

Esercizio

Una particella si muove nel seguente potenziale:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & \text{se } x \in [-a, -b) \cup (b, a] \\ V_0 > 0, & \text{se } x \in [-b, b] \\ +\infty, & \text{se } |x| > a \end{cases}, \quad (1)$$

graficato in fig. 1.

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

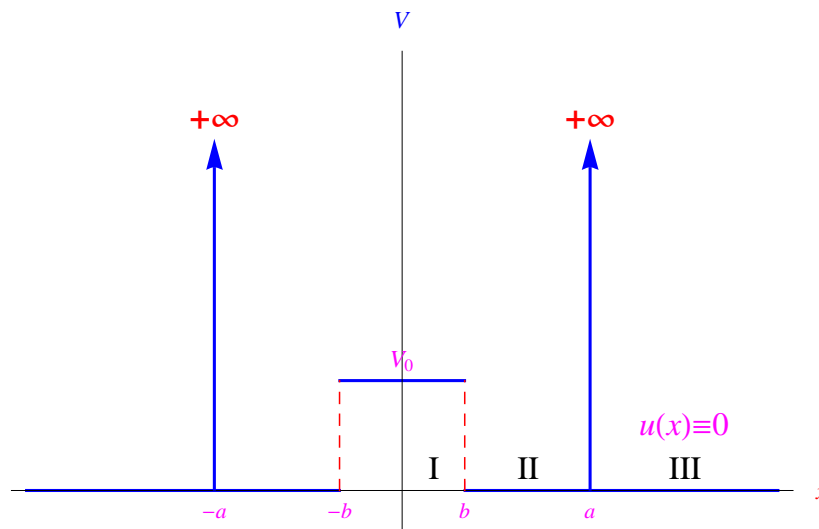


Figura 1: Andamento del potenziale (1).

Soluzione (Marcello Colozzo)

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

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

per cui

$$\sigma_d(H) \subset [0, +\infty) \quad (2)$$

Il quesito 1 chiede di determinare i valori di V_0 per i quali V_0 è autovalore e la corrispondente autofunzione deve essere costante (non nulla) in $[-b, b]$. Inoltre $V(x)$ è pari, per cui le autofunzioni hanno parità definita, cioè sono o tutte pari o tutte dispari. Ciò suggerisce di studiare le soluzioni solo nella regione $x \geq 0$, suddivisa secondo lo schema di fig. 1 nelle sottoregioni I, II e III in corrispondenza delle discontinuità del potenziale:

$$I = [0, b], \quad II = [b, a], \quad III = [a, +\infty), \quad (3)$$

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

$$u(x) = \begin{cases} u_I(x), & \text{se } x \in [0, b] \\ u_{II}(x), & \text{se } x \in [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in [a, +\infty) \end{cases} \quad (4)$$

Le singole soluzioni vanno raccordate:

$$\begin{cases} u_I(b) = u_{II}(b) \\ u_I'(b) = u_{II}'(b) \end{cases}, \quad u_{II}(a) = 0 \quad (5)$$

Segue

$$u_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) u_I(x) = 0 \quad (6)$$

Il quesito 1 chiede:

$$V_0 > 0 \mid \hat{H}u(x) = V_0 u(x), \quad u(x) \equiv C \neq 0, \quad \forall x \in [-b, b] \quad (7)$$

Dalla (6) segue immediatamente

$$u_I''(x) = 0,$$

il cui integrale generale è

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

Deve essere

$$u_I(x) = C - \{0\} \implies C_1 = 0 \quad (8)$$

Osservazione importante. Stiamo lavorando nella regione $x \geq 0$ e in I abbiamo ricavato la soluzione costante (8) che dovrà avere parità definita. È chiaro che non può essere dispari, poichè in tal caso si avrebbe:

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

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

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

che è manifestamente pari. Ma $u_I(x)$ è la restrizione dell'unica autofunzione¹ $u(x)$ all'intervallo $[0, b]$. Quest'ultima deve avere parità definita, per cui sarà a sua volta funzione pari.

Nella regione II

$$u_{II}''(x) + \frac{2mV_0}{\hbar^2} u_{II}(x) = 0 \quad (9)$$

Poniamo

$$k = \sqrt{\frac{2mV_0}{\hbar^2}}, \quad (10)$$

per cui

$$u_{II}''(x) + k^2 u_{II}(x) = 0, \quad (11)$$

il cui integrale generale:

$$u_{II}(x) = A \sin kx + B \cos kx, \quad \forall A, B \in \mathbb{R} - \{0\} \quad (12)$$

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

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

$$\begin{cases} u_{II}(a) = 0 \\ u'_{II}(a) = 0 \end{cases} \quad (13)$$

Dalla (12)

$$\begin{cases} A \sin ka + B \cos ka = 0 \\ A \cos ka - B \sin ka = 0 \end{cases}, \quad (14)$$

che è un sistema lineare omogeneo nelle incognite A, B . Siccome $u_{II}(x)$ non può essere identicamente nulla, necessariamente siamo interessati alle soluzioni non banali di (14). Dall'algebra lineare sappiamo che ciò si verifica se e solo se è nullo il determinante dei coefficienti che in questo caso è

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

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

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

D'altra parte vediamo "a occhio" che

$$u_{II}(x) = A \sin [k(a-x)], \quad (15)$$

per cui

$$u(x) = \begin{cases} C, & \text{se } x \in [0, b] \\ A \sin [k(a-x)], & \text{se } x \in [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in [a, +\infty) \end{cases}, \quad (16)$$

con derivata:

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

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

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

Rammentiamo le condizioni di raccordo tra I e II:

$$\begin{cases} u_I(b) = u_{II}(b) \\ u'_I(b) = u'_{II}(b) \end{cases}$$

A partire dalla (16) ci possiamo già fare una prima idea dell'andamento dell'autofunzione: dal momento che in $[0, b]$ è costante, ne consegue che la sinusoidale $A \sin [k(a-x)]$ (autofunzione nella regione II), dovrà avere come retta tangente in $x = b$ la retta orizzontale $u = C$, affinché ci sia continuità della $u(x)$ e della derivata $u'(x)$. Esplicitiamo la condizione di raccordo:

$$\begin{cases} u_I(b) = u_{II}(b) \\ u'_I(b) = u'_{II}(b) \end{cases} \iff \begin{cases} C = A \sin [k(a-b)] \\ 0 = -kA \cos [k(a-b)] \end{cases} \quad (17)$$

Dalla seconda:

$$kA \cos [k(a-b)] = 0 \xrightarrow{kA \neq 0} \cos [k(a-b)] = 0$$

Cioè

$$k(a-b) = \frac{\pi}{2}(2n+1), \quad \forall n \in \mathbb{Z}$$

con k dato dalla (10). Quindi

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2 (2n+1)^2}{8m(a-b)^2}, \quad \forall n \in \mathbb{Z} \quad (18)$$

Al variare di n , la (18) definisce l'insieme dei valori di V_0 per i quali V_0 è autovalore e la corrispondente autofunzione è costante in $[0, a]$. Ad esempio, per $n = 1$

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m(a-b)^2},$$

mentre dalla prima delle (17):

$$k(a-b) = \frac{\pi}{2} \implies C = A \sin \frac{\pi}{2} = A,$$

per cui a meno di una costante di normalizzazione:

$$u(x) = \begin{cases} A, & \text{se } x \in [0, b] \\ A \sin \left[\frac{\pi(a-x)}{2(a-b)} \right], & \text{se } x \in [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in [a, +\infty) \end{cases}, \quad (19)$$

dove abbiamo tenuto conto dell'espressione di k per $n = 1$

$$k = \frac{\pi}{2(a-b)}$$

Il grafico è riportato in fig. 2. La soluzione completa (cioè su tutto \mathbb{R}) è:

$$u(x) = \begin{cases} A, & \text{se } x \in [-b, b] \\ A \sin \left[\frac{\pi(a-|x|)}{2(a-b)} \right], & \text{se } x \in [-a, -b] \cup [b, a] \\ 0, & \text{se } x \in (-\infty, -a) \cup (+\infty, a) \end{cases}, \quad (20)$$

graficata in fig. 3. Siccome tale autofunzione è priva di zeri in $[-a, a]$ si ha che è lo stato fondamentale del sistema, per cui abbiamo risposto al quesito 2.

Quesito 3

Dobbiamo assumere

$$V_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m(a-b)^2},$$

per cui l'equazione di Schrödinger si spezza in

$$u_I''(x) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m(a-b)^2} \right] u_I(x) = 0, \quad E > \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m(a-b)^2} \quad (21)$$

e

$$u_{II}''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} u_{II}(x) = 0 \quad (22)$$

Poniamo

$$K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{\pi^2 \hbar^2}{8m(a-b)^2} \right]}, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad (23)$$

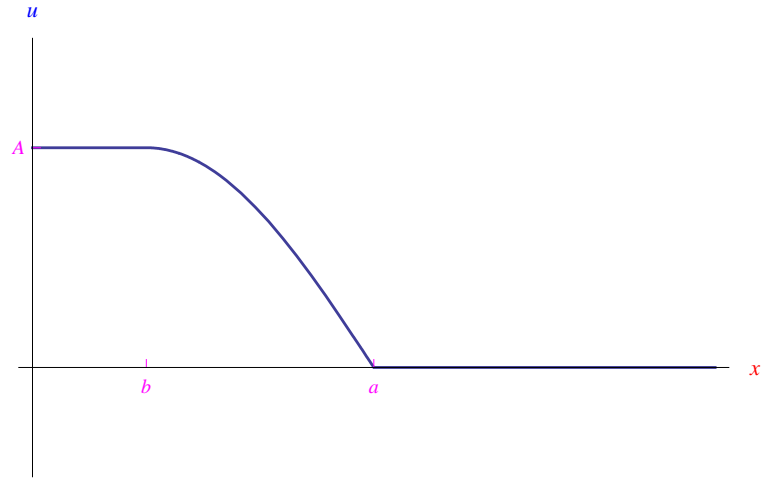


Figura 2: Andamento dell'autofunzione (19).

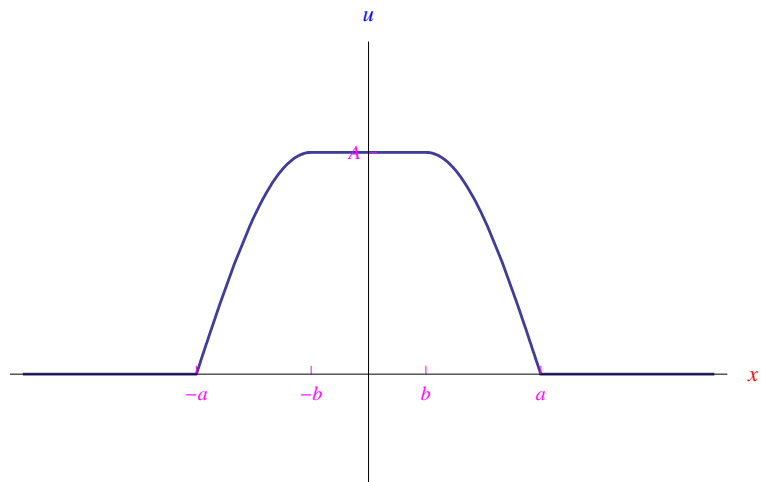


Figura 3: Andamento dell'autofunzione (20)

le equazioni precedenti si scrivono:

$$u_I''(x) + K^2 u_I(x) = 0, \quad u_{II}''(x) + k^2 u_{II}(x) = 0, \quad (24)$$

con i soliti integrali dati da combinazioni lineari di seni e coseni, con la differenza che dobbiamo avere autofunzioni di parità definita. Quindi nella regione I

$$u_I(x) = A \sin Kx, \quad (\text{funzioni dispari}) \quad (25)$$

e

$$u_I(x) = A \cos Kx \quad (\text{funzioni pari}) \quad (26)$$

Invece la $u_{II}(x)$ è sempre data da:

$$u_{II}(x) = B \sin [k(a - x)]$$

Riassumendo:

$$u_I(x) = \begin{cases} A \cos Kx, & (\text{caso pari}) \\ A \sin Kx, & (\text{caso dispari}) \end{cases}, \quad u_{II}(x) = B \sin [k(a - x)] \quad (27)$$

Raccordiamo le soluzioni nel **caso pari**:

$$\begin{aligned} \begin{cases} u_I(b) = u_{II}(b) \\ u_I'(b) = u_{II}'(b) \end{cases} &\iff \begin{cases} A \cos(Kb) = B \sin[k(a - b)] \\ -AK \sin(Kb) = Bk \cos[k(a - b)] \end{cases} \\ &\iff \begin{cases} A \cos(Kb) - B \sin[k(a - b)] = 0 \\ AK \sin(Kb) - Bk \cos[k(a - b)] = 0 \end{cases}, \end{aligned}$$

che è un sistema lineare omogeneo nelle incognite A, B . Al solito, siamo interessati alle soluzioni non banali. Quindi deve essere:

$$\begin{aligned} &\begin{vmatrix} \cos(Kb) & -\sin[k(a - b)] \\ K \sin(Kb) & -k \cos[k(a - b)] \end{vmatrix} = 0 \\ \iff &-k \cos(Kb) \cos[k(a - b)] + K \sin(Kb) \sin[k(a - b)] = 0 \\ \iff &k \cos[k(a - b)] - K \tan(Kb) \sin[k(a - b)] = 0 \end{aligned}$$

Cioè

$$K \tan(Kb) \tan[k(a - b)] = k \quad (28)$$

Alla stessa maniera nel **caso dispari**:

$$K \tan[k(a - b)] = -k \tan(Kb) \quad (29)$$

Dalle (23) vediamo che $K = K(E)$, $k = k(E)$ per cui le (28)-(29) sono equazioni trascendenti in E che non possono essere risolte analiticamente, ma numericamente/graficamente. Ciò che interessa notare è che tali equazioni definiscono implicitamente lo spettro discreto degli autovalori dell'energia. Infatti ci aspettiamo un insieme di soluzioni del tipo $\{E_0, E_1, \dots, E_n\}$. In altre parole, le (28)-(29) definiscono implicitamente gli autovalori discreti dell'energia, per cui risolvono il quesito 3. Risolviamo graficamente la (28) che per quanto visto, si riferisce al **caso pari**. Lasciando inespreso il termine V_0 , si ha:

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} \tan \left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0)} b \right] \tan \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (a - b)^2 \right] = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Cioè

$$\sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \tan \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (a - b)^2 \right] = \cot \left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (E - V_0) b^2 \right] \quad (30)$$

Ed è proprio questa l'equazione da risolvere (rispetto a E), che può essere riscritta come

$$f(E) = g(E),$$

dove

$$f(E) = \sqrt{\frac{E - V_0}{E}} \tan \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (a - b)^2 \right], \quad g(E) = \cot \left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (E - V_0) b^2 \right]$$

Si tratta, quindi, di eseguire uno studio di funzione. Ricordiamo che deve essere $E > V_0$ dato che stiamo cercando i livelli eccitati. Tale condizione garantisce la realtà del radicale $\sqrt{\frac{E - V_0}{E}}$. Si noti che le funzioni

$$\tan \left[\sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} (a - b)^2 \right], \quad \cot \left[\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}} (E - V_0) b^2 \right]$$

non sono periodiche a causa della presenza della radice nell'argomento di tan e cot. Tuttavia hanno delle singolarità che vanno determinate. Precisamente, le singolarità di f sono

$$\varepsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m(a - b)^2} \left(\frac{\pi}{2} + n\pi \right)^2, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (31)$$

avendo $\varepsilon_0 = V_0$. Per la funzione g troviamo

$$\varepsilon'_n = V_0 + \frac{b^2 \hbar^2 n^2 \pi^2}{2mb^2} \quad (32)$$

Tracciando i grafici con Mathematica, otteniamo l'andamento riportato in fig. 4, e quindi la distribuzione degli autovalori E_1, E_2, \dots

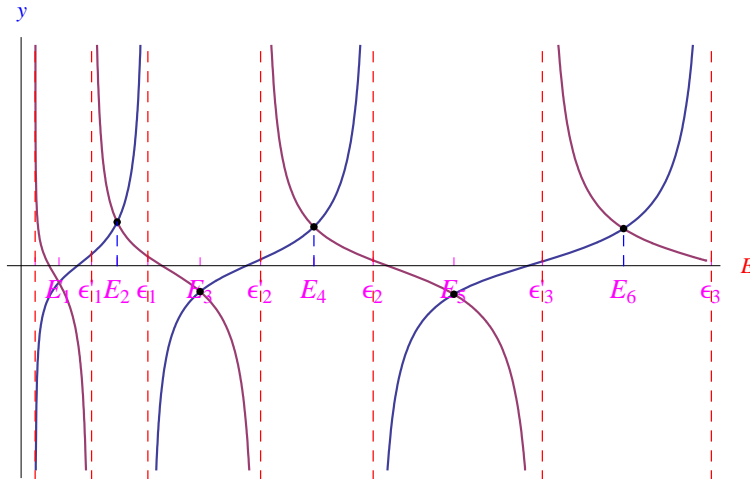


Figura 4: Ricerca delle soluzioni dell'equazione (30)