

Lezione 20/10/2023

0.1 Proprietà generali dei sistemi unidimensionali

Consideriamo il problema

$$\psi''(x) + (\epsilon - U(x)) \psi(x) = 0, \quad (1)$$

con $U(x)$ funzione limitata inferiormente, continua o discontinua con discontinuità di prima specie e che all'infinito tende a infinito o a costante.

- Con queste assunzioni, la funzione d'onda e la sua derivata devono essere continue.
- Se il potenziale va a infinito per x finito, qui la derivata può essere discontinua.
- La funzione d'onda deve essere a un sol valore (si deve associare solo un valore di probabilità a ciascun intorno di x).
- *Le soluzioni di (1) possono essere scelte reali.* Supponiamo infatti che ψ_1 sia una funzione complessa che soddisfa (1). Il complesso coniugato dell'equazione (1) è

$$(\psi^*)''(x) + (\epsilon - U(x)) \psi^*(x) = 0,$$

quindi anche ψ_1^* soddisfa la (1). Possiamo quindi scegliere la soluzione

$$\psi_r = \psi_1 + \psi_1^*,$$

che è reale.

- Possiamo dividere l'asse reale in due tipi di regione

– **Tipo I:** in cui $\epsilon < U(x)$. Qui

$$\frac{\psi''}{\psi} > 0,$$

ossia la concavità della funzione d'onda è rivolta in direzione opposta all'asse x . Questo significa che nella regione I ci può essere al più uno zero (nodo) della funzione

– **Tipo II:** in cui $\epsilon > U(x)$. Qui

$$\frac{\psi''}{\psi} < 0,$$

ossia la concavità della funzione d'onda è rivolta verso l'asse x . In questa regione ci possono essere più nodi della funzione. Notare che un intervallo esterno di tipo II può dar luogo soltanto a un comportamento oscillante con infiniti zeri oppure ad un andamento asintotico costante diverso da zero.

- I flessi della funzione si incontrano soltanto nei nodi e nei punti di passaggio da una regione I a una regione II .
- *Non esistono soluzioni con energia $\epsilon < U_{min}$.* Se esistessero, non ci sarebbero mai regioni di tipo II per cui la funzione d'onda avrebbe una concavità tale per cui la funzione d'onda deve per forza divergere e quindi non è normalizzabile.
- Si possono avere stati legati solo se gli intervalli esterni sono di tipo I . Un intervallo esterno di tipo II si ha se $U \rightarrow U_\infty$ e $\epsilon > U_\infty$. In questo caso, asintoticamente si avrebbe

$$(\psi'')^*(x) + (\epsilon - U_\infty) \psi^*(x) = 0,$$

che dà luogo a un moto periodico.

- Aumentando la zona II aumenta $\left| \frac{\psi''}{\psi} \right|$, ossia il raggio di curvatura diminuisce e questo favorisce comportamenti oscillanti.
- *La funzione d'onda dell' n -simo livello discreto di energia ha $n - 1$ nodi (zeri).* Infatti partendo da $\epsilon < U_{min}$ imponiamo che la soluzione vada a zero in $-\infty$ e che sia positiva. Da quanto detto essa sarà una funzione monotona crescente e quindi non normalizzabile. Aumentando ϵ la funzione inizierà ad divergere più lentamente fino a quando ϵ supererà U_{min} . Vi saranno quindi due punti di passaggio x_1 e x_2 nei quali la funzione svilupperà un flesso, questo diminuirà ancor di più la pendenza della funzione che, per un certo ϵ_0 finirà per convergere anche a ∞ : questo è il primo stato legato che, per come è stato costruito, non ha nodi. Continuando ad aumentare ϵ , si svilupperà un nodo nella regione I esterna che però darà luogo ancora una volta a un comportamento divergente. Proseguendo, il nodo si sposterà nella zona II e da questo momento in poi la coda destra della funzione comincerà nuovamente ad avvicinarsi ad x fino a convergere per un valore ϵ_1 : il primo stato eccitato. Continuando così si vede che passando al successivo stato eccitato si genera un nuovo nodo.

- Se L'Hamiltoniana commuta con l'operatore parità (ossia se $U(x) = U(-x)$)

$$[\mathbf{H}, \mathbf{\Pi}] = 0,$$

allora gli autostati sono funzioni pari o dispari. Nel caso di stati legati, essendo non degeneri, la parità è fissata. Lo stato fondamentale deve essere pari perché non ha nodi, il primo eccitato è dispari e così via alternandosi. Nel caso di stati di diffusione dello spettro continuo, essendo degeneri è possibile costruire autostati di parità non definita.

Teorema 1. In un problema unidimensionale, non esistono degenerazioni dei livelli discreti.

Dimostrazione. Se per assurdo ci fossero due soluzioni normalizzabili con stessa energia si avrebbe

$$\frac{\psi_1''}{\psi_1} = \frac{\psi_2''}{\psi_2},$$

e quindi che

$$\frac{d}{dx} (\psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1) = \psi_1'' \psi_2 - \psi_2'' \psi_1 = 0,$$

ossia

$$\psi_1' \psi_2 - \psi_2' \psi_1 = \text{cost} = \alpha.$$

Essendo entrambe normalizzabili, $\psi_1(\infty) = \psi_2(\infty) = 0$ quindi $\alpha = 0$ e integrando

$$\ln \psi_1 = \ln \psi_2 + \text{cost},$$

ossia

$$\psi_1 = C \psi_2,$$

ossia le due funzioni rappresentano lo stesso stato. □

0.2 Operatore di parità

Si definisce a partire dall'azione sugli autostati della posizione

$$\begin{aligned} \Pi |x\rangle &= |-x\rangle, \\ \Pi |\psi\rangle &= \int dx \psi(x') \Pi |x'\rangle = \int dx' \psi(x') |-x'\rangle, \\ \langle x | \Pi | \psi \rangle &= \psi(-x). \end{aligned}$$

L'operatore di parità è hermitiano, infatti

$$\begin{aligned} \langle \phi | \Pi | \psi \rangle &= \int dx' \phi^*(x') \psi(-x'), \\ \langle \phi | \Pi | \psi \rangle^* &= \int dx' \phi(x') \psi^*(-x') = \int dx \phi(-x) \psi^*(x) = \langle \psi | \Pi | \phi \rangle. \end{aligned}$$

Inoltre, dalla proprietà

$$\Pi^2 = \mathbf{I},$$

segue che Π è unitario

$$\Pi^\dagger = \Pi^{-1} = \Pi,$$

e che ha autovalori

$$\lambda = \pm 1,$$

corrispondenti ad autofunzioni pari e dispari

$$\begin{aligned} \Pi |\psi_p\rangle &= |\psi_p\rangle, \\ \Pi |\psi_d\rangle &= -|\psi_d\rangle. \end{aligned}$$

Azione sugli operatori:

$$\mathbf{A}' = \Pi \mathbf{A} \Pi$$

$$\begin{aligned}
\langle x|\Pi\mathbf{x}\Pi|\psi\rangle &= \langle -x|\mathbf{x}\Pi|\psi\rangle = \int dx' \langle -x|\mathbf{x}\Pi|x'\rangle \psi(x') = \\
&= - \int dx' x \langle -x|-x'\rangle \psi(x') = - \int dx' x \delta(x-x') \psi(x') = \\
&= -x\psi(x) = -\langle x|\mathbf{x}|\psi\rangle
\end{aligned}$$

quindi

$$\begin{aligned}
\Pi\mathbf{x}\Pi &= -\mathbf{x}. \\
\{\mathbf{x}, \Pi\} &= 0 \\
\Pi\mathbf{x}^2\Pi &= \Pi\mathbf{x}\Pi\Pi\mathbf{x}\Pi = \mathbf{x}^2 \\
[\mathbf{x}^2, \Pi] &= 0
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle x|\Pi\mathbf{p}\Pi|\psi\rangle &= \langle -x|\mathbf{p}\Pi|\psi\rangle = \int ds \langle -x|\mathbf{p}|-s\rangle \psi(s) = \\
&= -i\hbar \int ds \delta'(-x+s) \psi(s) = i\hbar\psi'(x) = -\langle x|\mathbf{p}|\psi\rangle.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Pi\mathbf{p}\Pi &= -\mathbf{p}. \\
\{\mathbf{p}, \Pi\} &= 0. \\
[\mathbf{p}^2, \Pi] &= 0
\end{aligned}$$

Esercizio 1. Buca infinita. Data una particella di massa m in una dimensione sottoposta al potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } \frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2} \\ \infty & \text{altrove} \end{cases},$$

calcolare spettro e autostati dell'Hamiltoniana.

Sol: Per studiare l'equazione di Scroedinger indipendente dal tempo

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

Notiamo che la funzione d'onda deve essere diversa da zero soltanto per $\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$. In tale regione

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

con $k = \frac{\sqrt{2Em}}{\hbar}$. Inoltre, per simmetria, deve essere $A = \pm B$ ossia le soluzioni sono di due tipi

$$\psi_c(x) = A \cos kx,$$

$$\psi_s(x) = A \sin kx.$$

Per trovare gli stati legati, impongono che

$$\psi\left(-\frac{L}{2}\right) = \psi\left(\frac{L}{2}\right) = 0,$$

ossia

$$\cos k\frac{L}{2} = 0,$$

$$\sin k\frac{L}{2} = 0.$$

La prima è soddisfatta per

$$k = \frac{\pi(2j-1)}{L}, \quad j = 1, 2, 3, \dots$$

la seconda per

$$k = \frac{2j\pi}{L} \quad j = 1, 2, 3, \dots$$

Le energie sono quindi

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \frac{n^2}{L^2 m}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

$$\psi_{2j}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{\pi(2j-1)}{L} x,$$

$$\psi_{2j+1}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi j}{L} x.$$

Lo stesso problema si poteva studiare nel caso di buca non simmetrica

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x \leq L \\ \infty & \text{altrove} \end{cases}.$$

Ovviamente si tratta soltanto di una traslazione di coordinate

$$\phi_{2j}(x) = \psi_{2j}\left(x - \frac{L}{2}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{\pi(2j-1)}{L}x - \frac{\pi}{2}(2j-1)\right) = (-1)^{j+1} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{\pi(2j-1)}{L} x$$

$$\phi_{2j+1}(x) = \psi_{2j+1}\left(x - \frac{L}{2}\right) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi j}{L}x - \pi j\right) = (-1)^j \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2\pi j}{L} x,$$

data l'arbitrarietà della fase possiamo riassumere il tutto in

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi}{L} x.$$