Un operatore il cui spettro ha una parte discreta e una continua

Mostriamo, con un esempio concreto, l'esistenza di operatori che hanno uno spettro in parte discreto e in parte continuo.
Consideriamo l'operatore,

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \tag{1}$$

ove $0 < x < \infty$ e

$$V(x) = 0 \ \ , \ \ se \ \ 0 < x < L \ \ e \ \ V(x) = V_0 > 0 \ \ , \ \ se \ \ x \geq L \ \ .$$

In meccanica quantistica l' operatore (1) è, in opportune unità, l' Hamiltoniana di una particella, che si muove sulla semiretta $x > 0$, soggetta a un potenziale esterno $V(x)$.
Studiamo il problema agli autovalori

$$H\psi = \lambda\psi$$

con condizioni al bordo

$$\psi(0) = 0 \ \ e \ \ lim_{x\to\infty}\psi(x) = 0\,. \tag{2}$$

Discutiamo separatamente il problema nelle due regioni $x < L$ e $x > L$, nella prima regione si ha

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi = \lambda\psi$$

la cui soluzione, tenendo conto della prima condizione al bordo nella (2), è

$$\psi = A\sin(\sqrt{\lambda}x) \ \ con \ \ \lambda > 0\,. \tag{3}$$

Nella seconda regione si ha

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi = (\lambda - V_0)\psi$$

trattiamo separatamente il caso $V_0 > \lambda$ e quello $V_0 < \lambda$. Nel primo caso le soluzioni sono

$$\psi(x) = Be^{-\sqrt{V_0-\lambda}x} + Ce^{+\sqrt{V_0-\lambda}x}\,,$$

se richiediamo che la soluzione non diverga all'infinito allora $C = 0$.
Raccordando le due soluzione (e le loro derivate) in $x = L$ si ha

$$A\sin(\sqrt{\lambda}L) = B\,e^{-\sqrt{V_0-\lambda}L}$$

$$\sqrt{\lambda}A\cos(\sqrt{\lambda}L) = -\sqrt{V_0-\lambda}\,B\,e^{-\sqrt{V_0-\lambda}L}$$

da cui si ottiene

$$\sqrt{\lambda}cotg\Big(\sqrt{\lambda}L\Big) = -\sqrt{V_0-\lambda}\ . \tag{4}$$

Utilizzando l'identità $\sin\theta = \pm 1/\sqrt{1+(cotg\theta)^2}$ per $\theta = \sqrt{\lambda}L$ e la (4) abbiamo che gli autovalori λ sono soluzione dell'equazione

$$\sin\sqrt{\lambda}L = \pm\sqrt{\frac{\lambda}{V_0}} \tag{5}$$

con la condizione $cotg\Big(\sqrt{\lambda}L\Big) < 0$.
Non è possibile trovare un'espressione esplicita delle soluzioni della (5), comunque è facile capire cosa succede, vedi Figura.
Se V_0 è abbastanza piccolo non si hanno soluzioni; se V_0 supera un certo valore critico V_* (che si può trovare facilmente) si ha un numero finito di autovalori $\lambda_1, \lambda_2, ...\lambda_N$.
Nel limite $V_0 = \infty$ si ottiene

$$\lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2} \quad n = 1, 2, ...$$

cioè il risultato per $V(x) = 0$ e condizioni al bordo $\psi(0) = \psi(L) = 0$.
Consideriamo ora il caso $\lambda > V_0$, è facile trovare le soluzioni:

$$\psi(x) = Bsin\sqrt{\lambda - V_0}x + Ccos\sqrt{\lambda - V_0}x\,,$$

imponendo il raccordo per $x = L$ con la (3) si vede facilmente che tutti i valori di λ sono permessi e le autofunzioni corrispondenti sono sempre oscillanti[1].

Riassumendo:
a) esistono N autovalori $\{\lambda_n\}$ discreti, con $\lambda_n < V_0$, con autofunzioni $\{\psi_n(x)\}$ normalizzabili oscillanti in $x < L$ e monotone decrescenti in $x > L$ (vedi Figura); notare che $N = 0$ se V_0 non supera il valore critico V_*
b) per $\lambda > V_0$ si ha un continuo di autovalori con autofunzioni non normalizzabili.

Nota
Esistono operatori con infiniti autovalori discreti e una parte continua dello spettro. Questo è il caso dell'Hamiltoniana dell'atomo di idrogeno in meccanica quantistica in cui $\lambda_n = -c/n^2$, $n = 1, 2, ...$, con autofunzioni ψ_n normalizzate e spettro continuo per $\lambda > 0$ con autofunzioni non normalizzabili.

[1] Notare che non si riesce a soddisfare la seconda condizione al bordo nella (2).

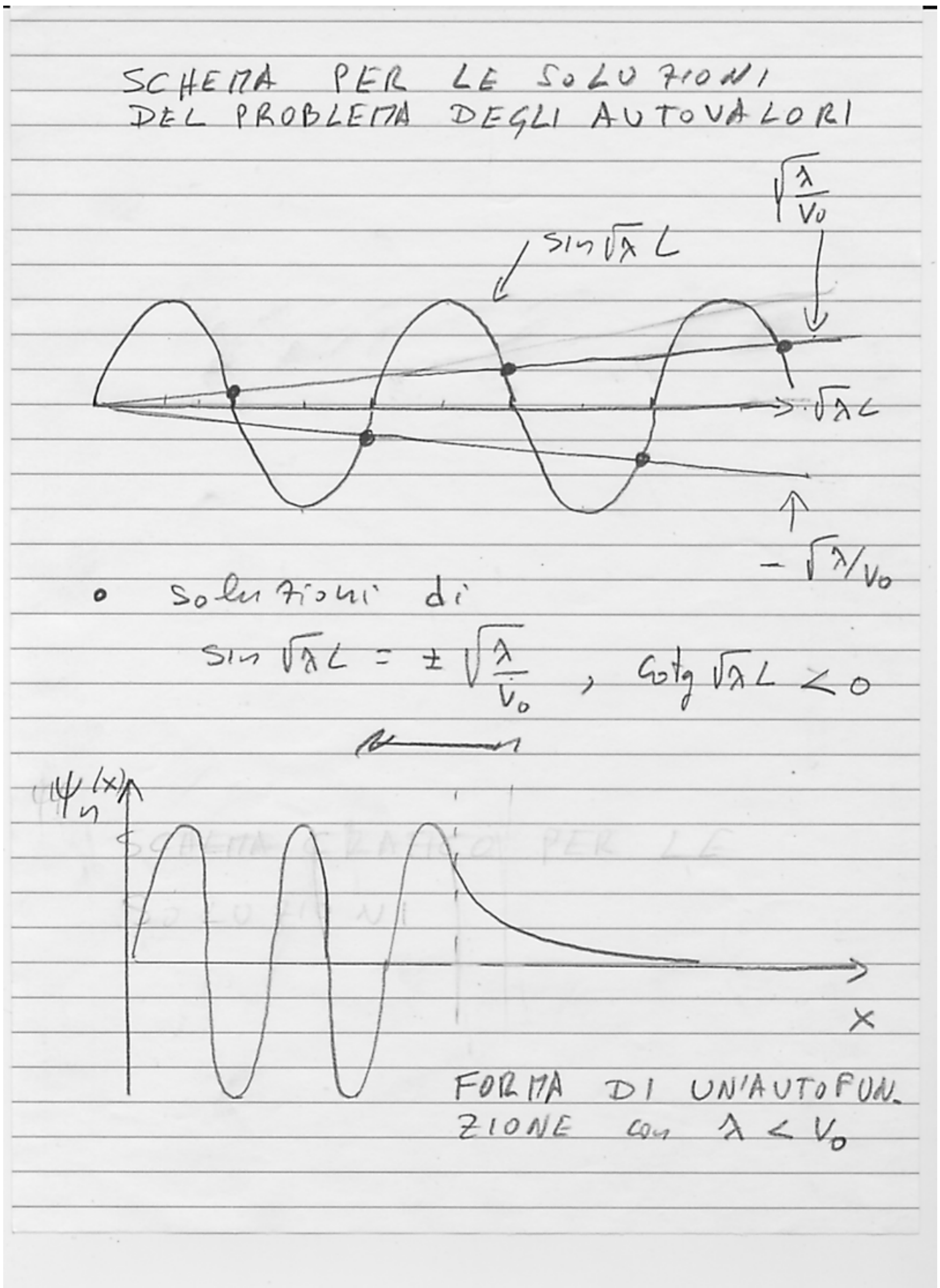

Fig. 1: Schema grafico per le soluzioni dell'equazione (5) e forma (qualitativa) di un'autofunzione normalizzata con $\lambda < V_0$