Soluzioni degli esercizi del foglio n.5 – a.a. 2013-4

21.

Tenendo conto delle condizioni al contorno $\psi(0) = \psi(a) = 0$, la formula generale dell'approssimazione WKB nella regione classicamente permessa fornisce:

$$\int_0^a dx\, p(x) = n\,\pi\,\hbar \qquad\qquad p(x) \equiv \sqrt{2m[E - V(x)]} \qquad\qquad (n = 1, 2, \ldots)$$

Nel caso in esame:

$$0 < x < \frac{a}{2}: \quad p(x) \equiv \sqrt{2m(E - V_0)} \qquad\qquad \frac{a}{2} < x < a: \quad p(x) \equiv \sqrt{2mE}$$

da cui

$$n\,\pi\,\hbar = \int_0^a dx\, p(x) = \int_0^{a/2} dx\, \sqrt{2m(E_n - V_0)} + \int_{a/2}^a dx\, \sqrt{2mE_n} = \sqrt{\frac{m}{2}}\, a\, \left(\sqrt{E_n - V_0} + \sqrt{E_n}\right)$$

e, ricordando l'esspressione di E_n^0 e quadrando ripetutamente:

$$2\sqrt{E_n(E_n - V_0)} = 4E_n^0 - 2E_n + V_0 \;\Rightarrow\; 16(E_n^0)^2 + V_0^2 - 16E_n^0\, E_n + 8E_n^0\, V_0 = 0 \;\Rightarrow$$

$$\Rightarrow E_n = E_n^0 + \frac{V_0}{2} + \frac{V_0^2}{16E_n^0} = E_n^0 \left[1 + \frac{1}{2}\frac{V_0}{E_n^0} + \frac{1}{16}\left(\frac{V_0}{E_n^0}\right)^2\right]$$

Ricordato che $\psi_n^0(x) = \sqrt{2/a}\,\sin(n\,\pi\,x/a)$ e trattando il gradino come una perturbazione, la teoria delle perturbazioni al primo ordine fornisce $E_n = E_n^0 + \Delta E_n$, con

$$\Delta E_n = \langle\psi_n^0|\Delta V|\psi_n^0\rangle = \int_0^{a/2} dx\, \frac{2}{a}\,\sin^2\left(\frac{n\,\pi}{a}\,x\right)\, V_0 = \frac{2V_0}{a}\int_0^{a/2} dx\,\sin^2\left(\frac{n\,\pi}{a}\,x\right) = \frac{2V_0}{a}\,\frac{a}{4} = \frac{V_0}{2}$$

L'ulteriore termine correttivo ottenuto con l'approssimazione WKB va a zero per $V_0 \ll E_n^0$ ovvero, dal momento che $E_n^0 \propto n^2$, per $n \to \infty$.

22.

(a) Con l'ansatz del testo per la funzione d'onda, $\psi(x) = \exp[i\, f(x)]$, l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo, $\psi'' = -(p^2/\hbar^2)\,\psi$, fornisce, dopo aver diviso per ψ e moltiplicato per $\hbar^2$:

$$i\,\hbar\, f'' - (f')^2 = -p^2$$

(b) Inserendo l'espansione di f in serie di potenze di $\hbar$ data nel testo, otteniamo:

$$i\,\hbar\,(f_0'' + \hbar\, f_1'' + \hbar^2\, f_2'' + \ldots) - (f_0' + \hbar\, f_1' + \hbar^2\, f_2' + \ldots)^2 = -p^2$$

ovvero, eguagliando i coefficienti delle diverse potenze di $\hbar$:

$$\hbar^0 : \quad (f_0')^2 = p^2 \,, \qquad \hbar : \quad i\, f_0'' = 2\, f_0'\, f_1' \,, \qquad \hbar^2 : \quad i\, f_1'' = 2\, f_0'\, f_2' + (f_1')^2 \,, \qquad \dots$$

(c) Nell'ipotesi $p^2 > 0$ (regione classicamente permessa):

$$f_0' = \pm p \quad \Rightarrow \quad f_0 = \pm \int dx\, p(x) \quad \& \quad f_0'' = \pm p'$$

$$i\, f_0'' = 2\, f_0'\, f_1' \quad \& \quad f_0' = \pm p \quad (f_0'' = \pm p') \quad \Rightarrow \quad f_1' = \frac{i}{2} \frac{p'}{p} \ \Rightarrow\ f_1 = \frac{i}{2} \log p + cost$$

da cui, indicata con $C = e^K$ un'opportuna costante

$$\psi = e^{\frac{i}{\hbar} f} = e^{\frac{i}{\hbar}(f_0 + \hbar f_1 + \dots)} = e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int dx\, p(x) - \frac{1}{2} \log\, p(x) + K} = e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int dx\, p(x)}\, p^{-\frac{1}{2}}\, e^K = \frac{C}{\sqrt{p(x)}}\, e^{\pm \frac{i}{\hbar} \int dx\, p(x)}$$

23.

Usando l'equazione ricordata nel testo dell'esercizio:

$$\gamma = \frac{1}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} dx\, |p(x)| = \frac{1}{\hbar} \int_0^{2a} dx\, \sqrt{2m(V_0 - E)} = \frac{2a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)} \qquad \Rightarrow \qquad T \simeq e^{-\frac{4a}{\hbar} \sqrt{2m(V_0 - E)}}$$

La soluzione esatta del problema (un esercizio standard dei corsi introduttivi di Meccanica Quantistica, ricordato in *Appendice*) è

$$T = \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \gamma}$$

L'approssimazione WKB assume che la probabilità di tunneling sia piccola, ovvero che γ sia grande. In tal caso, $\sinh \gamma = (1/2)(e^{\gamma} - e^{-\gamma}) \simeq (1/2) e^{\gamma}$ e $\sinh^2 \gamma \simeq (1/4) e^{2\gamma}$, cosicché il risulato esatto si riduce a

$$T \simeq \frac{1}{1 + \frac{V_0^2}{16E(V_0 - E)} e^{2\gamma}} \simeq \left[\frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} \right] e^{-2\gamma}$$

Il coefficiente entro parentesi quadre è di ordine uno, e la dipendenza dominante da E è contenuta nel fattore esponenziale: in questo senso si recupera il risultato WKB $T \simeq e^{-2\gamma}$.

Appendice. Ricordiamo come si risolve esattamente il problema. Scegliamo l'origine dell'asse x in modo tale che la barriera si estenda da $x = -a$ a $x = +a$. Per $E < V_0$, la forma generale della funzione d'onda sarà:

$$\psi(x) = \begin{cases} A\, e^{ikx} + B\, e^{-ikx} & (x < -a) \\ C\, e^{\kappa x} + D\, e^{-\kappa x} & (-a < x < a) \\ F\, e^{ikx} & (x > a) \end{cases} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Imponendo la continuità di ψ e di ψ' in $x = -a$ si ottengono le due equazioni:

$$A\, e^{-ika} + B\, e^{ika} = C\, e^{-\kappa a} + D\, e^{\kappa a} \qquad ik(A\, e^{-ika} - B\, e^{ika}) = \kappa(C\, e^{-\kappa a} - D\, e^{\kappa a})$$

da cui (tenendo conto che B non ci serve per il calcolo di T)

$$2Ae^{-ika} = \left(1 - i\frac{\kappa}{k}\right) Ce^{-\kappa a} + \left(1 + i\frac{\kappa}{k}\right) De^{\kappa a}$$

La continuità di ψ e di ψ' in $x = a$ fornisce invece, rispettivamente

$$Ce^{\kappa a} + De^{-\kappa a} = Fe^{ika} \qquad \kappa(Ce^{\kappa a} - De^{-\kappa a}) = ikFe^{ika}$$

da cui

$$2Ce^{\kappa a} = \left(1 + i\frac{k}{\kappa}\right) Fe^{ika} \qquad 2De^{-\kappa a} = \left(1 - i\frac{k}{\kappa}\right) Fe^{ika}$$

Mettendo tutto assieme troviamo

$$2Ae^{-ika} = \ldots = \frac{Fe^{ika}}{2}\left[2\left(e^{-2\kappa a} + e^{2\kappa a}\right) + i\frac{(\kappa^2 - k^2)}{k\kappa}\left(e^{2\kappa a} - e^{-2\kappa a}\right)\right] =$$
$$= \ldots = 2Fe^{ika}\left[\cosh(2\kappa a) + i\frac{(\kappa^2 - k^2)}{2k\kappa}\sinh(2\kappa a)\right]$$

da cui

$$T^{-1} = \frac{|A|^2}{|F|^2} = \left[\cosh^2(2\kappa a) + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{(2k\kappa)^2}\sinh^2(2\kappa a)\right] = 1 + \left[1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{(2k\kappa)^2}\right]\sinh^2(2\kappa a)$$

Osservato che

$$\left[1 + \frac{(\kappa^2 - k^2)^2}{(2k\kappa)^2}\right] = \ldots = \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}$$

avremo infine

$$T^{-1} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)}\sinh^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(V_0 - E)}\right)$$

24.

$$\int_{x_1}^{x_2} dx\, p(x) = \left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\hbar \qquad p(x) = \sqrt{2m\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)} \qquad x_2 = -x_1 = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{2E}{m}}$$

$$\left(n - \frac{1}{2}\right)\pi\hbar = m\omega\int_{-x_2}^{x_2} dx\sqrt{\frac{2E}{m\omega^2} - x^2} = 2m\omega\int_0^{x_2} dx\sqrt{x_2^2 - x^2} =$$
$$= m\omega\left[x\sqrt{x_2^2 - x^2} + x_2^2\sin^{-1}(x/x_2)\right]_0^{x_2} = m\omega x_2^2\sin^{-1}(1) = \frac{\pi}{2}m\omega x_2^2 = \frac{\pi}{2}m\omega\frac{2E}{m\omega^2} = \frac{\pi E}{\omega}$$

da cui

$$E_n = \left(n - \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots)$$

Poiché il conteggio delle soluzioni WKB comincia da $n = 1$, possiamo ridefinire $n = p + 1$, riottenendo così l'espressione canonica per gli autovalori dell'energia dell'oscillatore armonico,

$$E_p = \left(p + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \qquad (p = 0, 1, 2, \ldots)$$

Si noti che in questo caso l'approssimazione WKB fornisce il risultato esatto.

In x_1 abbiamo un punto di transizione con potenziale crescente, $V'(x_1) > 0$. Con un'opportuna traslazione possiamo far sì che $x_1 = 0$. Le soluzioni WKB a sinistra e a destra di $x_1 = 0$ si possono scrivere nel modo seguente:

$$\psi_{WKB}(x) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[A\, e^{\frac{i}{\hbar}\int_x^0 dx'\, p(x')} + B\, e^{-\frac{i}{\hbar}\int_x^0 dx'\, p(x')} \right] & (x < 0) \\ \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[C\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_0^x dx'\, |p(x')|} + D\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_0^x dx'\, |p(x')|} \right] & (x > 0) \end{cases}$$

Nella regione di raccordo con $x > 0$ la funzione d'onda WKB diventa, con la stessa notazione usata a lezione:

$$\psi_{WKB}(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}x^{1/4}} \left[C\, e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + D\, e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} \right]$$

Confrontando con

$$\psi_{int}(x) \simeq \frac{a}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}$$

otteniamo

$$a = 2D\sqrt{\frac{\pi}{\alpha\hbar}} \qquad b = C\sqrt{\frac{\pi}{\alpha\hbar}}$$

Nella regione di raccordo con $x < 0$ la funzione d'onda WKB diventa, con la stessa notazione usata a lezione:

$$\psi_{WKB}(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}} \left[A\, e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + B\, e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right]$$

Confrontando con

$$\psi_{int}(x) \simeq \frac{a}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] + \frac{b}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4}\right] =$$

$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} \left[(-ia + b) e^{i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} e^{i\pi/4} + (ia + b) e^{-i\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} e^{-i\pi/4} \right]$$

otteniamo, sfruttando i risultati ottenuti sopra per a e b:

$$A = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \left(\frac{-ia + b}{2}\right) e^{i\frac{\pi}{4}} = \left(\frac{C}{2} - iD\right) e^{i\frac{\pi}{4}} \qquad B = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \left(\frac{ia + b}{2}\right) e^{-i\frac{\pi}{4}} = \left(\frac{C}{2} + iD\right) e^{-i\frac{\pi}{4}}$$

Abbiamo così ottenuto le formule di raccordo che collegano (A, B) a (C, D) attorno a x_1.

Passiamo ora alla derivazione delle formule di raccordo attorno a x_2, tenendo presente che $V'(x_2) < 0$. Spezziamo la funzione d'onda WKB nella regione $x_1 < x < x_2$ come segue:

$$\psi_{WKB}(x) = \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[C\, e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx'\, |p(x')| + \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} dx'\, |p(x')|} + D\, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx'\, |p(x')| - \frac{1}{\hbar}\int_{x_2}^{x} dx'\, |p(x')|} \right]$$

Definiamo inoltre:

$$\gamma \equiv e^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} dx\, |p(x)|} \qquad\qquad C' \equiv D\, e^{-\gamma} \qquad D' \equiv C\, e^{\gamma}$$

Allora, traslando come in precedenza x_2 nell'origine per semplificare le formule, avremo:

$$\psi_{WKB}(x) \simeq \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{|p(x)|}} \left[C' \, e^{\frac{1}{\hbar}\int_x^0 dx' \, |p(x')|} + D' \, e^{-\frac{1}{\hbar}\int_x^0 dx' \, |p(x')|} \right] & (x < 0) \\ \frac{1}{\sqrt{p(x)}} \left[F \, e^{\frac{i}{\hbar}\int_0^x dx' \, p(x')} \right] & (x > 0) \end{cases}$$

Nella regione di raccordo avremo

$$\psi_{int}(x) = a \, Ai(-\alpha x) + b \, Bi(-\alpha x) \qquad \alpha \equiv \left(\frac{2m|V'(0)|}{\hbar^2} \right)^{1/3} \qquad p(x) = \hbar \alpha^{3/2} \sqrt{x}$$

Per $x < 0$ sarà $\int_x^0 dx' \, |p(x')| = (2/3)\hbar(-\alpha x)^{3/2}$, dunque dovremo confrontare

$$\psi_{WKB}(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}(-x)^{1/4}} \left[C' \, e^{\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + D' \, e^{-\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} \right]$$

con

$$\psi_{int}(x) \simeq \frac{a}{2\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} e^{-\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}} + \frac{b}{\sqrt{\pi}(-\alpha x)^{1/4}} e^{\frac{2}{3}(-\alpha x)^{3/2}}$$

ottenendo

$$a = 2\sqrt{\frac{\pi}{\alpha\hbar}} D' \qquad b = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha\hbar}} C'$$

Per $x > 0$ sarà $\int_0^x dx' \, p(x') = (2/3)\hbar(\alpha x)^{3/2}$, dunque dovremo confrontare

$$\psi_{WKB}(x) \simeq \frac{1}{\hbar^{1/2}\alpha^{3/4}x^{1/4}} F \, e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}}$$

con

$$\psi_{int}(x) \simeq \frac{a}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} \sin\left[\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] + \frac{b}{\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} \cos\left[\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2} + \frac{\pi}{4} \right] =$$
$$= \frac{1}{2\sqrt{\pi}(\alpha x)^{1/4}} \left[(-ia + b) e^{i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} e^{i\pi/4} + (ia + b) e^{-i\frac{2}{3}(\alpha x)^{3/2}} e^{-i\pi/4} \right]$$

ottenendo

$$ia + b = 0 \qquad F = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \left(\frac{-ia + b}{2} \right) e^{i\pi/4} \quad \Rightarrow \quad b = -i \, a = \sqrt{\frac{\pi}{\hbar\alpha}} \, e^{-i\pi/4} \, F$$

Mettendo assieme i risultati ottenuti attorno a x_2 arriviamo alle formule di collegamento:

$$C' = \sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \, b = e^{-i\pi/4} \, F \quad D' = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\hbar\alpha}{\pi}} \, a = \frac{i}{2} e^{-i\pi/4} \, F \;\Rightarrow\; D = e^{\gamma} \, e^{-i\pi/4} \, F \quad C = \frac{i}{2} e^{-\gamma} \, e^{-i\pi/4} \, F$$

Inserendo gli ultimi risultati ottenuti in quello ottenuto precedentemente per A:

$$A = \left(\frac{C}{2} - iD \right) e^{i\frac{\pi}{4}} = i \left(\frac{e^{-\gamma}}{4} - e^{\gamma} \right) F \quad \Rightarrow \quad T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{e^{-2\gamma}}{[1 - e^{-2\gamma}/4]^2}$$

Se $\gamma \gg 1$, il denominatore è sostanzialmente 1, e recuperiamo il risultato $T \sim e^{-2\gamma}$.