Stati legati per potenziali singolari

November 29, 2016

In questa dispensa consideriamo alcuni esempi di soluzione del problema della determinazione degli stati legati (in una dimensione) per potenziali singolari, cioè descritti da funzioni delta. In linea di principio questi sono i problemi più semplici, dato che si riducono all'implementazione delle condizioni di raccordo tra soluzioni semplici valide sugli intervalli regolari (ossia su cui il potenziale è regolare); ma come vedremo, al di là del caso più semplice già la considerazione del potenziale con due delta presenta delle difficoltà computazionali.

1 Potenziale delta

Consideriamo l'operatore di Schroedinger con potenziale

$$V(x) \ = \ -A \ \delta(x) \ ,$$

dove A è una costante reale (positiva); ovviamente abbiamo

$$\sigma_{ess} \ = \ [0,\infty) \ .$$

Ci interessa però determinare gli stati legati, ossia le soluzioni di

$$H\psi \ = \ E\psi$$

con $E < 0$.

Al di fuori del punto $x = 0$, il problema si riduce a

$$- \ \frac{\hbar^2}{2m} \ \psi_{xx} \ = \ -|E| \ \psi \ ,$$

ovvero

$$\psi_{xx} \ = \ \mu^2 \ \psi \ , \quad \mu^2 \ = \ \frac{2m|E|}{\hbar^2} \ > \ 0 \ .$$

Indichiamo con un indice $(-,+)$ le funzioni negli intervalli $(-\infty,0)$ e $(0,\infty)$ rispettivamente. Abbiamo immediatamente

$$\psi_{(\pm)}(x) \ = \ a_{(\pm)} \ e^{\mu x} \ + \ b_{(\pm)} \ e^{-\mu x} \ .$$

E' anche immediato vedere che la condizione di normalizzabilità di ψ – cioè in sostanza la richiesta di avere $\psi \in L^2(R)$ – richiede

$$b_{(-)} \ = \ 0 \ = \ a_{(+)} \ .$$

Quindi

$$\psi(x) \ = \ \begin{cases} \psi_{(-)}(x) \ = \ a_{(-)} \, e^{\mu x} & \text{per } x < 0 \\ \psi_{(+)}(x) \ = \ b_{(+)} e^{-\mu x} & \text{per } 0 < x. \end{cases}$$

D'ora in poi scriveremo $a_{(-)} = a$, $b_{(+)} = b$; quindi

$$\psi(x) \ = \ \begin{cases} \psi_{(-)}(x) \ = \ a \ e^{\mu x} & \text{per } x < 0 \\ \psi_{(+)}(x) \ = \ b \ e^{-\mu x} & \text{per } 0 < x. \end{cases}$$

Le condizioni di raccordo in $x = \pm 1$ sono

$$\begin{cases} \psi_{(-)}(0) \ = \ \psi_{(+)}(0) & , \\ \psi'_{(+)}(0) \ = \ \psi'_{(-)}(0) \ - \ \widehat{A} \, \psi_{(-)}(0) & , \end{cases}$$

avendo scritto

$$\widehat{A} \ := \ (2mA/\hbar^2) \ .$$

La prima condizione implica che

$$b \ = \ a \ ;$$

abbiamo quindi

$$\psi_{(\pm)}(x) \ = \ a \ e^{\mp \mu x} \ .$$

Osservando che

$$\psi'_{(\pm)}(x) \ = \ \mp \, a \, \mu \ e^{\mp \mu x} \ ,$$

la seconda condizione di raccordo diventa

$$-a \, \mu \ = \ a\mu \ - \ \widehat{A} \, a \ ,$$

che fornisce immediatamente

$$\mu \ = \ \frac{\widehat{A}}{2} \ = \ \frac{m \, A}{\hbar^2} \ .$$

Ricordando la definizione di μ in termini dell'energia $E = -|E|$ dello stato legato, abbiamo

$$|E| \ = \ \frac{m \, A^2}{2 \, \hbar^2} \ .$$

Notiamo che questo determina (univocamente) μ, quindi l'energia E. Il parametro a non è invece stato determinato, ma il suo valore (a meno di una fase θ, che può essere presa uguale a zero) segue immediatamente dalla condizione di normalizzazione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \ dx \ = \ 1 \ .$$

Infatti abbiamo

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 \ dx \ = \ 2 \int_0^\infty |a \ e^{-\mu x}|^2 \ dx \ = \ 2 \ |a|^2 \int_0^\infty e^{-2\mu x} \ dx$$
$$= \ - \ \left[\frac{|a|^2}{\mu} \right]_0^\infty \ = \ \frac{|a|^2}{\mu} \ ;$$

quindi deve essere

$$|a|^2 \ = \ \mu \ ; \quad a \ = \ \sqrt{\mu} \ e^{i\theta} \ .$$

Notiamo infine che, come previsto dai risultati generali elencati in precedenza (nella sezione 1), l'unico stato legato – che è anche lo stato fondamentale – non ha nodi, ed è inoltre pari (qui il potenziale è evidentemente pari).

In conclusione,

$$|E| \ = \ \frac{\hbar^2 \, \mu^2}{2 \, m} \ ; \quad \psi(x) \ = \ \sqrt{\mu} \ e^{-\mu |x|} \ , \quad \mu = mA/\hbar^2 \ .$$

2 Potenziale con due delta

Consideriamo ora l'operatore di Schroedinger con potenziale

$$V(x) \ = \ -A \ \delta(x+1) \ - \ B \ \delta(x-1) \ ,$$

dove A e B sono costanti reali *positive* (se $A = B$ il potenziale è pari; altrimenti non ha una parità definita); ovviamente abbiamo

$$\sigma_{ess} \ = \ [0, \infty) \ ;$$

ci interessa determinare gli stati legati, ossia le soluzioni di

$$H\psi \ = \ E\psi$$

con $E < 0$.

Al di fuori dei punti $x = \pm 1$, il problema si riduce nuovamente a

$$- \ \frac{\hbar^2}{2m} \ \psi_{xx} \ = \ -|E| \ \psi \ ,$$

ovvero

$$\psi_{xx} \ = \ \mu^2 \ \psi \ , \quad \mu^2 \ = \ \frac{2m|E|}{\hbar^2} \ > \ 0 \ .$$

Indichiamo con un indice $(-, 0, +)$ le funzioni negli intervalli $I_{(-)} = (-\infty, -1)$, $I_{(0)} = (-1, 1)$ e $I_{(+)} = (1, \infty)$ rispettivamente. Abbiamo immediatamente

$$\psi_{(k)}(x) \ = \ a_{(k)} \ e^{\mu x} \ + \ b_{(k)} \ e^{-\mu x} \ .$$

E' anche immediato vedere che la condizione $\psi \in L^2(R)$ richiede

$$b_{(-)} \ = \ 0 \ = \ a_{(+)} \ .$$

Quindi

$$\psi(x) \;=\; \begin{cases} \psi_{(-)}(x) \;=\; a_{(-)}\; e^{\mu x} & \text{per } x < -1 \\ \psi_{(0)}(x) \;=\; a_{(0)}\; e^{\mu x} \;+\; b_{(0)} e^{-\mu x} & \text{per } -1 < x < 1 \\ \psi_{(+)}(x) \;=\; b_{(+)} e^{-\mu x} & \text{per } 1 < x . \end{cases}$$

Per alleggerire un po' la notazione scriviamo questa, cambiando la denominazione delle costanti, come

$$\psi(x) \;=\; \begin{cases} \psi_{(-)}(x) \;=\; a\; e^{\mu x} & \text{per } x < -1 \\ \psi_{(0)}(x) \;=\; c\; e^{\mu x} \;+\; d\; e^{-\mu x} & \text{per } -1 < x < 1 \\ \psi_{(+)}(x) \;=\; b e^{-\mu x} & \text{per } 1 < x . \end{cases}$$

Le condizioni di raccordo in $x = \pm 1$ sono (scrivendo $\widehat{A} := 2mA/\hbar^2$, ed analogamente per $\widehat{B}$)

$$\begin{cases} \psi_{(-)}(-1) \;=\; \psi_{(0)}(-1) & , \\ \psi_{(0)}(1) \;=\; \psi_{(+)}(1) & ; \\ \psi'_{(0)}(-1) \;=\; \psi'_{(-)}(-1) \;-\; \widehat{A}\,\psi_{(-)}(-1) & , \\ \psi'_{(+)}(1) \;=\; \psi'_{(0)}(-1) \;-\; \widehat{B}\,\psi_{(+)}(1) & . \end{cases}$$

Queste possono essere scritte in forma matriciale come

$$M\,\mathbf{p} \;=\; 0 \; ,$$

dove $\mathbf{p} = (a, b, c, d)^T$ e la matrice M è data esplicitamente da

$$M \;=\; \begin{pmatrix} e^{-\mu} & 0 & -e^{-\mu} & -e^{\mu} \\ 0 & e^{-\mu} & -e^{\mu} & -e^{-\mu} \\ e^{-\mu}(\widehat{A} - \mu) & 0 & e^{-\mu}\mu & -e^{\mu}\mu \\ 0 & e^{-\mu}(\widehat{B} - \mu) & -e^{\mu}\mu & e^{-\mu}\mu \end{pmatrix} \; .$$

Dato che si tratta di una equazione omogenea, la condizione per avere una soluzione non nulla è che sia

$$\mathrm{Det}(M) \;=\; 0 \; .$$

Da un calcolo esplicito[1] risulta

$$D(\mu) \equiv \mathrm{Det}(M) \;=\; -4\mu^2 + 2\widehat{A}\mu + 2\widehat{B}\mu + \widehat{A}\widehat{B}e^{-4\mu} - \widehat{A}\widehat{B} \; .$$

Notiamo che si ha sempre $D(0) = 0$; però $\mu = 0$ non soddisfa $\mu > 0$, ed in effetti appartiene allo spettro continuo, quindi non è una soluzione accettabile.

2.1 Caso $\widehat{A} = \widehat{B} = 1$

Notiamo che per $\widehat{A} = \widehat{B} = 1$ risulta

$$D(\mu) \;=\; -e^{-4\mu} - (1 - 2\mu)^2 \; ,$$

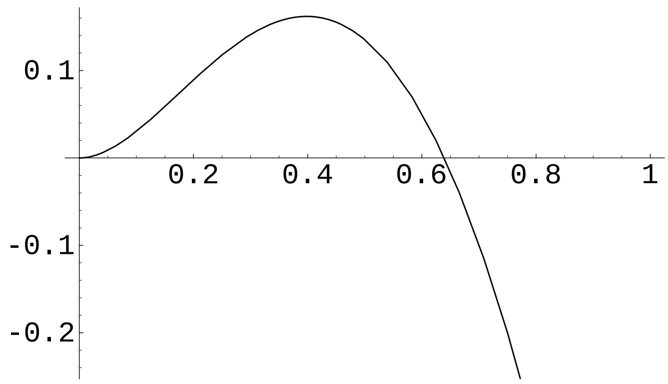

Figure 1: Il determinante di M (in funzione di μ) nel caso $\widehat{A} = \widehat{B} = 1$.

che si annulla solo per $\mu = 0$ e per $\mu = \mu_0 \simeq 0.639232$; v. Figura 1. Quindi abbiamo un solo stato legato, corrispondente a $\mu = \mu_0$.

Notiamo inoltre che avendo un potenziale pari, lo stato fondamentale (che come abbiamo visto è anche l'unico stato legato) deve essere pari; quindi necssariamente

$$b \ = \ a \ ; \quad d \ = \ c \ .$$

Questo permette una discussione semplificata. Infatti ora le condizioni di raccordo si riducono al sistema due dimensionale

$$M_R \, \mathbf{q} \ = \ 0 \ ,$$

con

$$M_R \ = \ \begin{pmatrix} e^{-\mu} & -e^{-\mu}\left(1 + e^{2\mu}\right) \\ -e^{-\mu}(\mu - 1) & e^{-\mu}\mu - e^{\mu}\mu \end{pmatrix} \ ; \quad \mathbf{q} \ = \ \begin{pmatrix} a \\ c \end{pmatrix} \ .$$

Naturalmente abbiamo

$$\mathrm{Det}(M_R) \ = \ -2\mu + e^{-2\mu} + 1 \ ,$$

che si annulla ancora in $\mu = 0$ ed in $\mu = \mu_0$.

2.2 Caso $A = B$

Nel caso simmetrico generale, cioè per $A = B \neq \hbar^2/(2m)$, abbiamo

$$M \ = \ \begin{pmatrix} e^{-\mu} & 0 & -e^{-\mu} & -e^{\mu} \\ 0 & e^{-\mu} & -e^{\mu} & -e^{-\mu} \\ e^{-\mu}(\widehat{A} - \mu) & 0 & e^{-\mu}\mu & -e^{\mu}\mu \\ 0 & e^{-\mu}(\widehat{A} - \mu) & -e^{\mu}\mu & e^{-\mu}\mu \end{pmatrix}$$

[1]Che in classe è stato sbagliato

e quindi $D(\mu) = \mathrm{Det}(M)$ risulta

$$D(\mu) \ = \ \left(-1 + e^{-4\mu}\right) \widehat{A}^2 + 4\mu\widehat{A} - 4\mu^2 \ ;$$

scrivendo

$$\mu \ = \ \widehat{A} \ \nu$$

otteniamo

$$D(\mu) \ = \ (\widehat{A})^2 \ \left[\exp(-4\widehat{A}\nu) \ - \ (1-2\nu)^2\right] \ .$$

questo si annulla sempre in $\mu = 0$. Inoltre si annulla in tutti i punti in cui

$$\exp(-4\widehat{A}\nu) \ = \ (1-2\nu)^2 \ ;$$

il termine a destra è una parabola rivolta verso l'alto con vertice in $(1/2, 0)$, che indicheremo con $g(\nu)$, mentre il membro di sinistra è un esponenziale decrescente, che indicheremo con $f(\nu)$. Si ha quindi (considerando la sola regione $\nu > 0$) una sola intersezione se $f'(0) > g'(0)$, e due intersezioni se $f'(0) < g'(0)$. Dato che $g'(0) = -4$, e $f'(0) = -4\widehat{A}$, la condizione per avere una sola soluzione è proprio $\widehat{A} < 1$, mentre per $A > 1$ si hanno *due* soluzioni. (Si vedano le figure 2 e 3.)

In particolare, per

$$\widehat{A} \ = \ 1 \ + \ \varepsilon \ ,$$

abbiamo una soluzione pari a

$$\mu_1 \ = \ \mu_0 \ + \ (1/2)\,\varepsilon \ + \ O(\varepsilon^2)$$

ed un'altra pari a

$$\mu_2 \ = \ \varepsilon \ + \ O(\varepsilon^2) \ .$$

2.3 Caso generale

Il caso generale è piuttosto complicato: infatti ora

$$D(\mu) \ = \ -4\mu^2 + 2\widehat{A}\mu + 2\widehat{B}\mu + \widehat{A}\widehat{B}e^{-4\mu} - \widehat{A}\widehat{B} \ .$$

Possiamo almeno cercare una soluzione perturbativamente[2], in particolare intorno alle soluzioni note per $\widehat{A} = \widehat{B}$. Poniamo quindi

$$\mu = \mu_* \ + \ \eta\,\varepsilon, \ \widehat{B} = \widehat{A} \ + \ b\,\varepsilon \ ,$$

dove μ_* sono le soluzioni per $\widehat{B} = \widehat{A}$. Allora, sviluppando in serie, otteniamo

$$\eta \ = \ \frac{b\,\mu_*}{2\,\widehat{A}\,(1 - \widehat{A} + 2\mu_*)} \ .$$

[2]Si tratta di perturbazioni "alla buona"; nel seguito del corso tratteremo – per quanto permesso dalla brevità del tempo – di teoria delle perturbazioni in MQ in modo più organico e rigoroso.

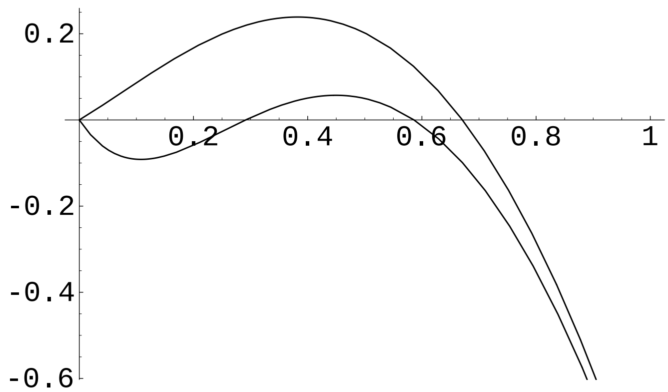

Figure 2: Il determinante di M (in funzione di ν) nel caso $\widehat{A} = \widehat{B}$; la curva superiore è stata tracciata con $\widehat{A} = 0.8$, quella inferiore con $\widehat{A} = 1.5$.

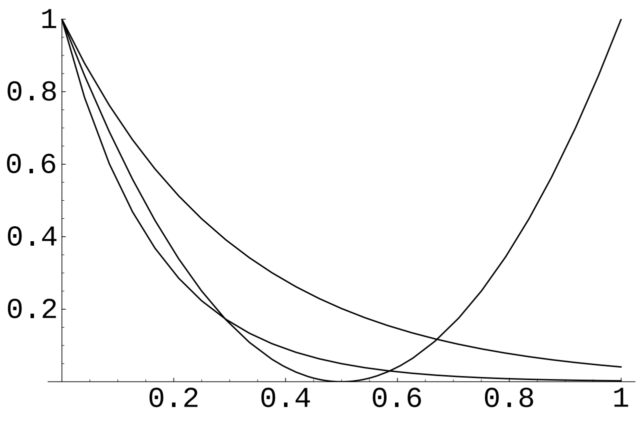

Figure 3: Le funzioni $\exp(-4\widehat{A}\nu)$ per $\widehat{A} = 0.8$ e $\widehat{A} = 1.5$ insieme alla parabola $(1-2\nu)^2$

Possiamo anche considerare perturbazioni intorno al caso $\widehat{A} = \widehat{B} = 1$. Poniamo ora

$$\widehat{A} = 1 + a\varepsilon \ , \quad \widehat{B} = 1 + b\varepsilon \ , \quad \mu = \mu_0 + \eta\varepsilon \ .$$

Abbiamo ora

$$\mathrm{Det}(M) \ = \ e^{-4\mu_0}(a + b - 4\eta)\left(e^{4\mu_0}(2\mu_0 - 1) + 1\right) \ \varepsilon \ + \ O(\varepsilon^2) \ ,$$

e quindi la soluzione è data da

$$\eta \ = \ \frac{a+b}{4} \ .$$

E' però possibile anxche cercare soluzioni intorno a $\mu = 0$; in questo caso poniamo

$$\mu \ = \ \eta \ \varepsilon$$

ed otteniamo

$$\mathrm{Det}(M) \ = \ \left(4\eta^2 - 2a\eta - 2b\eta\right)\varepsilon^2 \ + \ O(\varepsilon^3)$$

e quindi oltre alla ovvia soluzione $\eta = 0$ abbiamo anche

$$\eta \ = \ \frac{a+b}{2} \ ;$$

notiamo che questa è accettabile solo se $a + b > 0$ (e quindi $\eta > 0$, $\mu > 0$, $|E| > 0$).

3 Un altro potenziale a due delta

Vogliamo ora considerare un differente potenziale a due delta, vale a dire

$$V(x) \ = \ -B\,\delta(x+\xi) \ - \ B\,\delta(x-\xi) \ ,$$

con B e ξ costanti reali positive.

I calcoli sono in buona parte analoghi a quelli visti in precedenza, ma ora la posizione delle delta è un parametro variabile, e possiamo pensare di effettuare il limite $\xi \to 0$ (e scegliere $B = A/2$). In questo caso la ψ sarà continua, mentre ψ' avrà due salti (vicini) ognuno di ampiezza $B = A/2$; ci aspettiamo quindi di recuperare la situazione con una singola delta di profondità A.

Lo studente è invitato ad effettuare i calcoli relativi, e mostrare che in questo limite si ottiene la situazione corrispondente al caso di una singola delta di ampiezza A.

Risulta che

$$M \ = \ \begin{pmatrix} e^{-\mu} & 0 & -e^{-\mu} & -e^{\mu} \\ 0 & e^{-\mu} & -e^{\mu} & -e^{-\mu} \\ e^{-\mu\xi}(\widehat{B} - \mu) & 0 & e^{-\mu\xi}\mu & -e^{\mu\xi}\mu \\ 0 & e^{-\mu\xi}(\widehat{B} - \mu) & -e^{\mu\xi}\mu & e^{-\mu\xi}\mu \end{pmatrix} \ ;$$

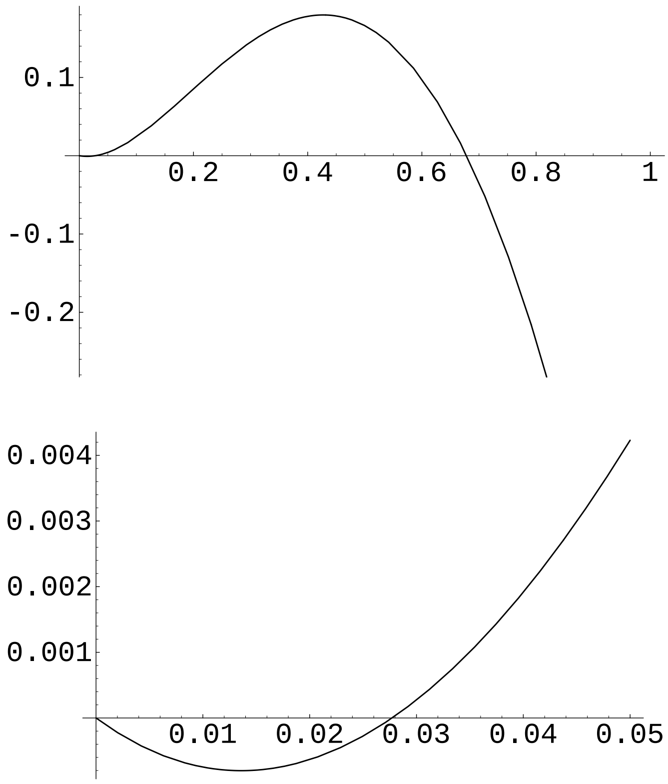

Figure 4: Plot del determinante di M (in funzione di μ) nel caso $\widehat{A} = 1.2$, $\widehat{B} = 0.9$; in alto per $\mu \in [0, 1]$; in basso ingrandimento della regione $\mu \simeq 0$.

$$\mathrm{Det}(M) \ = \ e^{-2\xi\mu-2\mu}\widehat{B}^2 - e^{2\mu-2\mu\xi}\widehat{B}^2 + 2e^{2\mu-2\mu\xi}\mu\widehat{B} + 2\mu\widehat{B} - e^{2\mu-2\mu\xi}\mu^2 - e^{2\mu\xi-2\mu}\mu^2 - 2\mu^2 \ ,$$

e sviluppando in serie secondo

$$\xi \ = \ \varepsilon, \quad \mu \ = \ \mu_* \ + \ \eta \ \varepsilon$$

si ottiene

$$\mathrm{Det}(M) \ = \ D_0 \ + \ D_1 \ \varepsilon \ + \ O(\varepsilon^2) \ ,$$

con

$$D_0 \ = \ -e^{-2\mu_*} \left(1 + e^{2\mu_*}\right) (\mu_* - \widehat{B}) \left(-e^{2\mu_*}\widehat{B} + \widehat{B} + e^{2\mu_*}\mu_* + \mu_*\right)$$

in cui i primi due fattori non si annullano mai, il terzo si annulla per $\mu_* = \widehat{B} = \widehat{A}/2$, e l'ultimo si annulla per $\mu_* = 0$; e

$$\begin{aligned} D_1 \ &= \ -2e^{-2\mu_*}\Big(\left(e^{4\mu_*}\eta + \eta - e^{4\mu_*}\mu_* + \mu_*\right)\widehat{B}^2 + e^{2\mu_*}\left(2e^{2\mu_*}\mu_*^2 - \eta\left(e^{2\mu_*}(2\mu_* + 1) + 1\right)\right)\widehat{B} \\ &\quad + \left(1 + e^{2\mu_*}\right)\mu_*\left(\eta\left(-\mu_* + e^{2\mu_*}(\mu_* + 1) + 1\right) - \left(-1 + e^{2\mu_*}\right)\mu_*^2\right)\Big) \ . \end{aligned}$$

Scegliendo $\mu_* = \widehat{B}$, otteniamo

$$D_1 \ = \ -2\widehat{B}e^{-2\widehat{B}}\left(2\widehat{B}^2 + e^{2\widehat{B}}\eta + \eta\right) \ ,$$

che si annulla per

$$\eta \ = \ -\frac{2\widehat{B}^2}{1 + e^{2\widehat{B}}} \ ,$$

col che abbiamo calcolato la correzione al primo ordine per μ corrispondente allo stato legato.