW(z)}{dz} + \frac{1}{2} z^{-\gamma/2} W(z) \right) \quad (\text{A.19})$$

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dz^2} f(z) = e^{z/2} \left[ \left( \frac{\gamma}{2} + 1 \right) \frac{\gamma}{2} z^{-\frac{\gamma}{2}-2} W(z) - \gamma z^{-\frac{\gamma}{2}-1} \frac{d}{dz} W(z) - \right. \\ \left. - \frac{\gamma}{2} z^{-\frac{\gamma}{2}-1} W(z) + z^{-\frac{\gamma}{2}} \frac{d^2}{dz^2} W(z) + z^{-\frac{\gamma}{2}} \frac{d}{dz} W(z) + \frac{1}{4} z^{-\frac{\gamma}{2}} W(z) \right] \quad (\text{A.20}) \end{aligned}$$

Sostituendo queste tre espressioni nell'equazione (A.17) ed attuando le opportune semplificazioni otteniamo:

$$\frac{d^2}{dz^2}W(z) + \left[ -\frac{1}{4} + \frac{\frac{\gamma}{2} - \alpha}{z} + \frac{\frac{\gamma}{2} \left(1 - \frac{\gamma}{2}\right)}{z^2} \right] W(z) = 0 \quad (\text{A.21})$$

che coincide esattamente con la (A.14) con le identificazioni:

$$\lambda = \frac{\gamma}{2} - \alpha \quad \mu = \frac{\gamma - 1}{2} \quad (\text{A.22})$$

Ciò significa allora che possiamo scrivere anche in un altro modo la soluzione più generale dell'equazione di Kummer (A.17):

$$f(z) = A \cdot e^{z/2} z^{-\gamma/2} M_{\frac{\gamma}{2}-\alpha, \frac{\gamma-1}{2}}(z) + B \cdot e^{z/2} z^{-\gamma/2} W_{\frac{\gamma}{2}-\alpha, \frac{\gamma-1}{2}}(z) \quad (\text{A.23})$$

### A.3.2 Proprietà delle funzioni di Whittaker

La funzione  $W_{\lambda, \mu}(z)$  di Whittaker possiede il seguente andamento asintotico, valido nel limite  $z \gg 1$ : [18]

$$W_{\lambda, \mu}(z) \underset{z \gg 1}{\sim} e^{-z/2} z^\lambda \left( 1 + \frac{\sum_{k=1}^{\infty} \left[ \mu^2 - \left(\lambda - \frac{1}{2}\right)^2 \right] \left[ \mu^2 - \left(\lambda - \frac{3}{2}\right)^2 \right] \dots \left[ \mu^2 - \left(\lambda - k + \frac{1}{2}\right)^2 \right]}{k! z^k} \right) \quad (\text{A.24})$$

L'andamento della funzione  $M_{\lambda, \mu}(z)$  non è stato reperito esplicitamente in letteratura ma è desumibile dalla sua definizione e dall'andamento (A.7) della funzione  ${}_1F_1(\alpha, \gamma, z)$  e risulta essere:

$$M_{\lambda, \mu}(z) \underset{z \gg 1}{\sim} \frac{z^{-\lambda} e^{z/2}}{\Gamma\left(\mu - \lambda + \frac{1}{2}\right)} \quad (\text{A.25})$$

Osserviamo quindi come le due funzioni di Whittaker abbiano un comportamento diametralmente opposto nel limite di grandi argomenti, derivanti dall'opposto segno nell'esponenziale che compare in entrambi gli andamenti:

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} W_{\lambda, \mu}(z) = 0$$

$$\lim_{z \rightarrow +\infty} M_{\lambda, \mu}(z) = \infty$$

Inoltre il fatto che l'annullarsi della funzione  $W_{\lambda, \mu}(z)$  sia di tipo esponenziale la rende una funzione potenzialmente quadrato-sommabile, almeno per quanto riguarda l'infinito. C'è

però una questione riguardo alla sommabilità  $L^2$  della funzione  $W_{\lambda,\mu}(z)$  di Whittaker: il punto  $x = 0$  è un punto singolare per questa funzione e necessita di un qualche tipo di regolarizzazione. Si dimostra che è sufficiente un fattore  $x^{-\frac{1}{2}}$  per rendere sommabile la funzione e non solo, poiché il risultato dell'integrale in questione è noto: [7]

$$\int_0^\infty dz \left[ \frac{1}{\sqrt{z}} W_{\lambda,\mu}(z) \right]^2 = \frac{\pi}{\sin(2\pi\mu)} \cdot \frac{\psi\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda\right) - \psi\left(\frac{1}{2} - \mu - \lambda\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda\right) \Gamma\left(\frac{1}{2} + \mu - \lambda\right)} \quad (\text{A.26})$$

dove la funzione digamma  $\psi(x)$  è definita come la derivata logaritmica della funzione  $\Gamma(x)$  di Eulero:

$$\psi(x) = \frac{d}{dx} \ln \Gamma(x) \quad (\text{A.27})$$

La derivata della funzione  $W_{\lambda,\mu}(z)$  si può ricavare dalla formula ricorsiva seguente: [7]

$$z \frac{d}{dz} W_{\lambda,\mu}(z) = \left( \lambda - \frac{z}{2} \right) W_{\lambda,\mu}(z) - \left[ \mu^2 - \left( \lambda - \frac{1}{2} \right)^2 \right] W_{\lambda-1,\mu}(z) \quad (\text{A.28})$$

Quando poi il secondo parametro  $\mu$  della funzione di Whittaker  $W_{\lambda,\mu}(z)$  assume il valore  $\frac{1}{4}$  si ricade in una serie di circostanze interessanti e favorevoli:

$$\lim_{z \rightarrow 0} z^{-1/4} W_{\lambda, \frac{1}{4}}(z) = \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{3}{4} - \lambda\right)} \quad (\text{A.29})$$

Inoltre è possibile passare dall'utilizzo della funzione di Whittaker alla funzione parabolica del cilindro, come si vede dalla definizione (A.30)

## A.4 Funzione parabolica del cilindro $D_p(z)$

La funzione parabolica del cilindro  $D_p(z)$  è una funzione reale (nell'ipotesi  $p \in \mathbb{R}$ ,  $z \in \mathbb{R}$ ), definita partendo dalla funzione di Whittaker come segue:

$$D_p(z) = 2^{\frac{1}{4} + \frac{p}{2}} z^{-1/2} W_{\frac{1}{4} + \frac{p}{2}, \frac{1}{4}}\left(\frac{z^2}{2}\right) \quad (\text{A.30})$$

La funzione parabolica del cilindro è una sorta di generalizzazione a parametri continui dei polinomi di Hermite, valendo la seguente proprietà per parametri  $p = n \in \mathbb{N}$ :

$$D_n(z) = 2^{-\frac{n}{2}} e^{-\frac{z^2}{4}} H_n\left(\frac{z}{\sqrt{2}}\right) \quad (\text{A.31})$$

Un suo valore particolare, di interesse nel nostro caso, è il valore per  $z = 0$ :

$$D_p(0) = \frac{\sqrt{\pi} 2^{p/2}}{\Gamma\left(\frac{1-p}{2}\right)} \quad (\text{A.32})$$

Questo risultato è facilmente comprensibile se si tiene conto di una definizione alternativa della funzione parabolica del cilindro: [18]

$$D_p(z) = 2^{p/2} e^{-\frac{z^2}{4}} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{1-p}{2}\right)} {}_1F_1\left(-\frac{p}{2}, \frac{1}{2}, \frac{z^2}{2}\right) - \frac{\sqrt{2\pi}z}{\Gamma\left(-\frac{p}{2}\right)} {}_1F_1\left(\frac{1-p}{2}, \frac{3}{2}, \frac{z^2}{2}\right) \right\} \quad (\text{A.33})$$

e ricordando che  ${}_1F_1(\alpha, \beta, 0) = 1$ .

Tali funzioni sono inoltre  $L^2$ -sommabili, in virtù del seguente sviluppo asintotico valido per grandi valori assoluti di  $z$ : [18]

$$D_n(z) \underset{|z| \gg 1}{\sim} e^{-\frac{z^2}{4}} z^p \quad (\text{A.34})$$

È noto inoltre il valore dell'integrale sull'asse reale positivo del quadrato della funzione, che sappiamo essere finito a causa della sommabilità  $L^2$  della  $D_p(z)$ : [18]

$$\int_0^\infty dz [D_p(z)]^2 = \sqrt{\pi} 2^{-3/2} \frac{\psi\left(\frac{1}{2} - \frac{1}{2}p\right) - \psi\left(-\frac{1}{2}p\right)}{\Gamma(-p)} \quad (\text{A.35})$$

Inoltre, sotto l'ipotesi  $\mu \neq \nu$ , vale che: [18]

$$\int_0^\infty dz D_\mu(z) D_\nu(z) = \frac{\pi 2^{\frac{1}{2}(\mu+\nu+1)}}{\mu - \nu} \left[ \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1-\mu}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{\nu}{2}\right)} - \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1-\nu}{2}\right) \Gamma\left(-\frac{\mu}{2}\right)} \right] \quad (\text{A.36})$$

La derivata della funzione parabolica del cilindro  $D_p(z)$  è:

$$\frac{d}{dz} D_p(z) = \frac{z D_p(z)}{2} - D_{p+1}(z) \quad (\text{A.37})$$

Il nostro interesse per la funzione parabolica del cilindro scaturisce principalmente a causa del suo essere soluzione dell'equazione differenziale di Weber:

$$\frac{d^2}{dz^2} f(z) + \left( p + \frac{1}{2} - \frac{z^2}{4} \right) f(z) = 0 \quad (\text{A.38})$$

*N.B.* Sono soluzioni dell'equazione di Weber, tutte linearmente dipendenti fra di loro, le funzioni  $D_p(z)$ ,  $D_p(-z)$ ,  $D_{-p-1}(iz)$  e  $D_{-p-1}(-iz)$ . [18]

---

## Calcolo naïve di alcuni integrali trigonometrici divergenti

---

In questa appendice consideriamo alcuni integrali trigonometrici di utilità nella normalizzazione di funzioni d'onda piane. Occorre precisare che, in termini rigorosi, tali integrazioni non sarebbero possibili poiché gli integrali formalmente non convergono; tuttavia è possibile trovare alcuni metodi di regolarizzazione che rendono veritiere le seguenti formule naïve.

### B.1 Integrale $\int_0^\infty dx \sin(kx) \sin(k'x)$

Questo integrale è di utilità nella normalizzazione delle autofunzioni nel caso del potenziale (3.7) e del potenziale (3.110). Ricordiamo (2.6) che:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

Calcoliamoci quindi l'integrale, ponendo d'ora in poi  $I = \int_0^\infty dx \sin(kx) \sin(k'x)$

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^\infty dx \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) \sin\left(\frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}x\right) \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^\infty dx \sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) \sin\left(\frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}x\right) \\
 &= -\frac{1}{8} \int_{-\infty}^\infty dx \left[ \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) - \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x\right) \right] \\
 &\quad \cdot \left[ \exp\left(i\frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}x\right) - \exp\left(-i\frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}x\right) \right].
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

Moltiplicando gli esponenziali dentro le parentesi quadre otteniamo:

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{1}{8} \int_{-\infty}^\infty dx \left\{ -\exp\left[i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right)x\right] + \right. \\
 &\quad + \exp\left[i\left(-\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right)x\right] + \exp\left[i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right)x\right] - \\
 &\quad \left. - \exp\left[-i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right)x\right] \right\}
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

Osserviamo che compaiono quattro integrali di esponenziali di tipo onda piana, essenzialmente di due tipi che qui di seguito analizziamo, sfruttando la formula della rappresentazione integrale della  $\delta$  di Dirac  $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx}$ :

$$\frac{1}{8} \int_{-\infty}^\infty dx \exp\left[i\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right)x\right] = \frac{\pi}{4} \delta\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} + \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar}\right) \tag{B.3}$$

Possiamo perciò riscrivere l'integrale in una forma generale molto utile:

$$\boxed{I = \frac{\pi}{2} \delta(k + k')} \tag{B.4}$$

Volendo proseguire oltre col calcolo, utilizzando la forma esplicita della  $k$  e le due seguenti proprietà della  $\delta$ :

$$\delta(\alpha x) = \frac{1}{|\alpha|} \delta(x) \qquad \delta[f(x)] = \frac{1}{|f'(x_0)|} \delta(x - x_0) \tag{B.5}$$

otteniamo subito che questo primo tipo di integrale non dà contributi, poiché l'argomento della  $\delta$  non si annulla mai. In modo assolutamente analogo calcoliamo il secondo tipo di integrale che invece risulterà non nullo:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{8} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp \left[ i \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar} \right) x \right] &= \frac{\pi}{4} \delta \left( \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2mE'}}{\hbar} \right) \\
 &= \frac{\pi \hbar}{4} \delta \left( \sqrt{2mE} - \sqrt{2mE'} \right) \\
 &= \frac{\pi \hbar}{4} \frac{1}{\left| \frac{m}{\sqrt{2mE'}} \right|} \delta(E - E') \\
 &= \frac{\pi \hbar}{2} \sqrt{\frac{E}{2m}} \delta(E - E')
 \end{aligned} \tag{B.6}$$

Osservando l'espressione (B.2), osserviamo che abbiamo solo due contributi non nulli del tipo appena calcolato, per cui:

$$\boxed{I = \pi \hbar \sqrt{\frac{E}{2m}} \delta(E - E') = \frac{\pi \hbar^2 k}{2m} \delta(E - E')} \tag{B.7}$$

### B.1.1 Variante dell'integrale

Una possibile variante dell'integrale  $I$  in questione è la seguente:

$$\tilde{I} = \int_0^\infty dx \sin(\chi x) \sin(\chi' x) \tag{B.8}$$

dove, cfr. equazione (3.130):

$$\chi = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Possiamo utilizzare direttamente il risultato (B.4) e scrivere:

$$\tilde{I} = \frac{\pi}{2} \delta(\chi - \chi') \tag{B.9}$$

Utilizzando dunque le proprietà della delta di Dirac (B.5) possiamo scrivere:

$$\begin{aligned}
 \tilde{I} &= \frac{\pi}{2} \delta \left( \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar} - \frac{\sqrt{2m(E' - V_0)}}{\hbar} \right) \\
 &= \frac{\pi \hbar}{2} \delta(\sqrt{2m(E - V_0)} - \sqrt{2m(E' - V_0)}) \\
 &= \frac{\pi \hbar}{2} \frac{1}{\sqrt{\frac{m}{2(E_1 - V_0)}}} \delta(E_1 - E_2) \\
 &= \pi \hbar \sqrt{\frac{E_1 - V_0}{2m}} \delta(E_1 - E_2)
 \end{aligned} \tag{B.10}$$

Facendo uso della definizione (3.130) della  $\chi$  otteniamo infine un risultato analogo al precedente:

$$\boxed{\tilde{I} = \pi \hbar \sqrt{\frac{E - V_0}{2m}} \delta(E - E') = \frac{\pi \hbar^2 \chi}{2m} \delta(E - E')} \tag{B.11}$$

## B.2 Integrale $\int_0^\infty dx \cos(kx) \cos(k'x)$

È possibile calcolare l'integrale  $I = \int_0^\infty dx \cos(kx) \cos(k'x)$  in maniera assolutamente analoga al caso precedente (B.7), e si verifica che anche il risultato è uguale:

$$\begin{aligned}
 I &= \int_0^\infty dx \cos(kx) \cos(k'x) \\
 &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \cos(kx) \cos(k'x) \\
 &= \frac{1}{8} \int_{-\infty}^{+\infty} dx (e^{ikx} + e^{-ikx}) (e^{ik'x} + e^{-ik'x}) \\
 &= \frac{1}{8} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \left[ e^{i(k+k')x} + e^{-i(k-k')x} + e^{i(k-k')x} + e^{-i(k+k')x} \right] \\
 &= \frac{\pi}{2} \delta(k - k') + \frac{\pi}{2} \delta(k + k') \\
 &= \frac{\pi}{2} \delta(k - k')
 \end{aligned} \tag{B.12}$$

A questo punto è facile concludere, facendo riferimento alla sezione precedente e al risultato (B.7), che:

$$\boxed{I = \pi \hbar \sqrt{\frac{E}{2m}} \delta(E - E') = \frac{\pi \hbar^2 k}{2m} \delta(E - E')} \tag{B.13}$$

### B.3 Integrale $\int_0^\infty dx \sin(kx) \cos(k'x)$

L'integrale  $I = \int_0^\infty dx \sin(kx) \cos(k'x)$  si può regolarizzare in diversi modi: qui di seguito ne esponiamo solamente due. Il risultato risulta essere comunque coerente e pari a:

$$I = \frac{k}{k^2 - k'^2} \quad (\text{B.14})$$

#### B.3.1 Metodo di regolarizzazione 1

Il primo metodo di regolarizzazione dell'integrale  $I = \int_0^\infty dx \sin(k_1x) \cos(k_2x)$  ne prevede la riscrittura sotto forma di esponenziali attraverso la formula di Eulero e di seguito l'aggiunta di un termine non oscillante dipendente da una piccola quantità positiva  $\varepsilon > 0$  che garantisce la convergenza:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{4i} \int_0^\infty dx (e^{ikx} - e^{-ikx}) (e^{ik'x} + e^{-ik'x}) \\ &= \frac{1}{4i} \int_0^\infty dx (e^{i(k+k')x} - e^{-i(k-k')x} + e^{i(k-k')x} - e^{-i(k+k')x}) \\ &= \frac{1}{4i} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty dx (e^{i(k+k'+i\varepsilon)x} - e^{-i(k-k'-i\varepsilon)x} + e^{i(k-k'+i\varepsilon)x} - e^{-i(k+k'+i\varepsilon)x}) \\ &= \frac{1}{4i} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{i}{k+k'+i\varepsilon} - \frac{i}{-k+k'+i\varepsilon} + \frac{i}{k-k'+i\varepsilon} - \frac{i}{-k-k'+i\varepsilon} \right) \\ &= \frac{1}{4} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left( \frac{1}{k+k'+i\varepsilon} + \frac{1}{k+k'-i\varepsilon} + \frac{1}{k-k'+i\varepsilon} + \frac{1}{k-k'-i\varepsilon} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

Osserviamo come sia stato introdotto il termine  $+i\varepsilon$  nell'esponenziale per garantire la convergenza e consentire quindi l'applicazione della formula:

$$\int_0^\infty dx e^{-\alpha x} = \frac{1}{\alpha} \quad (\text{B.16})$$

Proseguiamo il calcolo utilizzando la formula:

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{x} \right) + i\pi\delta(x) \quad (\text{B.17})$$

Dove con  $\mathcal{P}$  denotiamo la parte principale di Cauchy. Ciò inoltre comporta che:

$$\frac{1}{x+i\varepsilon} + \frac{1}{x-i\varepsilon} = \mathcal{P} \left( \frac{1}{x} \right) \quad (\text{B.18})$$

Di conseguenza, applicando questi risultati all'integrale in questione, otteniamo finalmente:

$$\begin{aligned}
 I &= \frac{1}{4} \left[ \mathcal{P} \left( \frac{1}{k+k'} \right) + \mathcal{P} \left( \frac{1}{k-k'} \right) \right] \\
 &= \frac{1}{2} \left( \frac{1}{k+k'} + \frac{1}{k-k'} \right) \\
 &= \frac{k}{k^2 - k'^2}
 \end{aligned} \tag{B.19}$$

### B.3.2 Metodo di regolarizzazione 2

Il secondo metodo che qui presentiamo fa uso dell'identità trigonometrica [39]

$$\sin(kx) \cos(k'x) = \frac{1}{2} \{ \sin[(k+k')x] + \sin[(k-k')x] \}$$

che permette di scrivere l'integrale in questione come:

$$I = \frac{1}{2} \int_0^\infty dx \sin[(k+k')x] + \frac{1}{2} \int_0^\infty dx \sin[(k-k')x] \tag{B.20}$$

Ovviamente anche questi due identici integrali necessitano di una regolarizzazione per essere definiti correttamente, perciò andiamo ad analizzare l'integrale:

$$\tilde{I} = \int_0^\infty dx \sin(\alpha x) \tag{B.21}$$

La regolarizzazione di  $\tilde{I}$  consiste nell'inserimento di un fattore  $e^{-\varepsilon x}$ . Procediamo quindi con due integrazioni per parti successive:

$$\begin{aligned}
 \int_0^\infty dx e^{-\varepsilon x} \sin(\alpha x) &= -\frac{e^{-\varepsilon x}}{\varepsilon} \sin(\alpha x) \Big|_0^\infty - \frac{-\alpha}{\varepsilon} \int_0^\infty dx e^{-\varepsilon x} \cos(\alpha x) \\
 &= \frac{\alpha}{\varepsilon} \int_0^\infty dx e^{-\varepsilon x} \cos(\alpha x) \\
 &= -\frac{\alpha}{\varepsilon^2} e^{-\varepsilon x} \cos(\alpha x) \Big|_0^\infty - \frac{\alpha^2}{\varepsilon^2} \int_0^\infty dx e^{-\varepsilon x} \sin(\alpha x) \\
 &= \frac{\alpha}{\varepsilon^2} - \frac{\alpha^2}{\varepsilon^2} \int_0^\infty dx e^{-\varepsilon x} \sin(\alpha x)
 \end{aligned} \tag{B.22}$$

Ovvero abbiamo ottenuto:

$$\tilde{I}_\varepsilon = \frac{\alpha}{\varepsilon^2} - \frac{\alpha^2}{\varepsilon^2} \tilde{I}_\varepsilon \quad \Longrightarrow \quad \tilde{I}_\varepsilon = \frac{\alpha}{\alpha^2 + \varepsilon^2} \quad \Longrightarrow \quad \tilde{I} = \frac{1}{\alpha}$$

Prendendo il limite  $\varepsilon \rightarrow 0$  abbiamo cioè ottenuto che:

$$\int_0^\infty dx \sin(\alpha x) = \frac{1}{\alpha} \tag{B.23}$$

Ciò implica che:

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} \frac{1}{k+k'} + \frac{1}{2} \frac{1}{k-k'} \\ &= \frac{k}{k^2 - k'^2} \end{aligned} \tag{B.24}$$



### C.1 Azione particella libera

L'azione classica è definita come integrale temporale della lagrangiana, che nel caso libero è banalmente

$$\mathcal{L}^{(0)}(x, \dot{x}, t) = \frac{m\dot{x}^2(t)}{2} \quad (\text{C.1})$$

Integrando per parti ed utilizzando il fatto che  $\ddot{x} = 0$  (equazione del moto) riusciamo a calcolarci l'azione classica della particella libera:

$$\begin{aligned} S_{cl}^{(0)} &= \int_{t_1}^{t_2} d\tau \frac{m\dot{x}^2(\tau)}{2} \\ &= \frac{m}{2} \bar{x}(\tau) \dot{\bar{x}}(\tau) \Big|_{t_1}^{t_2} \end{aligned} \quad (\text{C.2})$$

dove  $\bar{x}(\tau)$  è la traiettoria classica:

$$\bar{x}(\tau) = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1}(\tau - t_1) + x_1 \quad (\text{C.3})$$

e ovviamente

$$\dot{\bar{x}}(\tau) = \frac{x_2 - x_1}{t_2 - t_1} \quad (\text{C.4})$$

da cui

$$\bar{x}(\tau) \dot{\bar{x}}(\tau) \Big|_{t_1}^{t_2} = \frac{(x_2 - x_1)^2}{t_2 - t_1} \quad (\text{C.5})$$

Se indichiamo con  $l = x_2 - x_1$  la distanza percorsa e con  $t = t_2 - t_1$  il tempo impiegato abbiamo che:

$$\boxed{S_{cl}^{(0)} = \frac{ml^2}{2t}} \quad (\text{C.6})$$

## C.2 Propagatore particella libera

Alla luce del risultato ottenuto nella precedente sottosezione è semplice calcolare il propagatore della particella libera, utilizzando per esempio la formula di Pauli - van Vleck - Morette che in questo caso risulta essere una formula esatta. [29]

Innanzitutto calcoliamoci il determinante di van Vleck utilizzando il risultato (C.6):

$$\sqrt{\left| \frac{\partial^2 S_{cl}^{(0)}}{\partial x_1 \partial x_2} \right|} = \sqrt{\left| -\frac{m}{t} \right|} = \sqrt{\frac{m}{t}} \quad (\text{C.7})$$

da cui, applicando la formula (3.6):

$$\boxed{K^{(0)}(x_1, x_2; t) = \sqrt{\frac{m}{2i\pi\hbar t}} \exp\left(\frac{iml^2}{2\hbar t}\right)} \quad (\text{C.8})$$

## D.1 Azione classica oscillatore armonico

L'azione classica dell'oscillatore armonico è: [35]

$$S_{cl}(x_2; x_1, t) = \frac{m\omega}{2 \sin(\omega t)} [(x_2^2 + x_1^2) \cos(\omega t) - 2x_1 x_2] \quad (\text{D.1})$$

Già da questa formula si evince che l'azione classica per una traiettoria che inizia e termina nel punto  $x_1 = x_2 = 0$  sia sempre nullo, tuttavia esplicitiamo questa utile e importante proprietà nella successiva sottosezione con maggior dettaglio.

### D.1.1 Il contributo all'azione classica di un “rimbalzo elastico” su un potenziale armonico è nullo

Consideriamo la traiettoria classica di un punto materiale soggetto a potenziale armonico  $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$  nella regione delle  $x < 0$ . Supponiamo inoltre che questa traiettoria parta da  $x = 0$  con una velocità  $-v$ , preveda un “rimbalzo elastico” nel semiasse negativo delle  $x$  e infine termini ancora nel punto  $x = 0$  con velocità finale  $+v$  dopo un tempo pari a  $\frac{\pi}{\omega}$ .

Sappiamo [24] che tutte le traiettorie classiche armoniche  $x(\tau)$  sono esprimibili come somma di seni e coseni:

$$x(\tau) = A \sin(\omega\tau) + B \cos(\omega\tau) \quad (\text{D.2})$$

con  $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$ . Nel caso della traiettoria classica sopra descritta le condizioni iniziali impongono che  $B = 0$  e  $A\omega = -v$ , per cui la traiettoria classica ipotizzata sarà:

$$x(\tau) = -\frac{v}{\omega} \sin(\omega\tau) \quad (\text{D.3})$$

e ovviamente

$$\dot{x}(\tau) = -v \cos(\omega\tau) \quad (\text{D.4})$$

Siamo quindi in grado di calcolarci l'azione classica associata a questo tipo di traiettoria (che indichiamo con  $S_{cl}^{\checkmark}$ ), che risulterà essere nulla indipendentemente dal valore numerico di  $v$ :

$$\begin{aligned} S_{cl}^{\checkmark} &= \int_0^{\pi/\omega} d\tau \mathcal{L}(x(\tau), \dot{x}(\tau)) \\ &= \int_0^{\pi/\omega} d\tau \left( \frac{m}{2} \dot{x}(\tau)^2 - \frac{k}{2} x(\tau)^2 \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_0^{\pi/\omega} d\tau \left( mv^2 \cos^2(\omega\tau) - k \frac{v^2}{\omega^2} \sin^2(\omega\tau) \right) \\ &= \frac{mv^2}{2} \int_0^{\pi/\omega} d\tau \cos(2\omega\tau) \\ &= \frac{mv^2}{4\omega} \sin(y) \Big|_{y=0}^{y=2\pi} \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

## D.2 Aspetti quantistici dell'oscillatore armonico

Lo spettro energetico dell'oscillatore armonico è semplicemente: [25] [8] [34] [16]

$$E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \quad (\text{D.6})$$

Le autofunzioni sono:

$$\psi_n(x) = \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \exp \left\{ -\frac{m\omega x^2}{2\hbar} \right\} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x \right) \quad (\text{D.7})$$

dove  $H_n$  sono i polinomi di Hermite: [1]

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (\text{D.8})$$

### D.2.1 Propagatore dell'oscillatore armonico

Il propagatore dell'oscillatore armonico risulta essere, ponendo  $t = t_2 - t_1$ : [20] [28] [4] [3]

$$K(x_2, t_2; x_1, t_1) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}} \cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega t) - 2x_1 x_2] \right\} \quad (D.9)$$

Questo risultato è molto importante, tra l'altro, perché ci consente di conoscere un risultato in particolare di una serie del tipo

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{q^n}{n!} H_n(x) H_n(y)$$

che non risulta né risolvibile né tabulata nelle tavole di serie e integrali consultate. Infatti possiamo riscrivere il propagatore dell'oscillatore armonico, facendo uso delle formule (D.6) e (D.7), come:

$$\begin{aligned} K(x_1; x_2; t) &= \langle x_2 | e^{\frac{i}{\hbar} H t} | x_1 \rangle \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} e^{i\omega t(n+\frac{1}{2})} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \frac{1}{2^n n!} \exp \left\{ -\frac{m\omega}{2\hbar} (x_1^2 + x_2^2) \right\} \cdot \\ &\quad \cdot H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) \\ &= e^{\frac{i\omega t}{2}} e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} (x_1^2 + x_2^2)} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{1/2} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{e^{i\omega t}}{2} \right)^n \frac{1}{n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) \end{aligned} \quad (D.10)$$

D'altra parte il propagatore sappiamo che è nella forma (D.9), per cui possiamo scrivere il risultato della serie altrimenti non risolvibile:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{e^{i\omega t}}{2} \right)^n \frac{1}{n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) &= \\ = e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{\frac{m\omega}{2\hbar} (x_1^2 + x_2^2)} \left( \frac{m\omega}{\hbar\pi} \right)^{-\frac{1}{2}} \cdot \\ \cdot \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}} \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega t) - 2x_1 x_2] \right\} \end{aligned} \quad (D.11)$$

$$\begin{aligned}
 \sum_{n=0}^{\infty} \left( \frac{e^{i\omega t}}{2} \right)^n \frac{1}{n!} H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_1 \right) H_n \left( \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x_2 \right) = \\
 = e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{\frac{m\omega}{2\hbar}(x_1^2+x_2^2)} \sqrt{\frac{1}{2i \sin(\omega t)}} \cdot \\
 \cdot \exp \left\{ i \frac{m\omega}{2\hbar \sin(\omega t)} [(x_1^2 + x_2^2) \cos(\omega t) - 2x_1 x_2] \right\} \quad (D.12)
 \end{aligned}$$

La trattazione degli aspetti quantistici del potenziale (1.1)

$$V(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}k(x+a)^2 & \text{se } x < -a \\ 0 & \text{se } -a \leq x < a \\ \frac{1}{2}k(x-a)^2 & \text{se } x \geq a \end{cases}$$

esposta nel corso della tesi copre solo una parte degli aspetti peculiari del potenziale in oggetto, tuttavia non è stato raro imbattersi in alcune osservazioni interessanti.

La parte di calcolo relativa alla computazione delle autofunzioni energetiche ha permesso di mettere nuovamente in luce la sostanziale equivalenza delle equazioni differenziali di Kummer e di Whittaker in generale nonché, nel caso particolare preso in analisi, delle prime due e dell'equazione differenziale di Weber, evidenziando di conseguenza le relazioni funzionali fra la funzione ipergeometrica confluyente, la funzione  $W$  di Whittaker e la funzione parabolica del cilindro.

Per quanto riguarda lo spettro energetico, citiamo nuovamente qui la rilevazione della struttura a parità alternate, il suo comportamento nel limite di grandi  $k$  che conduce, come era lecito attendersi, allo spettro della buca infinita, nonché l'osservazione (non affatto banale e per certi versi inattesa) del fatto che, neanche nel limite di alte energie, lo spettro discreto del potenziale (1.1) presenti la caratteristica, tipica dello spettro energetico dell'oscillatore armonico, dell'equidistanza fra livelli energetici.

Per quanto riguarda invece la parte dei propagatori quantistici, oltre ad aver ricalcolato in maniera autonoma alcuni propagatori di interesse per alcuni semplici potenziali (e tra l'altro aver esplicitato in modo molto compatto il propagatore della buca infinita di potenziale tramite l'utilizzo della funzione  $\theta_3$  di Jacobi, cosa di cui non si sono ritrovati analoghi riferimenti nella documentazione consultata), si è calcolata l'approssimazione semiclassica del propagatore quantistico relativo al potenziale della buca con pareti ela-

## CONCLUSIONI

---

stiche (1.1) e si è riscontrato come risulti essere una somma finita di vari contributi, il primo dei quali risulta essere in effetti quello tipico della particella libera.

Come già citato in Introduzione, il potenziale (1.1) può risultare di qualche interesse, alla luce del suo comportamento meno singolare rispetto alla buca infinita di potenziale e della maggior corrispondenza alla realtà fisica, e sviluppi futuri di un certo interesse potrebbero essere la computazione degli stati coerenti per il sistema in oggetto, un possibile metodo di calcolo del propagatore quantistico in forma esatta proprio per mezzo degli stati coerenti stessi, nonché la trattazione della generalizzazione supersimmetrica, al prim'ordine o successivi.

---

## Ringraziamenti

---

Si desidera ringraziare il Dott. Alexander Kamenchtchik per l'instancabile e determinante contributo profuso con costanza, nonostante distanze geografiche talvolta proibitive, e per la pazienza e disponibilità manifestata in ogni occasione.

Ho il desiderio di ringraziare, con infinito affetto e gratitudine, la mia fidanzata Veronica, mia gioia e ragione d'essere, per essermi stata vicina in ogni momento, i miei genitori e mia sorella Francesca per il sostegno che ho da loro sempre ricevuto, e di rivolgere un sentito grazie a tutti gli amici, conoscenti, parenti e a tutto coloro che mi hanno costantemente supportato (e sopportato).



---

## Bibliografia

---

- [1] Abramowitz, M. e I.A. Stegun: *Handbook of mathematical functions*. Dover Publications, 1965.
- [2] Andrews, G.E., R. Askey e R. Roy: *Special Functions*. Encyclopedia of Mathematics and its Applications. Cambridge University Press, 1999.
- [3] Balestri, F.: *Metodi di calcolo del propagatore dell'oscillatore armonico quantistico*. tesi di laurea, Alma mater studiorum, Università di Bologna, 2010.
- [4] Barone, F. A. e C. Farina: *The zeta function method and the harmonic oscillator propagator*. American journal of physics, 69:232–235, Febbraio 2001.
- [5] Bateman, H., C.I. Technology e A. Erdélyi: *Higher transcendental functions*. Numero volume: 1 nella serie *Higher Transcendental Functions*. McGraw-Hill, 1955.
- [6] Bellman, R.: *A brief introduction to theta functions*. Holt, Rinehart and Winston, 1961.
- [7] Buchholz, H. e H. Lichtblau: *The Confluent Hypergeometric Function*. Springer tracts in natural philosophy. Springer London, Limited, 1969.
- [8] Cohen-Tannoudji, C., B. Diu e F. Laloë: *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, 2005.
- [9] Contreras-Astorga A., D.J. Fernandez e M. Velázquez: *Coherent states for quadratic Hamiltonians*. J. Phys. A: Math. Theor., 44:035304 (16pp), 2011. <http://arxiv.org/abs/1009.2564>, arXiv:1009.2564v3 [quant-ph].

## BIBLIOGRAFIA

---

- [10] Cooper F., A. Khare e U. Sukhatme: *Supersymmetry in quantum mechanics*. World scientific publishing, 2001.
- [11] Ehrenpreis, L., R.C. Gunning e American Mathematical Society: *Theta Functions: Bowdoin 1987*. Proceedings of Symposia in Pure Mathematics. American Mathematical Society, 1989.
- [12] Fernàndez, D.J. e N. Fernàandez-García: *Higher-order supersymmetric quantum mechanics*. AIP Conf. Proc., 774:236–273, Febbraio 2005. <http://arxiv.org/abs/quant-ph/0502098>, arXiv:0502098v2 [quant-ph].
- [13] Fernàndez D.J., V. Hussin e O. Rosas-Ortiz: *Coherent states for Hamiltonians generated by supersymmetry*. J. Phys. A: Math. Theor., 40(24):6491–6511, Maggio 2007.
- [14] Feynman, R.P. e A.R. Hibbs: *Quantum Mechanics and path integrals*. McGraw-Hill, 1965.
- [15] Fulling, S.A. e K.S. Güntürk: *Exploring the propagator of a particle in a box*. Amer. J. Phys., (71):55–63, 2003.
- [16] Gasiorowicz, S.: *Quantum Physics*. John Wiley & Sons, seconda edizione, 1996.
- [17] Goodman, M.: *Path integral solution to the infinite square well*. Am. J. Phys., 49:843–847, 1981.
- [18] Gradshteyn, I.S. e I.M. Ryzhik: *Table of Integrals, Series, and Products*. Academic Press, settima edizione, 2007.
- [19] Hardy, G. H.: *Divergent series*. Oxford university press, prima edizione, 1949.
- [20] Holstein, B. R.: *The harmonic oscillator propagator*. American journal of physics, 66:583–589, Dicembre 1997.
- [21] Infeld, L. e T.H. Hull: *The factorization method*. Rev. of Mod. Phys., 23(1):21–68, Gennaio 1951.
- [22] Liu, W.: *Time-dependent formulation of the linear unitary transformation and the time evolution of a general time-dependent quadratic Hamiltonian systems*. Annals of Physics, 312:480–491, 2004.
- [23] Magnus, W. e F. Oberhettinger: *Formeln und Sätze für die speziellen Funktionen der mathematischen Physik*. Grundlehren der Mathematischen Wissenschaften. Springer, 1948.

- [24] Mencuccini, C. e V. Silvestrini: *Fisica 1*. Liguori editore, terza edizione, 1996.
- [25] Messiah, A.: *Quantum Mechanics*. Dover Publications, 1999.
- [26] Mielnik, B. e O. Rosas-Ortiz: *Factorization: little or great algorithm?* J. Phys. A: Math. Gen., 37:10007–10035, 2004.
- [27] Morette, C.: *On the Definition and Approximation of Feynman's Path Integrals*. Phys. Rev., 81:848–852, Marzo 1951.
- [28] Moriconi, L.: *An elementary derivation of the harmonic oscillator propagator*. American journal of physics, 72:1258–1259, Settembre 2004.
- [29] Morigi, M.: *Formula di Pauli - Van Vleck - Morette per il calcolo del propagatore quantistico*. tesi di laurea, Alma mater studiorum, Università di Bologna, 2011.
- [30] Natividade, C. P.: *Semiclassical approximation and exact evaluation of the propagator for a harmonic oscillator with time-dependent frequency*. American Journal of Physics, 56(10):921–922, 1988.
- [31] Pauli, W. e C.P. Enz: *Selected Topics in Field Quantization*. Dover books on physics. Dover Publications, 2000.
- [32] Phillip, D. e A. Gangopadhyaya: *Sharp and Infinite Boundaries in the Path Integral Formalism*. 2011. <http://arxiv.org/abs/1112.3674>, arXiv:1112.3674 [quant-ph].
- [33] Rizzi L., O. F. Piattella, S. L. Cacciatori e V. Gorini: *The step-harmonic potential*. Am. J. Phys., (78):842–850, 2010.
- [34] Sakurai, J.J.: *Meccanica quantistica moderna*. Zanichelli, 1990.
- [35] Turchetti, G.: *Dinamica classica dei sistemi fisici*. Zanichelli, 1998.
- [36] Van Vleck, J.H.: *The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics*. Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A., 14(2):178–188, Febbraio 1928.
- [37] Vergel, D.G. e J.S. Villaseñor: *The time-dependent quantum harmonic oscillator revisited: Applications to quantum field theory*. Annals of Physics, 324:1360–1385, 2009.
- [38] Whittaker, E.T. e G.N. Watson: *A Course of Modern Analysis*. Cambridge University Press, quarta edizione, 1927. Ristampa 1990.
- [39] Woan, G.: *The Cambridge handbook of physics formulas*. Cambridge university press, 2000.

## BIBLIOGRAFIA

---

- [40] Wolfram Research, Inc.: *Wolfram Functions Site*, Giugno 2013. <http://functions.wolfram.com/07.20.06.0007.01>.