Lezione 6

Stati legati e generalità sul potenziale a delta

6.1 Esercizio # 1: Buca di potenziale a pareti finite

Sia dato il potenziale costante a tratti

$$U(x) = \begin{cases} U & \textbf{se } x < -a \\ 0 & \textbf{se } -a \leq x < a \\ U & \textbf{se } x \geq a \end{cases} \tag{6.1}$$

Discutere l'esistenza di stati legati.

SOLUZIONE:

Imposto il problema

$$\psi\left(x\right) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{se } x < -a \\ Be^{ikx} + Ce^{-ikx} & \text{se } -a \leq x < a \\ De^{-\kappa x} & \text{se } x \geq a \end{cases} \tag{6.2}$$

con

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m\left(U - E\right)}{\hbar^2}} \qquad k = \sqrt{\frac{2m\left(E\right)}{\hbar^2}} \tag{6.3}$$

Raccordo ψ e ψ'

$$\begin{aligned}
\psi(-a) &\Rightarrow & Ae^{-\kappa a} = Be^{-ika} + Ce^{ika} && (6.4)\\
\psi'(-a) &\Rightarrow & \kappa Ae^{-\kappa a} = ikBe^{-ika} - ikCe^{ika} && (6.5)\\
\psi(a) &\Rightarrow & De^{-\kappa a} = Be^{ika} + Ce^{-ika} && (6.6)\\
\psi'(a) &\Rightarrow & -\kappa De^{-\kappa a} = ikBe^{ika} - Cike^{-ika} && (6.7)
\end{aligned}$$

Risolvo:

$$\begin{pmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-ika} & -e^{ika} & 0 \\ \kappa e^{-\kappa a} & -ike^{-ika} & ike^{ika} & 0 \\ 0 & -e^{ika} & -e^{-ika} & e^{-\kappa a} \\ 0 & -ike^{ika} & ike^{-ika} & -\kappa e^{-\kappa a} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \\ C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \tag{6.8}$$

Ha soluzioni non ovvie solo quando il determinante é uguale a zero.
Prendo la quarta colonna:

$$det = e^{-\kappa a}(-1)^{4+3} \begin{vmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ \kappa e^{-\kappa a} & -ike^{-ika} & ike^{ika} \\ 0 & -ike^{ika} & ike^{-ika} \end{vmatrix} - \kappa e^{-\kappa a}(-1)^{4+4} \begin{vmatrix} e^{-\kappa a} & -e^{-ika} & -e^{ika} \\ \kappa e^{-\kappa a} & -ike^{-ika} & ike^{ika} \\ 0 & -e^{ika} & -e^{-ika} \end{vmatrix} \tag{6.9}$$

$$\begin{aligned}
0 &= -e^{-\kappa a}\left(e^{-\kappa a}k^2 e^{-2ika} + ik\kappa e^{2ika}e^{-\kappa a} - k^2 e^{2ika}e^{-\kappa a} + ik\kappa e^{-2ika}e^{-\kappa a}\right) + \\
&\quad -\kappa e^{-\kappa a}\left(ike^{-2ika}e^{-\kappa a} + \kappa e^{2ika}e^{-\kappa a} + ike^{2ika}e^{-\kappa a} - \kappa e^{-2ika}e^{-\kappa a}\right) \qquad (6.10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
0 &= -\left[-k^2 2i\sin(2ka) + ik\kappa 2i\cos(2ka)\right] + \\
&\quad -\kappa\left[2ik\cos(2ka) + 2i\kappa\sin(2ka)\right] \qquad (6.11)
\end{aligned}$$

$$0 = \left(k^2 - \kappa^2\right)\sin(2ka) - 2k\kappa\cos(2ka) \tag{6.12}$$

$$0 = \left(k^2 - \kappa^2\right)2\sin(ka)\cos(ka) - 2k\kappa\left[\cos^2(ka) - \sin^2(ka)\right] \tag{6.13}$$

Divido per $2\cos^2(ka)$

$$0 = \left(k^2 - \kappa^2\right)\tan(ka) - k\kappa\left[1 - \tan^2(ka)\right] \tag{6.14}$$

$$0 = k\kappa\tan^2(ka) + \left(k^2 - \kappa^2\right)\tan(ka) - k\kappa \tag{6.15}$$

$$\tan(ka)_{1-2} = \frac{-\left(k^2-\kappa^2\right) \pm \sqrt{\left(k^2-\kappa^2\right)^2+4k^2\kappa^2}}{2k\kappa} \tag{6.16}$$

$$= \frac{-\left(k^2-\kappa^2\right) \pm \left(k^2+\kappa^2\right)}{2k\kappa} \tag{6.17}$$

Le soluzioni sono

$$\tan(ka) = \frac{\kappa}{k} \qquad \cot(ka) = -\frac{\kappa}{k} \tag{6.18}$$

Torniamo alle condizioni al contorno.
Moltiplicando la (6.4) per $-\kappa$ e sommandola alla (6.5)

$$0 = -\kappa B e^{-ika} - C\kappa e^{ika} + ikBe^{-ika} - ikCe^{ika} \tag{6.19}$$

$$B\left(-\kappa e^{-ika} + ike^{-ika}\right) = C\left(\kappa e^{ika} + ike^{ika}\right) \tag{6.20}$$

$$\frac{C}{B} = \frac{ik-\kappa}{ik+\kappa} e^{-i2ka} \tag{6.21}$$

Dalla (6.6)

$$\frac{D}{B} = \left(e^{ika} + \frac{C}{B} e^{-ika}\right) e^{\kappa a} \tag{6.22}$$

Dalla (6.4)

$$\frac{A}{B} = \left(e^{-ika} + \frac{C}{B} e^{ika}\right) e^{\kappa a} \tag{6.23}$$

Vediamo quanto valgono i tre rapporti nei due casi previsti da (6.18). A tal fine ricaviamo una utile formula

$$\tan(ka) = -i\frac{e^{ika}-e^{-ika}}{e^{ika}+e^{-ika}} = -i\frac{1-e^{-2ika}}{1+e^{-2ika}} \tag{6.24}$$

$$\left(1+e^{-2ika}\right)\tan(ka) = -i\left(1-e^{-2ika}\right) \tag{6.25}$$

$$e^{-2ika} = \frac{i+\tan(ka)}{i-\tan(ka)} \tag{6.26}$$

Vediamo le soluzioni del primo tipo, ovvero con $\tan(ka) = \frac{\kappa}{k}$

$$e^{-2ika} = \frac{i+\frac{\kappa}{k}}{i-\frac{\kappa}{k}} \tag{6.27}$$

$$\frac{C}{B} = 1 \qquad \frac{D}{B} = 2e^{\kappa a}\cos(ka) \qquad \frac{A}{B} = 2e^{\kappa a}\cos(ka) \tag{6.28}$$

In questo caso la funzione d'onda é:

$$\psi(x) = \begin{cases} 2B\cos(ka)e^{\kappa(x+a)} & \text{se } x < -a \\ B\left(e^{ikx} + e^{-ikx}\right) & \text{se } -a \le x < a \\ 2B\cos(ka)e^{\kappa(a-x)} & \text{se } x \ge a \end{cases} \tag{6.29}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} 2B\cos(ka)e^{\kappa(x+a)} & \text{se } x < -a \\ B2\cos(kx) & \text{se } -a \le x < a \\ 2B\cos(ka)e^{\kappa(a-x)} & \text{se } x \ge a \end{cases} \tag{6.30}$$

Queste sono soluzioni pari. Vediamo le soluzioni del secondo tipo, ovvero con $\cot(ka) = -\frac{\kappa}{k}$

$$e^{-2ika} = \frac{i - \frac{k}{\kappa}}{i + \frac{k}{\kappa}} \tag{6.31}$$

$$\frac{C}{B} = -1 \qquad \frac{D}{B} = 2ie^{\kappa a}\sin(ka) \qquad \frac{A}{B} = -2ie^{\kappa a}\sin(ka) \tag{6.32}$$

In questo caso la funzione d'onda é:

$$\psi(x) = \begin{cases} -2iB\sin(ka)e^{\kappa(x+a)} & \text{se } x < -a \\ B\left(e^{ikx} - e^{-ikx}\right) & \text{se } -a \le x < a \\ 2iB\sin(ka)e^{\kappa(a-x)} & \text{se } x \ge a \end{cases} \tag{6.33}$$

$$\psi(x) = \begin{cases} -2iB\sin(ka)e^{\kappa(x+a)} & \text{se } x < -a \\ B2i\sin(kx) & \text{se } -a \le x < a \\ 2iB\sin(ka)e^{\kappa(a-x)} & \text{se } x \ge a \end{cases} \tag{6.34}$$

Queste sono soluzioni dispari. In entrambi i casi la costate B si trova imponendo la norma unitaria.
Per discutere l'esistenza di stati legati ricorro alle due variabili ausiliarie (adimensionali)

$$\xi \equiv ka \qquad \eta \equiv \kappa a \tag{6.35}$$

Dalle definizioni (6.3) vediamo che

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{2mUa^2}{\hbar^2} \tag{6.36}$$

Le soluzioni pari si trovano risolvendo il seguente sistema lineare (intersezioni)

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mUa^2}{\hbar^2} \\ \xi\tan\xi = \eta \end{cases} \tag{6.37}$$

Le soluzioni dispari si trovano risolvendo il seguente sistema lineare (intersezioni)

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = \frac{2mUa^2}{\hbar^2} \\ \xi \cot \xi = -\eta \end{cases} \tag{6.38}$$

Dal grafico (6.1) notiamo che dentro una buca a pareti finite esiste sempre almeno uno stato legato pari.
Nel limite in cui la buca diventa a pareti infinite $U \to +\infty$ abbiamo che nella buca cadono infiniti stati legati con energia

$$k_n a = n\frac{\pi}{2} \Rightarrow E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{(2a)^2\, 2m} \tag{6.39}$$

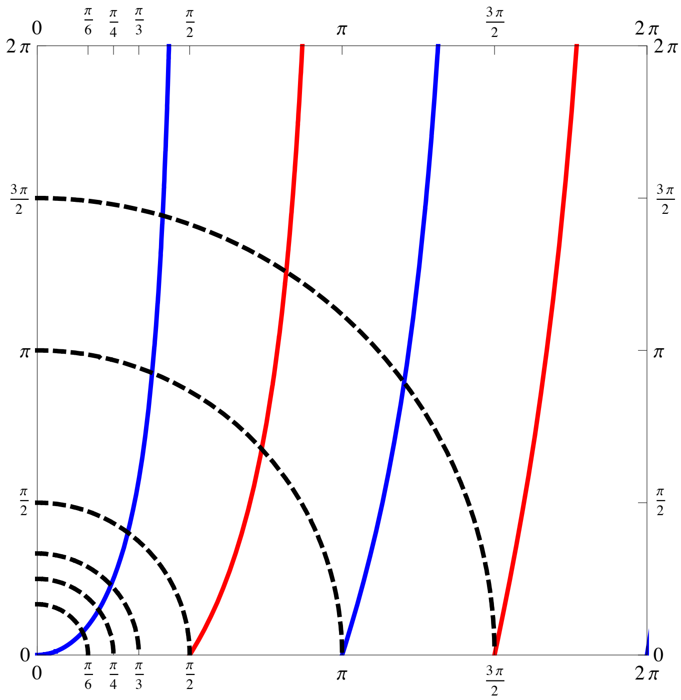

Figura 6.1: Nel plot abbiamo ξ in ascissa e η in ordinata. Le intersezioni di tratteggio con blu (rosso) danno le soluzioni pari (dispari).

6.2 Esercizio # 2: Confinamento di un elettrone

Data una buca rettangolare per cui $\frac{2mUa^2}{\hbar^2} = \left(\frac{7\pi}{4}\right)^2$, si consideri un elettrone ivi confinato. Quanti stati legati ci sono? Trovare la parità dello stato legato di massima energia. Quanti nodi ha?

SOLUZIONE: 4, 3

6.3 Esercizio # 3: Confinamento di un elettrone

Un elettrone é intrappolato in un potenziale a buca rettangolare a pareti finite di ampiezza $3\,\text{Å}$ e profondità $100\,\text{meV}$. Quali sono le possibili frequenze di assorbimento di questo sistema?

SOLUZIONE:

Calcolo il raggio della circonferenza nel grafico $\eta(\xi)$

$$\rho = \sqrt{\frac{2ma^2U}{\hbar^2}} = 0.243 \tag{6.40}$$

Essendo molto piccolo possiamo calcolare l'intersezione del sistema approssimando la funzione tan in modo lineare

$$\begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = 0.243^2 \\ \eta = \xi \tan \xi \end{cases} \approx \begin{cases} \xi^2 + \eta^2 = 0.243^2 \\ \eta = \xi^2 \end{cases} \tag{6.41}$$

che ha come soluzione $\xi = 0.23648992$, $\eta = 0.055927482$.
Per trovare l'energia dello stato legato possiamo applicare una delle (6.3).

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{0.23648992}{a}\right)^2 = 94.7\,\text{meV} \tag{6.42}$$

Si ha un solo stato eccitato di energia $94.7\,\text{meV}$. Il sistema assorbe per $\nu > \frac{(100-94.7)\,\text{meV}}{h} = 1.28 \times 10^{12}\,\text{Hz}$.

6.4 Esercizio # 4: Buca di potenziale a delta

Sia dato il potenziale

$$U(x) = -\alpha\delta(x) \tag{6.43}$$

Discutere l'esistenza di stati legati.

SOLUZIONE:

Gli stati legati avvengono per $E < 0$, in questo caso

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{se } x < 0 \\ Be^{-\kappa x} & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{6.44}$$

Per continuità di ψ

$$A = B \tag{6.45}$$

Integriamo l'equazione di S. indipendente dal tempo e vediamo che in questo caso la ψ' è discontinua

$$\int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx \frac{-\hbar^2}{2m}\psi'' - \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx\alpha\delta(x)\psi = \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} dx\psi \tag{6.46}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\left[\psi'(+\epsilon) - \psi'(-\epsilon)\right] - \alpha\psi(0) = 0 \tag{6.47}$$

$$-\kappa A - \kappa A = -\frac{2m\alpha}{\hbar^2}A \tag{6.48}$$

$$\kappa = \frac{m\alpha}{\hbar^2} \tag{6.49}$$

Esiste un solo stato legato con energia

$$E = \frac{-\hbar^2\kappa^2}{2m} = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2} \tag{6.50}$$

Lo stato, avente un ben preciso valore di κ, ha soluzione (non normalizzata)

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{\kappa x} & \text{se } x < 0 \\ Ae^{-\kappa x} & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{6.51}$$

La soluzione é pari.

6.5 Esercizio # 5: Doppia buca di potenziale a delta

Sia dato il potenziale

$$U(x) = -\alpha\delta\,(x-a) - \alpha\delta\,(x+a) \tag{6.52}$$

Discutere l'esistenza di stati legati.

SOLUZIONE:
Ponendo $\Delta = \frac{2m\alpha}{\hbar^2}$, $\epsilon = \frac{\Delta}{2\kappa}$ si hanno stati legati pari quando

$$e^{-2\kappa a} = \frac{\hbar^2\kappa}{m\alpha} - 1 \tag{6.53}$$

ponendo $2\kappa a = x$ l'equazione trascendente

$$e^{-x} = \frac{\hbar^2}{2m\alpha a}x - 1 \tag{6.54}$$

esiste sempre una ed una sola soluzione.
Per gli stati legati dispari

$$e^{-2\kappa a} = 1 - \frac{\hbar^2\kappa}{m\alpha} \tag{6.55}$$

ponendo $2\kappa a = x$ l'equazione trascendente

$$e^{-x} = 1 - \frac{\hbar^2}{2m\alpha a}x \tag{6.56}$$

ha una sola soluzione solo quando $\alpha > \frac{\hbar^2}{2ma}$.
A seconda del parametro α possiamo avere una sola soluzione pari o una soluzione pari più una dispari.

Argomenti prima parte

1. Corpo nero
2. Effetto Fotoelettrico
3. Effetto Compton
4. Relazione di de Broglie
5. Regole di quantizzazione
   (a) Modellini Atomici
6. Meccanica Ondulatoria:
   (a) Funzioni d'onda $\psi(x)$ e $\phi(p)$ e loro interpretazione statistica
   (b) Principio di indeterminazione
   (c) Costruzione di operatori
   (d) Valori medi di operatori
7. Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo
   (a) Con potenziale costante a tratti
   (b) Con potenziale delta di Dirac (No 2012)
   (c) Problemi di scattering 1D
      i. Coefficienti di scattering, Effetto Tunnel, Risonanze
      ii. Ritardo quantistico (No 2012)
   (d) Stati legati
      i. di una buca a pareti infinite
      ii. di una buca a pareti finite
      iii. di una buca a delta di Dirac (No 2012)