

Esercizio 1 Risolvere l'equazione di Schrödinger per una particella unidimensionale in presenza di un potenziale periodico:

$$H = \frac{P^2}{2m} + V(x), \quad V(x+L) = V(x). \quad (1)$$

$$H\psi = E\psi. \quad (2)$$

SOLUZIONE.

In rappresentazione $\{\mathcal{X}\}$ l'equazione agli autovalori (2) si scrive

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) + V(x)\psi_E(x) = E\psi_E(x)$$

ossia

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi_E(x) = 0. \quad (3)$$

Essendo questa una equazione differenziale del secondo ordine in x , allora esistono in generale due soluzioni indipendenti.

Risolviamola per $0 \leq x \leq L$. Consideriamo due soluzioni $u(x)$ e $v(x)$ tali che

$$\begin{aligned} u(0) &= 1 & u'(0) &= 0 \\ v(0) &= 0 & v'(0) &= 1 \end{aligned} \quad (4)$$

Supponiamo di conoscere la soluzione di (3) tra 0 ed L . Siano allora

$$\begin{aligned} u(L) &= a & u'(L) &= b \\ v(L) &= c & v'(L) &= d \end{aligned}$$

In $L \leq x \leq 2L$ la soluzione è la stessa di quella per $0 \leq x \leq L$, ma le condizioni iniziali sono diverse, dunque

$$u(x+L) = au(x) + bv(x) \quad v(x+L) = cu(x) + dv(x) \quad (5)$$

di conseguenza, iterando il procedimento, posso determinare completamente le soluzioni $u(x)$ e $v(x) \forall x \in \mathbb{R}$. In notazione matriciale, è possibile scrivere le (5) come

$$\begin{pmatrix} u(x+L) \\ v(x+L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u(x) \\ v(x) \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Ma noi non sappiamo ancora se queste soluzioni sono accettabili. Per vederlo, dobbiamo valutarne il comportamento all'infinito. Per valutare le soluzioni dell'equazione all'infinito, consideriamo $\varphi_{\pm}(x)$ tali che

$$\varphi_{\pm}(x+L) = \omega_{\pm} \varphi_{\pm}(x)$$

ossia, in forma matriciale,

$$\begin{pmatrix} \varphi_+(x+L) \\ \varphi_-(x+L) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega_+ & 0 \\ 0 & \omega_- \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_+(x) \\ \varphi_-(x) \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Per eseguire la diagonalizzazione, è necessario trovare le radici dell'equazione

$$\det \begin{pmatrix} a - \omega & b \\ c & d - \omega \end{pmatrix} = 0$$

ossia di

$$\omega^2 - (a + d)\omega + (ad - bc) = 0. \quad (8)$$

Prima di continuare ricordiamo il

Teorema 1 (del Wronskiano) *Date due soluzioni $u(x)$ e $v(x)$ della (3), il Wronskiano è definito da $W[u, v](x) = u(x)v'(x) - v(x)u'(x)$. Il teorema del Wronskiano afferma che $W(x)$ non dipende da x .*

DIMOSTRAZIONE

$\frac{d}{dx}W(x) = u''(x)v(x) - v''(x)u(x)$ e usando la (3) per u'' e v'' , si ottiene $\frac{d}{dx}W(x) = 0$. \square

Essendo il valore del wronskiano indipendente da x , allora è possibile valutarlo in $x = 0$, ottenendo

$$W[u, v] = 1.$$

Osservando che $ad - bc = u(L)v'(L) - v(L)u'(L) \equiv W[u, v](L) = 1$ allora l'equazione (8) diventa

$$\omega^2 - (u(L) + v'(L))\omega + 1 = 0. \quad (9)$$

Posto $\Delta \equiv u(L) + v'(L)$, otteniamo le radici

$$\omega_{\pm} = \frac{\Delta}{2} \pm \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} - 1}. \quad (10)$$

Sono allora possibili due casi:

1. $\frac{|\Delta|}{2} > 1$. In questo caso esistono due soluzioni reali e tali che $\omega_+\omega_- = 1$, che dunque possono essere rappresentate come $\omega_{\pm} = e^{\pm\alpha L}$, $\alpha \in \mathbb{R}$, $\alpha > 0$.
2. $\frac{|\Delta|}{2} < 1$. Le soluzioni sono allora due numeri complessi coniugati $\omega_{\pm} = e^{\pm ikL}$.

Nel primo caso, la diagonalizzazione porta a

$$\varphi_{\pm}(x + L) = e^{\pm\alpha L}\varphi_{\pm}(x)$$

ed iterando il procedimento ad $nL \leq x \leq (n + 1)L$, $n \in \mathbb{N}$, si ottiene

$$\varphi_{\pm}(x + nL) = e^{\pm\alpha nL}\varphi_{\pm}(x). \quad (11)$$

Questo vale chiaramente anche per $n \in \mathbb{Z}$, ossia per $n < 0$. Si vede dunque che queste soluzioni sono inaccettabili: per $n \rightarrow \infty$, la soluzione $e^{\alpha nL}$ diverge, mentre per $n \rightarrow -\infty$ diverge la soluzione $e^{-\alpha nL}$.

Nel secondo caso, invece, ripetendo il ragionamento di estensione delle soluzioni, si ottiene

$$\varphi_{\pm}(x + nL) = e^{\pm iknL}\varphi_{\pm}(x) \quad (12)$$

e sono accettabili in entrambi i limiti $n \rightarrow \pm\infty$. Di conseguenza, esistono soluzioni accettabili solo se

$$\frac{|\Delta|}{2} < 1.$$

Siccome avevamo posto $\Delta = u(L) + v'(L)$, con u, v soluzioni dell'equazione di Schrödinger, allora la dipendenza delle soluzioni dall'energia E fa sì che anche Δ sia funzione dell'energia. Questo significa che esistono dei valori di energia che non sono permessi. Infatti gli unici valori di energia permessi sono quelli tali che $\frac{|\Delta(E)|}{2} < 1$. Come vedremo nel prossimo esempio, questo spiega lo spettro a bande dei solidi, poiché la struttura atomica di un cristallo è costituita da ioni quasi fermi che generano un potenziale periodico tridimensionale.

Esempio 1 *Risolvere l'esercizio precedente in $0 \leq x \leq L$ per un potenziale della forma*

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & 0 \leq x \leq a \\ 0 & a \leq x \leq L \end{cases} \quad (13)$$

SOLUZIONE.

Chiamiamo I la regione $0 \leq x \leq a$ e II la regione $a \leq x \leq L$. In I l'equazione di Schrödinger (3) si scrive

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + k^2\psi_E(x) = 0, \quad (14)$$

dove è stato posto

$$\hbar k = \sqrt{2m(E + V_0)} \quad (15)$$

e nella regione II

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi_E(x) + \gamma^2\psi_E(x) = 0, \quad (16)$$

dove

$$\hbar\gamma = \sqrt{2mE}. \quad (17)$$

Nella regione I , le soluzioni soddisfacenti le condizioni iniziali (4) sono

$$u(x) = \cos(kx) \quad v(x) = \frac{1}{k} \sin(kx) \quad (18)$$

mentre, nella regione II , le soluzioni sono delle combinazioni lineari

$$u(x) = \alpha \cosh(\gamma x) + \beta \sinh(\gamma x) \quad v(x) = \delta \cosh(\gamma x) + \epsilon \sinh(\gamma x) \quad (19)$$

dove le costanti α, β si ottengono imponendo le condizioni di raccordo per $u(x)$ e γ, δ si ottengono dalle condizioni di raccordo per $v(x)$. Si ha:

$$\cos(ka) = \alpha \cosh(\gamma a) + \beta \sinh(\gamma a) \quad (20)$$

$$-k \sin(ka) = \gamma[\alpha \sinh(\gamma a) + \beta \cosh(\gamma a)] \quad (21)$$

$$\frac{1}{k} \sin(ka) = \delta \cosh(\gamma a) + \epsilon \sinh(\gamma a) \quad (22)$$

$$\cos(ka) = \gamma[\delta \sinh(\gamma a) + \epsilon \cosh(\gamma a)] \quad (23)$$

che risolte forniscono:

$$\alpha = \cos(ka) \cosh(\gamma a) + \frac{k}{\gamma} \sin(ka) \sinh(\gamma a) \quad (24)$$

$$\beta = -\sinh(\gamma a) \cos(ka) - \frac{k}{\gamma} \sin(ka) \cosh(\gamma a) \quad (25)$$

$$\delta = \frac{1}{k} \sin(ka) \cosh(\gamma a) - \frac{1}{\gamma} \sinh(\gamma a) \cos(ka) \quad (26)$$

$$\epsilon = -\frac{1}{k} \sinh(\gamma a) \sin(ka) + \frac{1}{\gamma} \cos(ka) \cosh(\gamma a). \quad (27)$$

Sostituendo in $\Delta = u(L) + v'(L)$, si ottiene

$$\Delta = 2 \cos(ka) \cosh \gamma(L - a) + \left(\frac{\gamma}{k} - \frac{k}{\gamma} \right) \sin(ka) \sinh \gamma(L - a). \quad (28)$$

I valori permessi di energia permessi sono quelli tali che $\frac{|\Delta|}{2} < 1$. Poiché la regione in cui ciò avviene tipicamente non è connessa, allora lo spettro viene detto “a bande”.