

MQ I Corso A

Simon Badger EN 5.9

Esercizi con potenziali unidimensionali

1. Panoramica (Riepilogo di concetti importanti)
2. Gradino di potenziale 
3. Barrier di potenziale 
4. Bucă di potenziale 
5. Potenziali con S-Direc 
6. Potenziali periodici 

I. Panoramica

Vedremo soluzioni all'equazione di Schrödinger in 1d quando il potenziale è indipendente dal tempo. Ricordate che in questo caso l'eq. di Schrödinger è separabile

Equazione di Schrödinger (posizione)

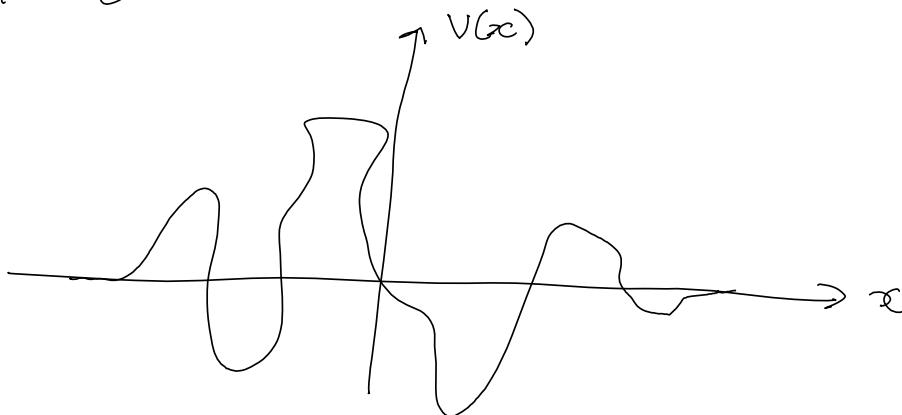
$$V = V(x), \quad H = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(x)$$

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

Funzione d'onda con dipendenza dal tempo

$$\Psi(x,t) = e^{-iEt/\hbar} \psi(x)$$

Consideriamo potenziali che spaziano
al $x = \pm\infty$:



In generale è difficile trovare soluzioni
analitiche (forma chiusa).

Ci sono due casi importanti:

$E > 0$, problemi di scattering

\rightarrow soluzioni continuo

$E < 0$, problemi di stati legati

\rightarrow soluzioni discreto

Nel caso di una particella libera, $E > 0$ troviamo soluzioni oscillando:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \Rightarrow \psi = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$E > 0$$

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

$$= A' \cos(kx) + B' \sin(kx)$$

Se invece $E < 0$ le soluzioni prendono una forma esponenziale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = -|E|\psi \Rightarrow \psi = A e^{ikx} + B e^{-kx}$$

$$E < 0$$

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

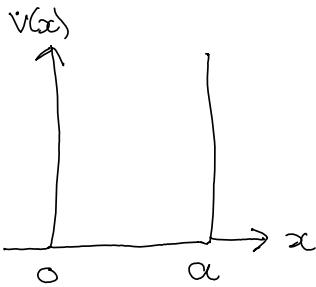
$$= A' \cosh(kx) + B' \sinh(kx)$$

NB e^{ikx} rappresenta un'onda sta viaggiando alla sinistra ad destra:



$$\underline{\psi}(x,t) = \underline{\psi}(kx - \omega t)$$

Avete già visto l'esempio di una buca di potenziali infinita dove c'era un spettro discreto di autostati:



$$V(x) = \begin{cases} \infty & ; 0 < x < a \\ 0 & ; x < 0, x > a \end{cases}$$

autostati
normalizzata

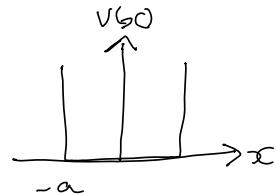
$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)$$

autovalori
dell'energie

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$$

Compito #1 : Buca infinita simmetrica

$$V(x) = \begin{cases} \infty & ; |x| > a \\ 0 & ; |x| < a \end{cases}$$



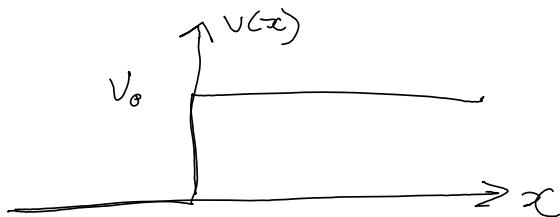
- Mostra che gli autovalori dell'energia sono

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{1}{a}} \cos\left(n\pi x/2a\right); & n=1, 3, 5, \dots \\ \sqrt{\frac{1}{a}} \sin\left(n\pi x/2a\right); & n=2, 4, 6, \dots \end{cases}$$

- Disegni i primi 4 funzioni

2. Gradino di potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & x \geq 0 \end{cases}$$



Esercizio 2.1 Scrivi il solutioe per la funzione d'onda in caso che la particella ha energia $E > V_0$.

Regione I : $x < 0$

$$V(x) = 0 \Rightarrow \psi_I(x) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$$

$$\text{dove } k = \sqrt{\frac{2Em}{\hbar^2}}$$

Regione II : $x > 0$

$$V(x) = V_0 \text{ quindi}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right) \psi_{\text{II}} = E \psi_{\text{II}}$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \psi_{\text{II}}}{dx^2} = -q^2 \psi_{\text{II}}, \quad q^2 = \sqrt{\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}} > 0$$

$$\Rightarrow \psi_{\text{II}} = C e^{iqx} + D e^{-iqx}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_{\text{I}} & x < 0 \\ \psi_{\text{II}} & x > 0 \end{cases}$$

dove essere continuo $\Rightarrow \psi_{\text{I}}(0) = \psi_{\text{II}}(0)$

$$\text{e } \psi'_{\text{I}}(0) = \psi'_{\text{II}}(0)$$

condizioni al contorno

ipotesi su scattering

e^{ikx} avanti, e^{-ikx} indietro

prendiamo il caso quando la particella inizia alla sinistra quindi: ψ_{II}

non ha un componente indietro $\Rightarrow D = 0$

$$\textcircled{1} \quad A + B = C$$

$$\textcircled{2} \quad ik(A - B) = igC$$

$$\Rightarrow A + B = \frac{k}{q}(A - B)$$

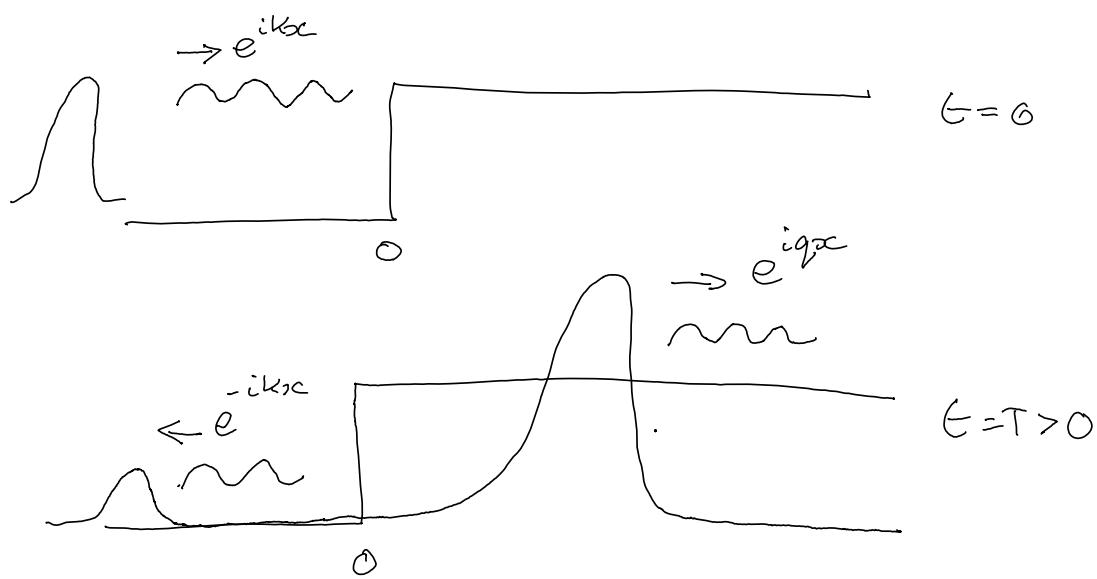
$$\Rightarrow A\left(1 - \frac{k}{q}\right) = -B\left(1 + \frac{k}{q}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned} B &= -A \left(\frac{1 - \frac{k}{q}}{1 + \frac{k}{q}} \right) \\ C &= A \left(1 - \left(\frac{1 - \frac{k}{q}}{1 + \frac{k}{q}} \right) \right) = A \left(\frac{2k/q}{1 + k/q} \right) \end{aligned}}$$

La normalizzazione di ψ determina il coefficiente A .

Osservazioni

- Il nostro soluzioone rappresenta un forma generale \rightarrow per vedere come una particella si disperde dal gradino dobbiamo mettere un pacchetto d'onda Gaussiana:



- I coefficienti A, B, C rappresenta le parte della funzione d'onda associata con incidente, riflessione e trasmissione rispettivamente.

Possiamo usare la conservazione della corrente di probabilità per derivare le proprietà dei coefficienti.

$$\rho = |\Psi|^2 \quad \text{densità di probabilità}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho dx = 1$$

$$j = \frac{-i\hbar}{2m} \left(\bar{\Psi}^* \left(\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial x} \right) - \left(\frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \bar{\Psi} \right)$$

corrente
di
probabilità

Compito #2 : prova che

$$\frac{\partial \bar{\Psi}}{\partial t} = - \frac{\partial \bar{j}}{\partial x}$$

usando l'eq. di Schrödinger

$$j_I = -\frac{ie}{2m} \left(\psi_I^* \frac{\partial \psi_I}{\partial x} - \frac{\partial \psi_I^*}{\partial x} \psi_I \right)$$

$$= -\frac{ie}{2m} \left[(A e^{-ikx} + B e^{ikx}) ik (A e^{ikx} - B e^{-ikx}) - (-A e^{-ikx} + B e^{ikx}) ik (A e^{ikx} + B e^{-ikx}) \right]$$

$$= \frac{k \hbar}{2m} \left[|A|^2 + A B^* e^{2ikx} - B A^* e^{-2ikx} - |B|^2 + |A|^2 - A B^* e^{2ikx} + B A^* e^{-2ikx} - |B|^2 \right]$$

$$= \frac{\hbar}{m} k (|A|^2 - |B|^2)$$

Sim.

$$j_{II} = \frac{\hbar q}{m} |C|^2$$

perché $\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0$ in questo caso $\Rightarrow \frac{\partial j}{\partial x} = 0$

$$\Rightarrow j_I = j_{II}$$

adesso definiamo,

$$\dot{J}_{\text{incidente}} = \frac{\tau_1 \kappa}{m} |A|^2$$

$$\dot{J}_{\text{riflessione}} = \frac{\tau_1 \kappa}{m} |B|^2$$

$$\dot{J}_{\text{trasmissione}} = \frac{\tau_2 \kappa}{m} |C|^2$$

con i coefficiente di trasmissione e
riflessione definito come

$$T = \frac{\dot{J}_{\text{tras.}}}{\dot{J}_{\text{inc.}}} = \frac{\tau_2 \kappa |C|^2}{\tau_1 \kappa |A|^2}$$

$$R = \frac{\dot{J}_{\text{ritl.}}}{\dot{J}_{\text{inc.}}} = \frac{|B|^2}{|A|^2}$$

con

$$\boxed{T + R = 1}$$

Esercizio 2.2 Scrivi il soluzione per

la funzione d'onda quando $0 < E < V_0$.

Cos'è la probabilità di trovare la particella
nella regione $x > 0$ se inizia a $x = -\infty$?

———— //

$$\psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad \text{come prima}$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right) \psi_I = E \psi_I$$

$$\Rightarrow \frac{d^2 \psi_I}{dx^2} = \underbrace{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}_{> 0} \psi_I$$

> 0

$$= \beta^2 \psi_I$$

$$\Rightarrow \psi_I = C e^{-\beta x} + D e^{\beta x}$$

$\rightarrow \infty$ quando $x \rightarrow \infty$

\Rightarrow non normalizzabile.

$$A + B = C$$

$$ik(A - B) = -\beta C$$

$$\Rightarrow 2A = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ & ik \end{pmatrix} C$$

$$\Rightarrow C = \frac{2ik}{ik - \beta} A$$

$$B = \left(\frac{2ik - (ik - \beta)}{ik - \beta} \right) A = \left(\frac{ik + \beta}{ik - \beta} \right) A$$

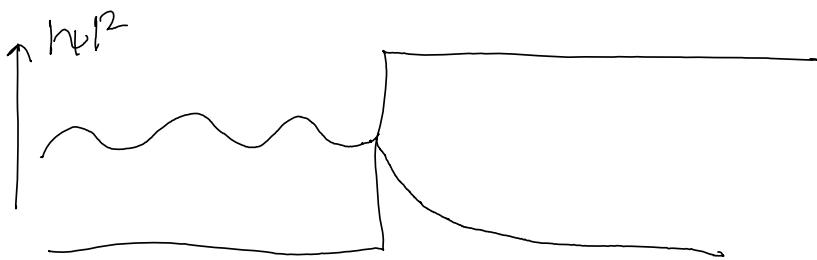
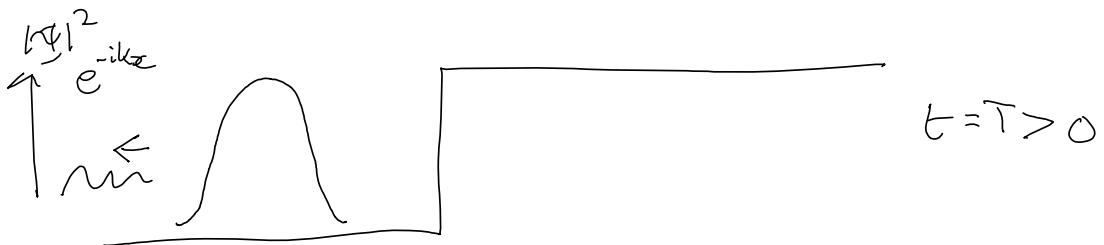
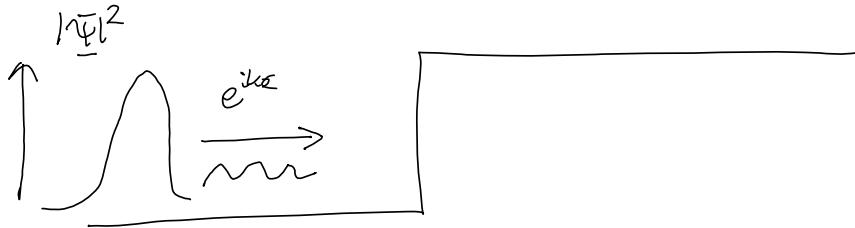
questa volta

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{j_R}{j_I} = \left| \frac{ik + \beta}{ik - \beta} \right| = 1$$

e, perché ψ_{II} è reale,

$$i_T = \frac{-it}{2m} \left(\psi_{II}^* \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} - \frac{\partial \psi_{II}^*}{\partial x} \psi_{II} \right) = \textcircled{1}$$

$$\Rightarrow T = 0$$



↑
funzione d'onda non-zero
ma non c'è probabilità
di trovare la particella
con $x > 0$

La Matrice di Scattering (Griffiths 2.53)

Consideriamo un potenziale localizzato con una forma generica e $E > 0$:



(I)

$$V(x)=0$$

(II)

(III)

$$V(x)=0$$

$$\Psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\Psi_{II} = F e^{ikx} + G e^{-ikx}$$

non sappiamo la forma esatta per regione (II)
ma che è un soluzione ad un egr.
diff. ordine secondo lineare

$$\Rightarrow \Psi_{II} = C f(x) + D g(x)$$

dove f, g sono indipendente linearmente.

Usando i condizioni di continuità possiamo fare 2 combinazioni indipendente di C, D :

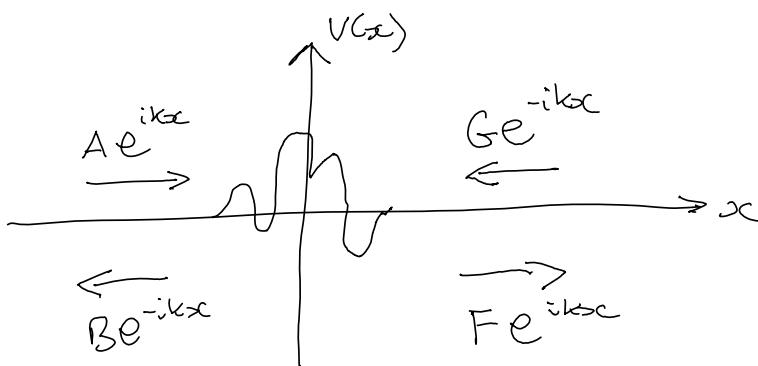
$$B = S_{11}A + S_{12}G$$

$$F = S_{21}A + S_{22}G$$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} B \\ F \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} A \\ G \end{pmatrix}$$

(dentro)
incoming
(fuori)
outgoing

dove A, G sono ampiezze
e B, F sono ampiezze

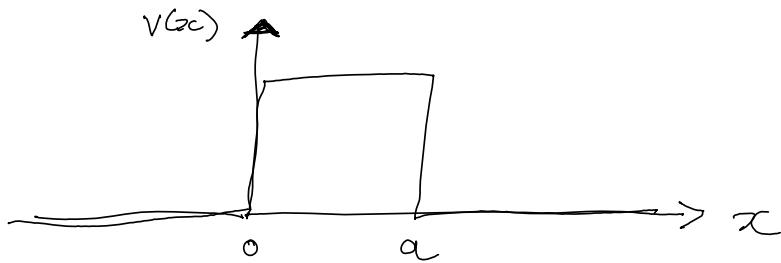


3. Barriera di potenziale

Consideriamo la generalizzazione del gradino in cui

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & 0 < x < a \\ 0 & x < 0, x > a \end{cases}$$

dove $V_0 > 0$



Esercizio 3.1 In caso $0 < E < V_0$ calcoli i coefficienti di riflessione e trasmissione.

$$\psi = \begin{cases} \psi_I = A e^{ikx} + B e^{-ikx} & x < 0 \\ \psi_{II} = C e^{qx} + D e^{-qx} & 0 < x < a \\ \psi_{III} = F e^{ikx} & x > a \end{cases}$$

condizioni di continuità:

$$\begin{aligned} \psi_I(0) &= \psi_{II}(0), & \psi_{II}(a) &= \psi_{III}(a), \\ \psi'_I(0) &= \psi'_{II}(0), & \psi'_II(a) &= \psi'_{III}(a). \end{aligned}$$

\Rightarrow

$$\begin{aligned} A+B &= C+D, & C e^{qa} + D e^{-qa} &= F e^{ika}, \\ ik(A-B) &= q(C-D), & q(C e^{qa} - D e^{-qa}) &= ik F e^{ika}. \end{aligned}$$

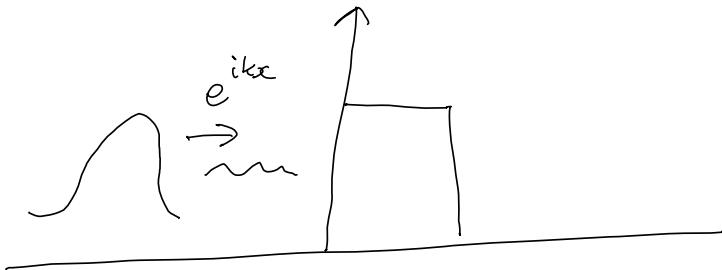
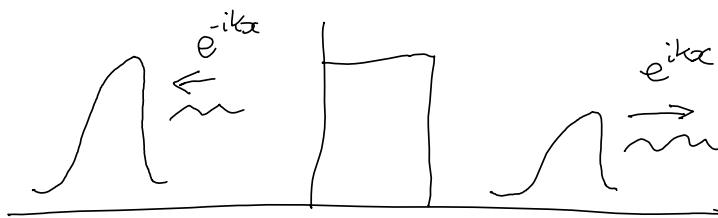
4 equazioni (lineare) per 5 coefficienti

$\Rightarrow B, C, D, E$ in termino di un norm. arbitrario

A. $R+T=1$ (controlli) con

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left| \frac{(k^2 + q^2) \sinh(qa)}{2ikq \cosh(qa) + (k^2 - q^2) \sinh(qa)} \right|^2$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \left| \frac{2ie^{-iak}}{2ikq \cosh(qa) + (k^2 - q^2) \sinh(qa)} \right|^2$$


 $t = 0$

 $t = T > 0$

Effetto tunnel : c'è una probabilità $\neq 0$
che troviamo la particella ad destra
della barriera

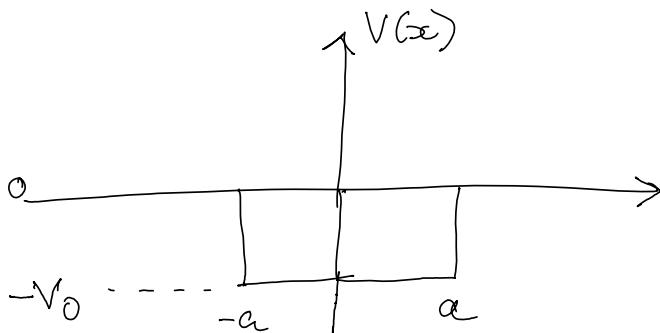
compito #4 mostra che in caso la
 barrier è tra $x=-a$ e $x=a$, $0 < V_0 < E$
 i soluzioni per i coefficienti di riflessione
 e trasmissione sono

$$R = \left| \frac{(k^2 - q^2) \sin(2aq)}{(k^2 + q^2) \sin(2aq) + 2ikq \cos(2aq)} \right|^2$$

$$T = \left| \frac{2kq}{(k^2 + q^2) \sin(2aq) + 2ikq \cos(2aq)} \right|^2$$

4. La Buca di Potenziale

Una buca di potenziale (attrattiva) può essere risolto in 2 situazioni interessante



- 1) $E > 0$, scattering
- 2) $-V_0 < E < 0$, stato legato

Esercizio 4.1 Calcolare la funzione d'onda generale per scattering di una particella (dalla sinistra).

condizione al contorno

$$\psi_1 = A e^{ikx} + B e^{-ikx} \quad x < 0$$

$$\psi_2 = C e^{iqx} + D e^{-iqx} \quad 0 < x < a$$

$$\psi_3 = F e^{ikx} \quad x > a$$

$$q = \sqrt{\frac{(E + V_0) 2m}{\hbar^2}}$$

quindi esattamente come compito #4 con :

$$q = \sqrt{\frac{(E - V_0) 2m}{\hbar^2}} \rightarrow q = \sqrt{\frac{(E + V_0) 2m}{\hbar^2}}$$

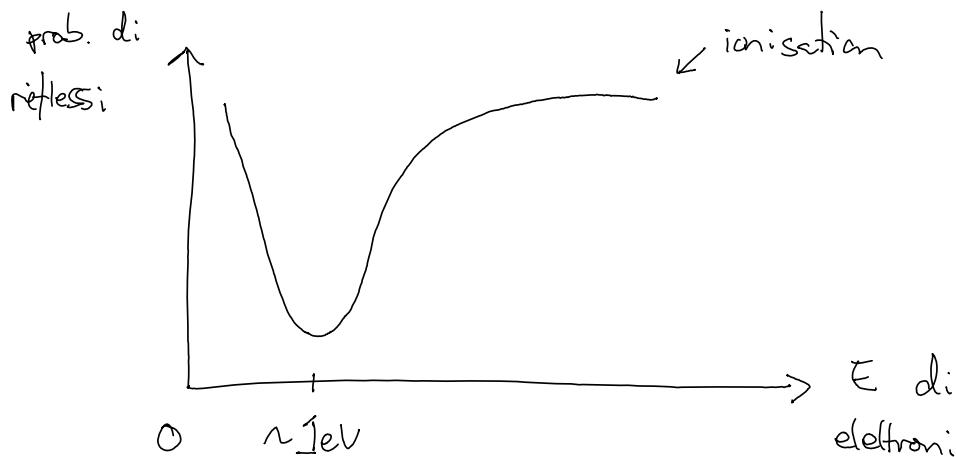
④ osservazione c'è un' situazione interessante

se $2aq = n\pi \quad n \in \mathbb{Z}^+$. In questo caso

$R=0$ corrispondente all'energie.

$$E = -V_0 + \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8ma^2} \quad n \in \mathbb{Z}^+$$

Questo modello semplice è stato utilizzato per spiegare l'osservazioni de Ramsauer/Townsend (1921) in cui il scattering di elettroni per un gas nobile (e.g. Xeon).



Il minimo della probabilità di riflessione è stato osservato ad un energie > 0 . L'Atomo non ha un' spiegazione classica e il modello con una buca finita è stato proposto di Niels Bohr (~ 1926) ENB eg. d. Schrödinger (1926)]

Esercizio 4.2

$$-V_0 < E < 0$$

Con $E < 0$ il soluzioe la funzione d'onda fuori della buca prende la forma di un esponenziale reale

$$\psi_1 = A e^{kx}$$

$$x < a$$

$$\psi_3 = D e^{-kx}$$

$$x > a$$

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

NB: Non possiamo mettere e^{-kx} alla sinistra della buca perché non è normalizzabile.

Per $0 < x < a$ con $q = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (V_0 - |E|)}$

$$\psi_2 = \tilde{B} e^{iqx} + \tilde{C} e^{-iqx} \quad (x) < a$$

Tuttavia, stati legati sono soluzioe reali (c.f. buca infinita) quindi è più conveniente a prendere

$$\psi_2 = B \cos(qx) + C \sin(qx).$$

Possiamo osservare che ci sono 4 condizioni di continuità più il condizione di normalizzazione con 4 coefficienti A, B, C, D quindi con soltanto esiste soluz. per valori particolari di φ (quindi valori particolare di ε)

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a) \quad (1), \quad \psi_2(a) = \psi_3(a) \quad (3)$$

$$\psi'_1(-a) = \psi'_2(-a) \quad (2) \quad \psi'_2(a) = \psi'_3(a) \quad (4)$$

$$(1) \quad A e^{-k a} = B \cos(q a) + C \sin(q a)$$

$$= B \cos(q a) - C \sin(q a)$$

$$(2) \quad k A e^{-k a} = q (B \sin(q a) + C \cos(q a))$$

$$\Rightarrow \frac{k}{q} = \frac{B \sin(q a) + C \cos(q a)}{B \cos(q a) - C \sin(q a)}$$

la stessa combinazione di (3) + (4)

$$B \cos(q_j a) + C \sin(q_j a) = D e^{-k a} \quad (3)$$

$$q_j (-B \sin(q_j a) + C \cos(q_j a)) = -k D e^{-k a}$$

$$\Rightarrow \frac{k}{q_j} = - \left(\frac{-B \sin(q_j a) + C \cos(q_j a)}{B \cos(q_j a) + C \sin(q_j a)} \right)$$

$$\Rightarrow - \left(\frac{-Bs + Cc}{Bc + Cs} \right) - \frac{Bs + Cc}{Bc - Cs} = 0$$

$$\boxed{\begin{aligned} S &= \sin(q_j a) \\ C &= \cos(q_j a) \end{aligned}}$$

$$\Rightarrow \frac{(Bs - Cc)(Bc - Cs) - (Bs + Cc)(Bc + Cs)}{B^2 c^2 - C^2 s^2} = 0$$

$$\Rightarrow \frac{-2BC(c^2 + s^2)}{B^2 c^2 - C^2 s^2} = \frac{-2BC}{B^2 c^2 - C^2 s^2} = 0$$

$$\Leftrightarrow \underbrace{B=0}_{\text{dispari}} \quad \text{or} \quad \underbrace{C=0}_{\text{pari}}$$

$$\textcircled{1} \quad \underline{c=0} \quad \text{pari}$$

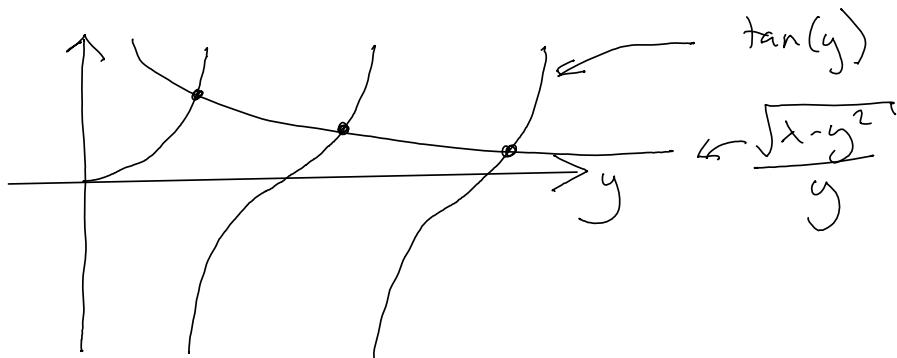
$$\Rightarrow \frac{k}{q} = \tan(\alpha q)$$

per trovare i valori di q che risolvono questo equazione trascendentale cambiano variabili a

$$y = \alpha q$$

$$\lambda = \frac{2m}{\hbar^2} V_0 \alpha^2$$

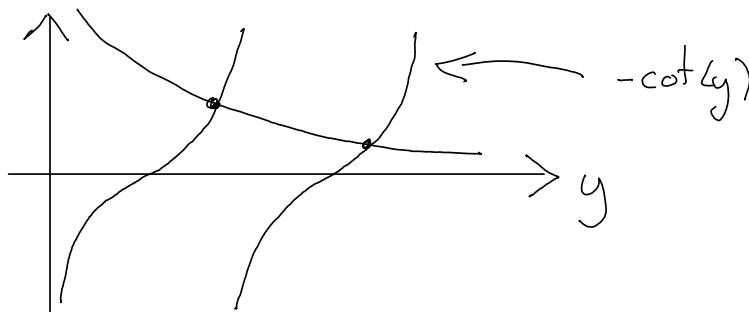
$$\Rightarrow \boxed{\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = \tan(y)}$$



comito #5

per casi dispari ($B=0$) mostrare che

$$\frac{\sqrt{\lambda - y^2}}{y} = -\cot(y)$$



In caso di una particella con $m=1$ e
(in unità arbitrarie) $\hbar=1$, $a=1$, $V_0=50$ (
 $\Rightarrow \lambda=100$) quanti stati pari e dispari sono
e quale sono le loro energie?

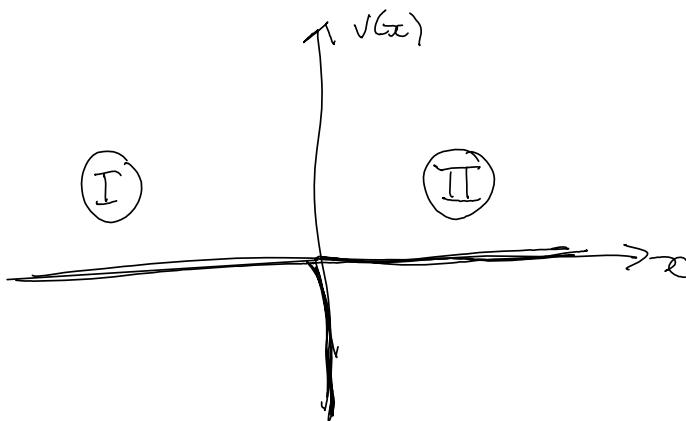
5. Potenziali con Dirac Delta

Un'altra forma della potenziale in cui possiamo trovare soluzioni analitiche è il δ -Dirac. La differenza è che la derivata della funzione d'onda non è continuo.

Per esempio $V(x) = -V_0 \delta(x)$

$$\Rightarrow \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} - V_0 \delta(x) \right) \psi(x) = E \psi(x)$$

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



Ora, consideriamo la derivata a $x = \pm \varepsilon$
 $(\varepsilon > 0, \varepsilon \ll 0)$

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} \frac{d^2 \psi}{dx^2} dx = \psi'_\text{II}(\varepsilon) - \psi'_\text{I}(-\varepsilon)$$

oppure, usando l'eq. di Schrödinger

$$\int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} - (E + V_0 \delta(x)) \psi(x) \frac{2m}{\hbar^2} dx = - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi'_\text{I}(0) \quad [\text{NB } \psi'_\text{I}(0) = \psi'_\text{II}(0)]$$

Quindi la condizione al contorno per la derivata è ($a x=0$)

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} (\psi'_\text{II}(\varepsilon) - \psi'_\text{I}(-\varepsilon)) = - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi'_\text{I}(0)$$

Compito #6 In caso $E > 0$ scrivi
 la funzione d'onda quando $V(x) = -V_0 \delta(x)$
 (assumendo la particella inizia alla sinistra)

Esercizio 5.1 Stati legati per $V(x) = -V_0 \delta(x)$
 $(E < 0)$

In questo caso la funzione d'onda è
 scritto in termini di esponenziale reale

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

$$\psi_I = A e^{kx}$$

$$\psi_{II} = B e^{-kx}$$

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \Rightarrow A = B$$

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [\psi_{II}^1(\epsilon) - \psi_I^1(\epsilon)] = -kB - kA \\ = -2kA$$

$$= -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A$$

Quindi c'è solo un soluzione

$$k = \frac{mv_0}{\hbar^2}$$

Possiamo determinare anche la norma.

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx &= 2 \int_0^{\infty} |\psi_1|^2 dx \\ &= 2A^2 \int_0^{\infty} e^{-2kx} dx \\ &= 2A^2 \left[-\frac{1}{2k} e^{-2kx} \right]_0^{\infty}\end{aligned}$$

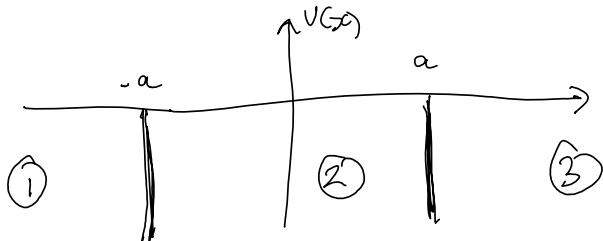
$$= \frac{A^2}{k} = 1$$

$$\Rightarrow A = \sqrt{k}$$

$$\psi = \begin{cases} \sqrt{k} e^{kx}, & x \geq 0 \\ \sqrt{k} e^{-kx}, & x \leq 0 \end{cases}$$

Esercizio 5.2 Trova i soluzioni per stati legati per un potenziale con due

S-Dirac al $x=0$ e $x=a$



$$V(x) = -V_0 \left(\delta(x-a) + \delta(x+a) \right)$$

Sol.

$$\psi_1 = A e^{kx}$$

$$\psi_2 = B \cosh(kx) + C \sinh(kx)$$

$$\psi_3 = D e^{-kx}$$

cerciamo prima per sol. pari $\Rightarrow C=0$

continuità:

$$\psi_1(-a) = \psi_2(-a), \quad \psi_2(a) = \psi_3(a)$$

$$\psi_2'(-a) - \psi_1'(-a) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi_1(-a),$$

$$\psi_3'(a) - \psi_2'(a) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi_2(a)$$

per soluzioni pari prendiamo $C = 0$

$$A e^{-ka} = B \cosh(-ka) = B \cosh(ka) \quad (1)$$

$$\psi_1'(a) = kA e^{-ka}$$

$$\psi_1'(-a) = B k \sinh(-ka) = -B k \sinh(ka)$$

$$\Rightarrow -B k \sinh(ka) - kA e^{-ka} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A e^{-ka} \quad (2)$$

$$B \cosh(ka) = D e^{-ka} \quad (3)$$

$$\psi_3'(a) = -D k e^{-ka}.$$

$$\psi_2'(a) = kB \sinh(ka)$$

$$\Rightarrow -D k e^{-ka} - kB \sinh(ka) = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} D e^{-ka} \quad (4)$$

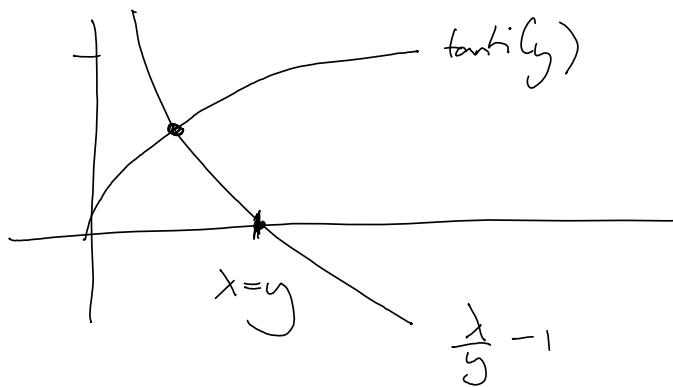
$$(1) + (3) \Rightarrow A = 0 \quad B = A \frac{e^{-ka}}{\cosh(ka)}$$

$$(4) \Rightarrow -kA e^{-ka} \frac{\sinh(ka)}{\cosh(ka)} - kA e^{-ka} = -\frac{2mV_0}{\hbar^2} A e^{-ka}$$

$$\Rightarrow \tanh(ka) + 1 = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \frac{1}{k}$$

$$ka = y , \quad \lambda = \frac{2mV_0}{\hbar^2} a$$

$$\Rightarrow \tanh(y) = \frac{\lambda}{y} - 1$$



\Rightarrow 1 soluzione pari

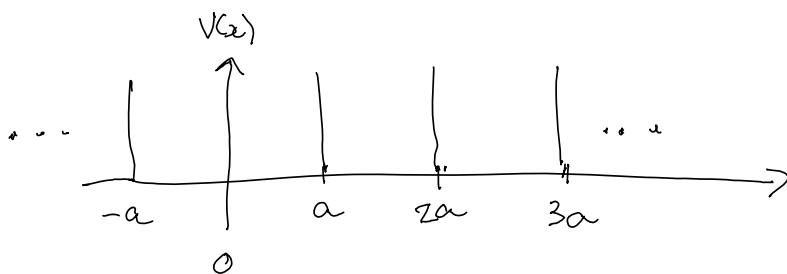
Per il caso dispari possiamo trovare
un'equazione

$$\tanh(y) = \left(\frac{\lambda}{y} - 1\right)^{-1} \Rightarrow 1 \text{ sol. } \underline{\text{se}} \lambda > 1 .$$

6. Potenziali Periodici

Consideriamo potenziali con una forma

$$V(x+a) = V(x)$$



Per trovare soluzioni usiamo

Teorema di Bloch

le funzioni d'onda per un potenziale periodico, con periodo a , soddisfano

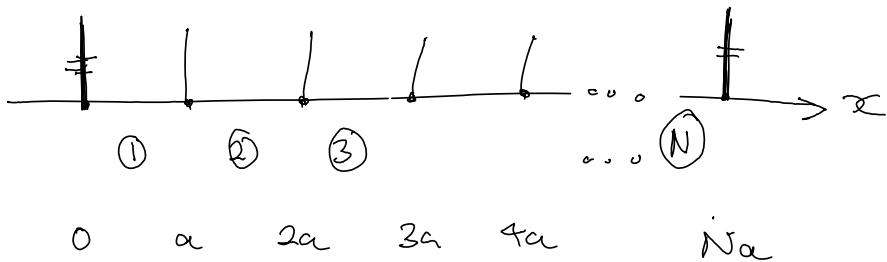
$$\psi(x+a) = e^{ifa} \psi(x) \quad f \in \mathbb{R}$$

Facciamo la prova dopo, per ora continuiamo assumendo
è vero.

In realtà, un solido (reticolo) avrà frontiere. Quindi la teorema di Bloch applica solo come un'approssimazione. Per fare questo introduciamo un'condizione al contorno per un reticolo di lunghezza aN , $N \gg 1$

$$\begin{aligned} x &= x + Na \\ \Rightarrow \psi(x) &= \psi(x+Na) = e^{ifNa} \psi(x) \\ \Rightarrow e^{ifNa} &= 1 \\ \Rightarrow f &= \frac{2\pi n}{Na}, n \in \mathbb{Z}^+ \end{aligned}$$

Esercizio 6.1 Dirac Comb (Pettine)



$$V(x) = \sum_{j=0}^{N-1} V_0 \delta(x - ja)$$

Prendiamo il caso di scattering di una particella. Dalla teorema d' Bloch :

$$\psi_i(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$\psi_N(x) = e^{-ixa} \psi_i(x+a)$$

- condizioni al contorno

$$\begin{cases} \psi_i(0) = \psi_N(0) \\ \psi'_i(0) - \psi'_N(0) = -\frac{2m}{\hbar^2} V_0 \cdot (0) \end{cases}$$

$$\Rightarrow \begin{cases} B = e^{-ia} (A \sin(ka) + B \cos(ka)) \end{cases} \quad (1)$$

$$(Ak - e^{-ia}) K (A \cos(ka) - B \sin(ka)) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} B \quad (2)$$

risolvere (1) per A e sostituire dentro (2)

$$A = \frac{B(e^{ita} - \cos(ak))}{\sin(ak)}$$

quindi il costante B cancella dopo il sostituzione.

$$(2) Ak(1 - e^{-ita} \cos(ka))$$

$$+ B e^{-ita} k \sin(ka) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} B$$

$$\Rightarrow \cancel{B} \left(\frac{e^{ita} - \cos(ak)}{\sin(ak)} \right) (1 - e^{-ita} \cos(ka))$$

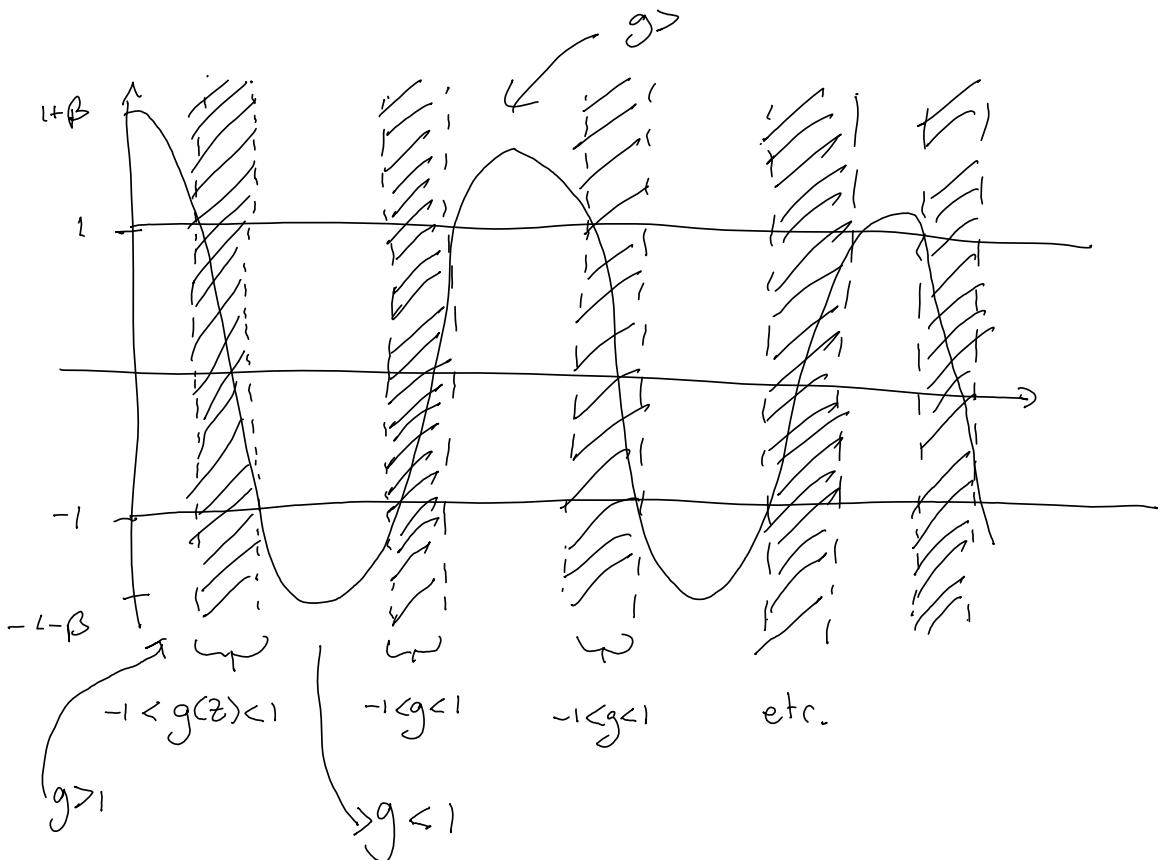
$$+ \cancel{B} e^{-ita} k \sin(ka) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \cancel{B}$$

$$\Rightarrow \cos(\cancel{ta}) = \cos(ka) + \underbrace{\frac{mV_0}{\hbar^2} \frac{\sin(ka)}{k}}$$

$$g(z) = \cos(z) + \beta \sin(z)/z$$

$$z = ka, \quad \beta = mV_0 a / \hbar^2$$

$\cos(f_n) = \cos\left(\frac{2\pi n}{N}\right)$ $n \in \mathbb{Z}^+$ prende
 valori tra 1 e $-1 \cdot g(z)$ invece prende
 una forma:



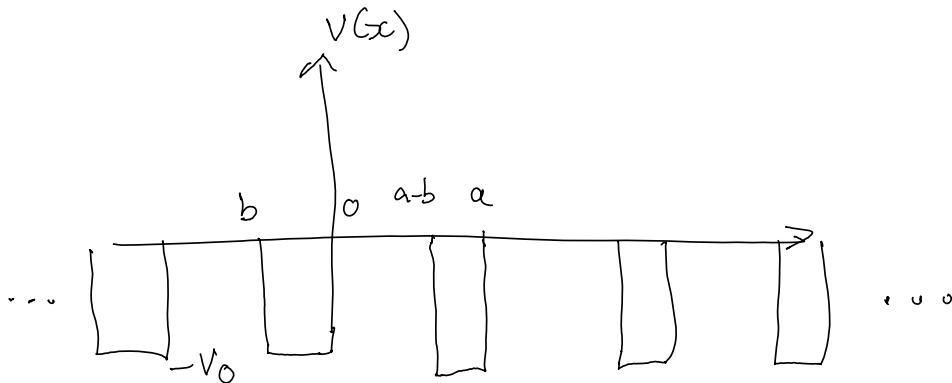
quindi troviamo **BAND GAPS** nel spettro
 di stati quando $g > 1$ oppure $g < 1$.

Camp. #7

il modello Kronig - Penney e un sistema di bacì potenziale

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & -b + Na < x < Na \\ 0 & Na < x < a - b + Na \end{cases}$$

mostra che il sistema ha band gaps nello spettro di livelli permessibili.



Per la prossima volta ...

- Ⓐ Simulazioni di scattering con il metodo di differenza finita.
- Ⓐ Prova della teorema di Bloch.