

# ATOMI E MOLECOLE

## Relazione di indeterminazione posizione-impulso

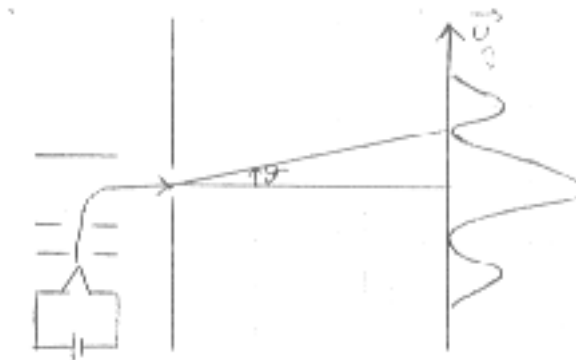
vedi *La Fisica di Feynman vol. 3, paragrafo 2-2*

In meccanica quantistica è nota la relazione di indeterminazione posizione-impulso, o relazione di indeterminazione di Heisenberg:

**Equazione 1** 
$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$$

secondo cui è impossibile conoscere contemporaneamente con precisione assoluta posizione ed impulso di un sistema lungo la stessa direzione o, se vogliamo, quanto più determinata è una grandezza tanto meno determinata è l'altra. Naturalmente l'Equazione 1 è confermata dagli esperimenti come quello che andiamo a descrivere.

Consideriamo una fenditura di ampiezza  $a$  investita da elettroni prodotti da un filamento riscaldato. Gli elettroni siano accelerati da un campo elettrico e selezionati da un campo magnetico che li deflette in modo da far passare dalla fenditura solo quelli aventi una certa energia



Gli elettroni che investono la fenditura siano caratterizzati in energia ed impulso. In particolare supponiamo che abbiano  $p_x = p_0$  e  $p_y = 0$ . Se l'ampiezza della fenditura è confrontabile con la

lunghezza d'onda  $\lambda = \frac{h}{p}$  associata all'elettrone si può osservare una figura di diffrazione con un

massimo centrale pronunciato e dei massimi secondari in cui ritroviamo poche unità percentuali di elettroni che hanno superato la fenditura. Possiamo trascurare i massimi secondari. Il primo minimo si ha ad un angolo  $\theta$  che verifica la relazione

**Equazione 2** 
$$\theta = \frac{\lambda}{a}$$

Rivelare un elettrone a  $\theta$  vuol dire che questo ha superato la fenditura con un impulso  $p_y \neq 0$ . Precisamente, per piccoli valori di  $\theta$  si ha

**Equazione 3** 
$$p_y \approx p_0 \theta = p_0 \frac{\lambda}{a}$$

Poiché la distribuzione è simmetrica, per ogni elettrone che ha impulso  $p_y > 0$  ce n'è un altro con impulso  $p_y < 0$ . In media, ma solo in media, gli elettroni che attraversano la fenditura hanno un

impulso  $p_y = 0$ . Quel che possiamo dire è che gli elettroni hanno un impulso noto con una indeterminazione

**Equazione 4**  $\Delta p_y \cong p_0 \frac{1}{a} = p_0 \frac{h}{p_0 a} = \frac{h}{a} \Rightarrow \Delta p_y a \cong h$

Se vediamo  $a$  come l'indeterminazione  $\Delta y$  sulla posizione  $y$  possiamo scrivere:

**Equazione 5**  $\Delta p_y \Delta y \cong h$

che non è ancora l'esatta relazione di indeterminazione di Heisenberg ma che già è in grado di mostrare come la misura della posizione possa influire su quella dell'impulso nel senso che abbiamo detto all'inizio del paragrafo. Se miglioriamo la misura di  $y$ , cioè se facciamo diminuire  $\Delta y$ , necessariamente  $\Delta p_y$  aumenta. Ciò è noto dall'esperienza della diffrazione in cui la distribuzione è tanto più larga ( $\Delta p_y$  grande) quanto più piccola è l'ampiezza  $a$  della fenditura ( $\Delta p_y$  piccolo).

(Così pure, quando vogliamo confinare delle particelle in una certa regione dello spazio dobbiamo spendere energia cinetica. Infatti se vogliamo localizzare la particella, cioè rendere  $\Delta y$  sempre più piccolo, dobbiamo aumentare  $\Delta p_y$  e cioè aumenta l'energia cinetica).

Vogliamo determinare, ad esempio, la posizione dell'elettrone di un atomo di idrogeno. Se  $a$  è la dimensione della regione all'interno della quale si trova l'elettrone, il suo impulso è:

**Equazione 6**  $p \cong \frac{h}{a}$ .

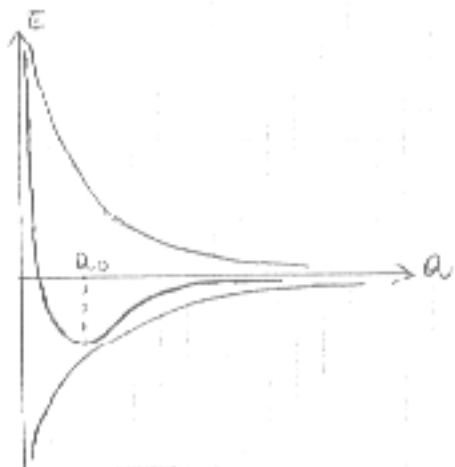
**Attenzione.** L'equazione precedente deve avere a primo membro lo scarto quadratico medio dell'impulso, non l'impulso stesso.

L'energia dell'elettrone è somma di un termine cinetico e di un termine potenziale:

**Equazione 7**  $E = E_c + E_p = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{a} = \frac{h^2}{2ma^2} - \frac{e^2}{a}$

il cui andamento è descritto in figura

Avendo l'elettrone impulso medio nullo, si ha  $\Delta p^2 = \langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2 = \langle p^2 \rangle$  e quindi si può scrivere l'equazione precedente.



Per piccoli valori di  $a$  prevale il termine cinetico e dunque la forza centrifuga repulsiva; viceversa, per grandi valori di  $a$  prevale il termine potenziale, cioè la forza coulombiana attrattiva. L'equilibrio si ha nel punto di minimo dell'energia:

**Equazione 8** 
$$\frac{dE}{da} = 0 \Rightarrow -\frac{\hbar^2}{ma^3} + \frac{e^2}{a^2} = 0 \Rightarrow a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2}$$

Se avessimo usato  $\hbar$  che compare nella esatta relazione di indeterminazione di Heisenberg, avremmo trovato

**Equazione 9**  $a_0 = 0.528 \text{ \AA}.$

che coincide con il raggio di Bohr dell'atomo di idrogeno cioè con la distanza alla quale è massima la probabilità di trovare l'elettrone. La coincidenza non è del tutto casuale come saremmo portati a credere per aver trascurato alcuni fattori, ma è una ulteriore conferma della bontà del principio di indeterminazione.

Sostituendo  $a_0$  nell'espressione dell'energia si trova il valore  $E_0 = -13.5 eV$  che rappresenta l'energia di legame tra l'elettrone ed il protone nell'atomo di idrogeno. Passando dall'atomo al sistema nucleare possiamo ripetere il ragionamento e determinare l'energia di legame di una particella all'interno del nucleo. Troviamo così per protoni e neutroni un'energia dell'ordine di  $10^6 eV$ .

### Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo. Particella in un potenziale.

Per i paragrafi seguenti vedi un qualsiasi testo di istituzioni di fisica teorica o di struttura della materia.

Attenzione: nel testo seguente non si fa sempre la dovuta distinzione tra probabilità e densità di probabilità

Dal corso di istituzioni di fisica teorica è nota l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per una particella in un potenziale. Scriviamola nel caso unidimensionale:

**Equazione 10** 
$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \mathbf{y}(x) = E \mathbf{y}(x)$$

L'equazione di S. ha due limitazioni: vale per particelle non relativistiche (perché abbiamo scelto l'hamiltoniana come operatore legato all'energia) inoltre non contiene termini di interazione che portano alla creazione o annichilazione di particelle.

Tra tutte le soluzioni dell'Equazione 10 dobbiamo scegliere quelle fisicamente accettabili.

Una funzione d'onda  $\mathbf{y}(x)$  e la sua derivata  $\frac{d\mathbf{y}(x)}{dx}$  devono essere finite, ad un sol valore, continue.

Il modulo quadro della funzione d'onda, infatti, è legato alla probabilità una discontinuità di  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  sarebbe associata a discontinuità della probabilità e questo comporterebbe l'esistenza di sorgenti o pozzi di particelle che noi escludiamo.

Spesso è necessario richiedere che la funzione d'onda sia normalizzabile cioè che soddisfi la condizione:

Visto il legame tra funzione d'onda e probabilità si richiede che SEMPRE la funzione d'onda sia normalizzabile.

**Equazione 11** 
$$\iiint \mathbf{y} \mathbf{y}^* dx dy dz = 1$$

perché ciò accada la  $\mathbf{y}$  deve tendere a zero all'infinito con sufficiente rapidità.  
 Scriviamo l'equazione di Schrödinger nella seguente forma:

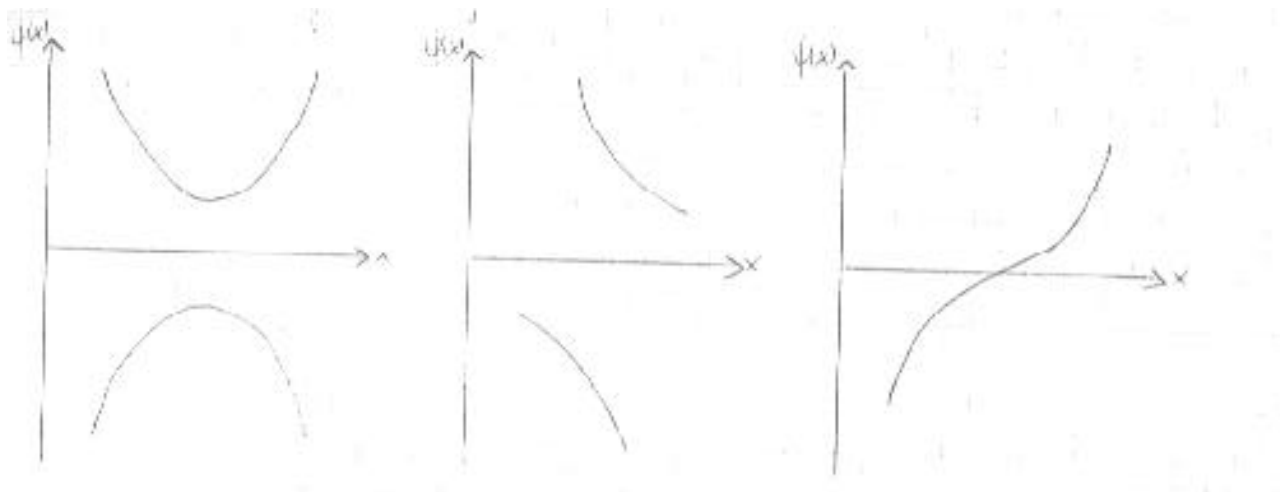
**Equazione 12** 
$$\frac{d^2\mathbf{y}(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\mathbf{y}(x)$$

Poniamo  $\frac{2m}{\hbar^2}[V(x) - E]\mathbf{y}(x) = \mathbf{a}^2$ . Distinguiamo due casi:

Se  $V(x) > E$ ,  $\mathbf{a}$  è una quantità reale e l'Equazione 12 ammette come soluzione generale una combinazione lineare tra  $e^{ax}$  e  $e^{-ax}$ :

**Equazione 13** 
$$\mathbf{y}(x) = c_1 e^{ax} + c_2 e^{-ax}$$

Poiché  $\frac{d^2\mathbf{y}(x)}{dx^2}$  e  $\mathbf{y}(x)$  avrebbero in questo caso lo stesso segno, l'Equazione 13 al variare dei coefficienti potrebbe assumere una delle seguenti forme:

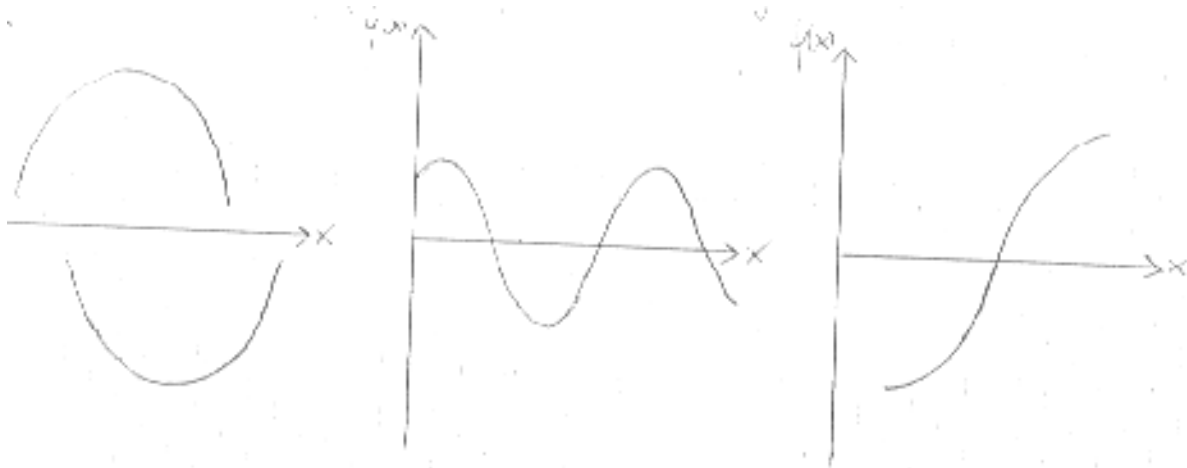


Tutti i casi illustrati non sono fisicamente accettabili perché  $\mathbf{y}(x)$  non si conserva finita per  $x \rightarrow \infty$  oppure  $x \rightarrow -\infty$ . Escludiamo dunque che  $V(x)$  possa essere maggiore di  $E$  in tutto l'intervallo di definizione di  $\mathbf{y}(x)$ .

Se  $V(x) < E$ ,  $\mathbf{a}$  è immaginario e la soluzione generale dell'Equazione 12 è la soluzione oscillante

**Equazione 14** 
$$\mathbf{y}(x) = c_1 e^{iax} + c_2 e^{-iax}$$

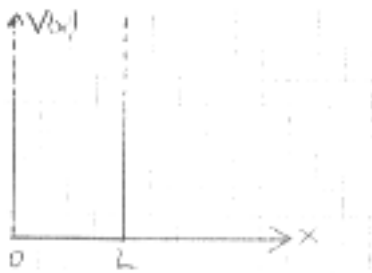
Osserviamo che in questo caso  $\frac{d^2\mathbf{y}(x)}{dx^2}$  e  $\mathbf{y}(x)$  hanno segno opposto. Sono possibili i seguenti andamenti per l'Equazione 14.



### Buca di potenziale a pareti rigide

Consideriamo il caso più semplice di una buca di potenziale a pareti infinite, cioè:

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



L'equazione di Schrödinger per la particella all'interno della buca si scrive.

**Equazione 15**  $\frac{d^2 \mathbf{y}}{dx^2} = -k^2 \mathbf{y}$

con

**Equazione 16**  $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

L'integrale generale dell'Equazione 15 è:

**Equazione 17**  $\mathbf{y}(x) = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$ .

Mediante semplici considerazioni è possibile dimostrare che la funzione d'onda deve annullarsi sulle pareti della buca. Imponendo la continuità della  $\mathbf{y}$  in 0 e in  $L$

si determina una delle due costanti  $c_1$  e  $c_2$ :

**Equazione 18**  $\mathbf{y}(0) = 0 \Rightarrow c_1 + c_2 = 0 \Rightarrow c_1 = -c_2$   
 $c_1(e^{ikL} - e^{-ikL}) = 0 \Rightarrow 2ic_1 \sin kL \Rightarrow$

**Equazione 19**  $A \sin kL = 0$ .

Siamo pervenuti al primo importante risultato: all'interno di un buca di potenziale a pareti infinite non tutti i valori di  $k$  sono possibili ma solo quelli che soddisfano l'Equazione 19, cioè

**Equazione 20**  $k_n = \frac{n\mathbf{P}}{L}$

La quantizzazione dei valori di  $k$  equivale ad una quantizzazione dei valori dell'energia, come si deduce dall'Equazione 16:

**Equazione 21**  $E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$

Il primo valore da poter dare a  $n$  è zero. Per  $n = 0$  si ha  $k = 0$  e  $\mathbf{y}(x) = 0, \forall x$ , e quindi non è un valore accettabile. La minima energia possibile per il sistema è allora quella che si ha  $n = 1$ .

Le funzioni d'onda sono

**Equazione 22**  $\mathbf{y}_n(x) = A \sin k_n x$

Possiamo determinare la costante  $A$  imponendo la condizione di normalizzazione

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{y} \mathbf{y}^* dx = 1 \Rightarrow |A|^2 \int_0^L \sin^2 k_n x dx = 1$$

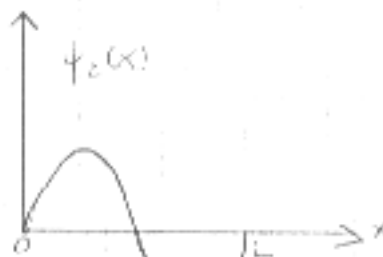
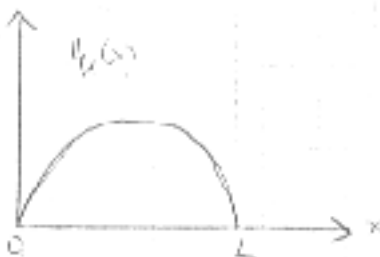
Si conclude che

**Equazione 23**  $A = \sqrt{\frac{2}{L}}$

Le funzioni d'onda sono dunque

**Equazione 24**  $\mathbf{y}_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\mathbf{P}}{L} x\right)$

Osserviamo che il numero  $n$  indica quante semilunghezze d'onda devono stare nell'intervallo  $[0, L]$ .



Ci chiediamo se la  $\mathbf{y}(x)$ , autofunzione dell'hamiltoniana del sistema, sia anche autofunzione dell'impulso. Nella rappresentazione delle coordinate l'operatore impulso assume la forma  $-i\hbar \frac{d}{dx}$ .

Ci stiamo chiedendo se  $-i\hbar \frac{d}{dx} \mathbf{y}(x) = p \mathbf{y}(x)$  dove  $p$  dovrebbe essere l'autovalore dell'impulso.

Si verifica facilmente che la condizione richiesta non è soddisfatta. Ciò vuol dire che se facciamo

una misura di energia costringiamo il sistema ad andare in uno degli autostati dell'hamiltoniana, registriamo il corrispondente valore di energia  $E$  e, ripetendo la misura, troviamo sempre lo stesso  $E$ . Se in seguito facciamo una misura dell'impulso e la ripetiamo diverse volte, non troviamo sempre lo stesso valore. Quali valori troviamo? Abbiamo dimostrato che  $\psi(x) = c_1(e^{ikx} - e^{-ikx})$ ; prese separatamente  $e^{ikx}$  e  $e^{-ikx}$  sono autofunzioni dell'operatore impulso.

Un autostato dell'hamiltoniana dunque può esprimersi come combinazione lineare di autostati dell'impulso associati agli autovalori  $\hbar k$  e  $-\hbar k$ , cosa che ci aspettavamo dal momento che conoscendo l'energia possiamo conoscere il modulo dell'impulso ma non sappiamo se la particella viaggia da destra verso sinistra o da sinistra verso destra.

Il valor medio dell'impulso è zero, cosicché

$$\text{Equazione 25} \quad \Delta p^2 = (p - \bar{p})^2 = p^2 = \hbar^2 k^2$$

Poiché la particella è costretta a stare in una regione di ampiezza  $L$ , l'indeterminazione nella posizione è al massimo pari a  $L$ :

$$\Delta x = L$$

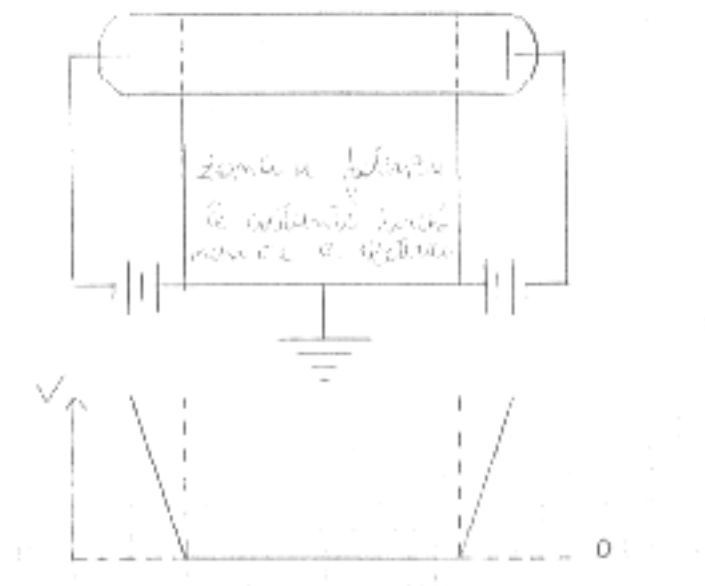
Se lo stato fondamentale avesse energia nulla si avrebbe  $p = 0$ ; per l'Equazione 25 sarebbe anche  $\Delta p = 0$  cosicché  $\Delta p \Delta x = 0$ , relazione che violerebbe il principio di indeterminazione di Heisenberg. Abbiamo trovato così un altro modo per dimostrare che l'energia dello stato fondamentale deve essere diversa da zero.

Una descrizione alternativa della buca di potenziale a pareti infinite è quella che pone il riferimento in modo che  $V(x) = 0$  per  $-\frac{L}{2} \leq x \leq \frac{L}{2}$ . In tal caso si dimostra che le funzioni d'onda sono:

$$\text{Equazione 26} \quad \psi(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{n\mathbf{p}}{L} x & \text{se } n \text{ è dispari} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\mathbf{p}}{L} x & \text{se } n \text{ è pari} \end{cases}$$

Naturalmente le due descrizioni sono equivalenti.

Poiché non c'è alcuna probabilità di trovare una particella oltre le pareti della buca di potenziale a pareti infinite, questa viene anche chiamata buca di potenziale a pareti rigide. Una sua realizzazione sperimentale è costituita da un tubo a vuoto in cui sono poste due placche e, vicino a queste, due griglie. Le due griglie sono collegate tra loro e poste a massa.



Tra le due placche il potenziale ha l'andamento rappresentato dalla figura di sotto. Se diminuiamo la distanza tra placca e griglia la forma del potenziale a bacinella diventa a pozzo.



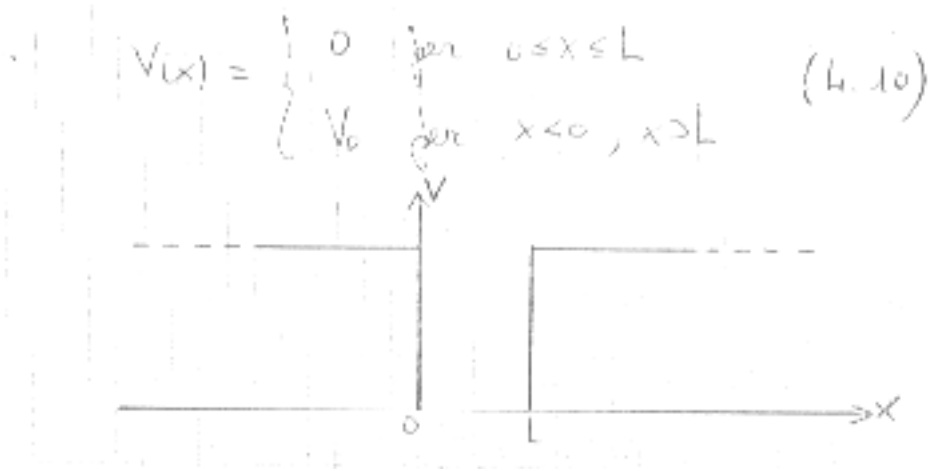
Si ha così una buca di potenziale la cui altezza è solitamente finita ma è lecito supporla infinita. Il moto di elettrone all'interno del tubo risulta essere quantizzato in energia. Importanti applicazioni si hanno nell'ingegneria dei materiali. E' possibile realizzare strati sottili con atomi di diversa natura creando una successione di buche di potenziale all'interno delle quali è nota l'energia di eventuali portatori di carica.

Studiando lo spettro di energia di una buca di potenziale è possibile concludere che non possono esistere elettroni liberi all'interno di un nucleo perché avrebbero energie elevatissime.

### Buca di potenziale a pareti finite.

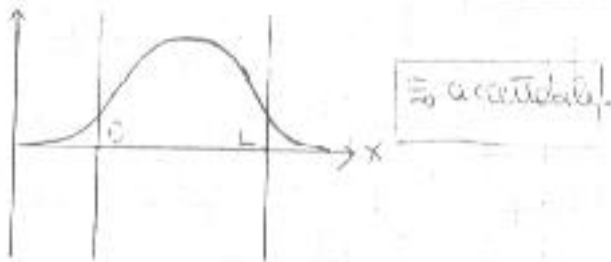
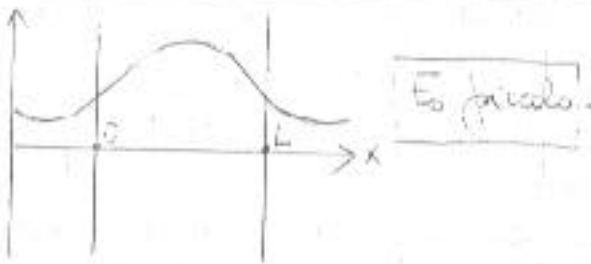
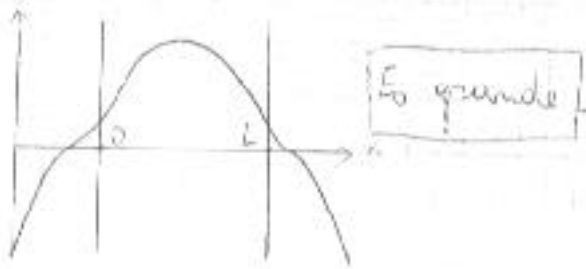
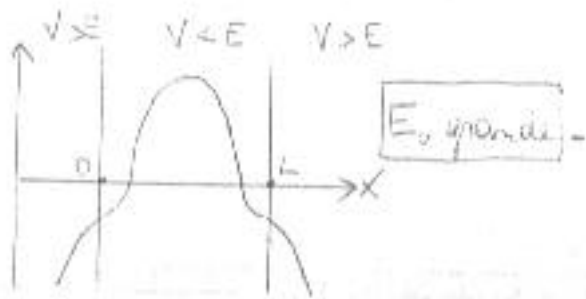
E' il caso di un potenziale definito nel seguente modo:

**Equazione 27** 
$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{per } 0 \leq x \leq L \\ V_0 & \text{per } x < 0, x > L \end{cases}$$



Consideriamo dapprima qualitativamente la forma delle funzioni d'onda che sono soluzioni dell'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo per il potenziale rappresentato dall'Equazione 27. Naturalmente il caso che stiamo trattando deve ridursi alla buca a pareti rigide se facciamo tendere  $V \rightarrow +\infty$ . Ci aspettiamo dunque che le funzioni d'onda, almeno per bassi valori dell'energia, abbiano più o meno la stessa forma nei due casi. Servendoci di questa ed altre considerazioni, dimostriamo che anche nel caso della buca a pareti finite l'energia entro la buca a pareti finite non può assumere valori qualsiasi ma è quantizzata. Fissiamo l'attenzione sullo stato fondamentale. La sua funzione d'onda non può differire notevolmente da quella che si ha nella buca a pareti rigide. Ci aspettiamo una curva di tipo sinusoidale. Sia  $E_0$  il valore che associamo a tale stato fondamentale.

Tenendo presenti le relazioni che intercorrono tra il segno di  $\mathbf{y}(x)$  e il segno di  $\frac{d^2\mathbf{y}}{dx^2}$  a seconda che sia  $V > E$  oppure  $V < E$ , è facile rendersi conto che  $E_0$  non può essere troppo grande né troppo piccolo se si vuole evitare la divergenza, fisicamente inaccettabile, della funzione d'onda per  $|x| \rightarrow \infty$ . I seguenti esempi servono da chiarificazione.



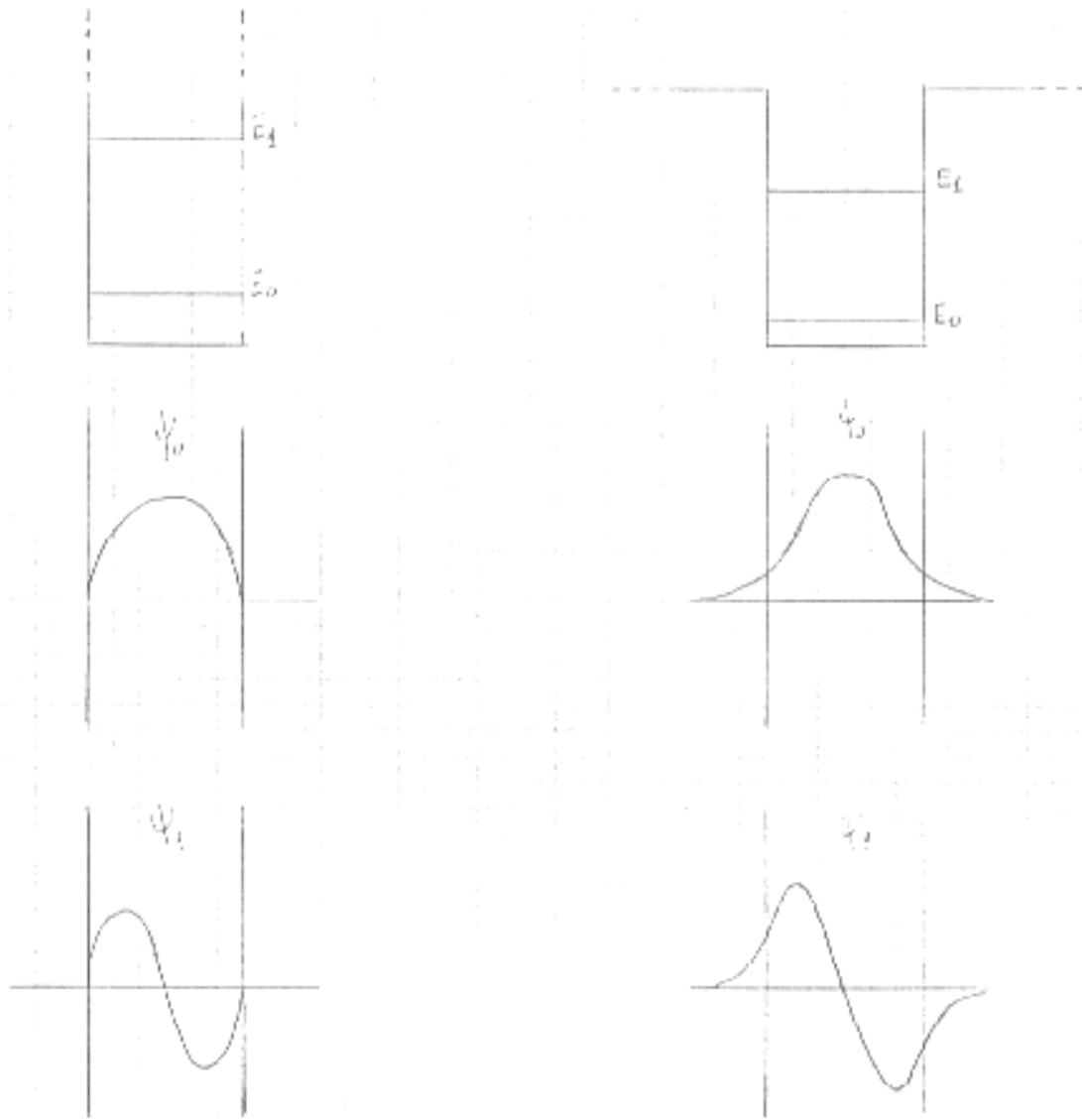
Sappiamo che quanto più grande è  $E$  tanto più piccola è la lunghezza d'onda. Se  $E_0$  è troppo grande la semilunghezza d'onda è minore delle dimensioni della buca e  $\psi$  ha l'andamento descritto in fig.1, fisicamente inaccettabile.

In questo secondo (fig.2) caso il valore scelto di  $E_0$  è abbastanza piccolo perché si abbia  $\frac{\lambda}{2} > L$ , ma non abbastanza perché si possa evitare la divergenza della funzione d'onda per  $|x| \rightarrow \infty$ .

Se il valore di  $E_0$  è troppo piccolo succede quello che è descritto in fig. 3 e cioè che  $\mathbf{y}(x) \rightarrow +\infty$  per  $|x| \rightarrow \infty$ .

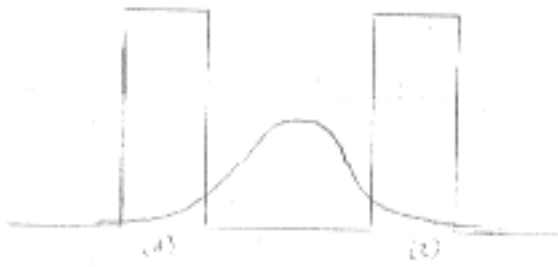
Questa volta il valore di  $E_0$  è quello giusto (fig. 4) per dare a  $\mathbf{y}$  l'unico andamento ammissibile: oscillante all'interno della buca e decrescente all'esterno con l'asse  $\bar{x}$  come asintoto.

Con considerazioni assolutamente analoghe si stabilisce la forma per il primo livello eccitato. Mettiamo a confronto buca a pareti rigide e buca a pareti finite; confrontiamo autofunzioni e corrispondenti autovalori del livello fondamentale e del primo stato eccitato:

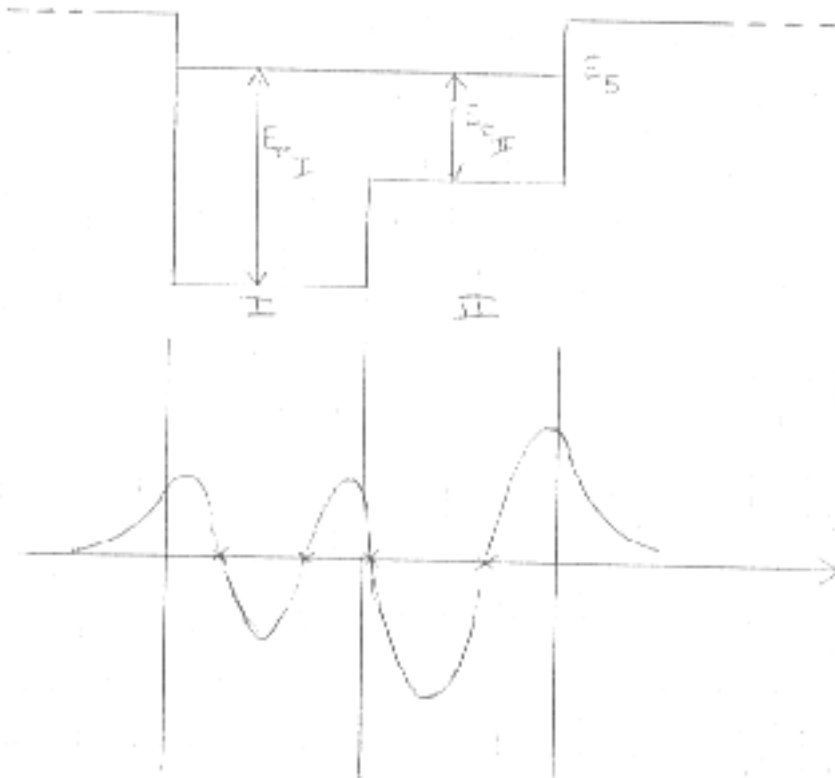


Osserviamo che, nel caso della buca a pareti finite, la diminuzione esponenziale di  $\mathbf{y}_1$  è più lenta di  $\mathbf{y}_0$ . Il coefficiente dell'esponenziale è infatti:

$\mathbf{a} = \sqrt{\frac{2m(V - E)}{\hbar^2}}$ ; maggiore è l'energia  $E$ , minore è  $\mathbf{a}$ . La coda della funzione d'onda nella regione esterna alla buca è dovuta all'effetto tunnel: il superamento di una barriera da parte di una particella che non ha sufficiente energia per superarla



Se la funzione d'onda è non nulla in (1) e (2), allora la particella può attraversare la barriera. Nei casi reali il fondo della buca non è piatto ma ci sono dei dislivelli. Consideriamo, ad esempio, la seguente buca



Si può dimostrare che come nel caso della buca a pareti rigide anche per la buca a pareti finite gli autovalori di energia sono individuati da un intero  $n$ ; il suo significato è quello solito:  $n-1$  è il numero di nodi che ha la funzione d'onda all'interno della buca. Per la funzione d'onda associata all'autovalore  $E_5$  ci aspettiamo, nel caso di fondo discontinuo, l'andamento dell'ultima figura della

pagina precedente. Osserviamo che nella regione I l'energia cinetica delle particelle è maggiore che nella regione II; in corrispondenza, la funzione d'onda ha una lunghezza d'onda ed una ampiezza minore nella regione I che nella regione II.

Il fatto che a energia maggiore corrisponde lunghezza d'onda minore è abbastanza ovvio (basta considerare che  $E_{cl} > E_{cII} \Rightarrow p_I > p_{II} \Rightarrow \lambda_I < \lambda_{II}$ ). Vediamo come l'energia influenzi anche l'ampiezza dell'onda. Per la funzione d'onda di una buca a pareti finite ci aspettiamo una espressione del tipo:

**Equazione 28**  $\mathbf{y}(x) = A \sin(kx + \mathbf{j})$

La sua derivata è:

**Equazione 29**  $\frac{d\mathbf{y}(x)}{dx} = Ak \cos(kx + \mathbf{j}) = m \Rightarrow A \cos(kx + \mathbf{j}) = \frac{m}{k}$

Quadrando e sommando l'Equazione 28 e l'Equazione 29 si ottiene

**Equazione 30**  $A^2 = \mathbf{y}^2 + \frac{m^2}{k^2} \Rightarrow A = \left( \mathbf{y}^2 + \frac{m^2}{k^2} \right)^{1/2}$

La  $\mathbf{y}$  è una funzione continua, così come la sua derivata  $\mathbf{y}' = m$ ; quindi,  $\mathbf{y}_I = \mathbf{y}_{II}$  e  $m_I = m_{II}$  al confine tra le regioni I e II. L'unica cosa che cambia è  $k$  perché si passa in regioni a potenziale diverso. Quando andiamo in II  $k_2 < k_1$  e quindi  $A_2 > A_1$ .

Maggiori dettagli sulla buca a pareti finite si ottengono scrivendo le soluzioni dell'equazione di Schrödinger nelle tre regioni individuate dalla buca ed imponendo la continuità della  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  sulle pareti della buca.

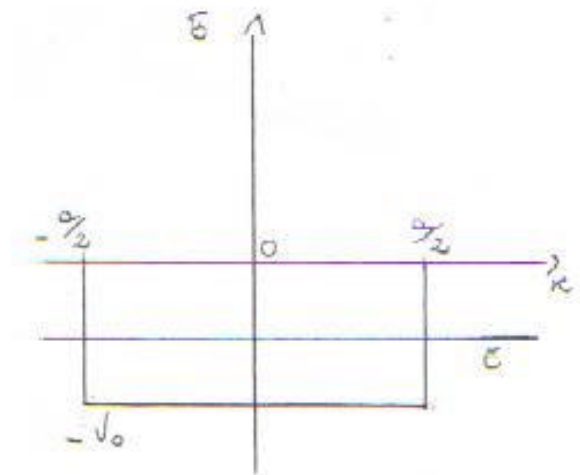
Finora abbiamo trattato il moto di particelle in potenziali capaci di legarle in regioni limitate dello spazio. Gli interessanti fenomeni quantistici mostrati sono la quantizzazione dell'energia e l'effetto tunnel.

Per dimostrare la quantizzazione dell'energia in una buca a pareti finite, consideriamo una siffatta buca:

$V(x)=0$  per  $x \leq -\frac{1}{2}a$

$V(x)=-V_0$  per  $|x| < \frac{1}{2}a$

$V(x)=0$  per  $x \geq \frac{1}{2}a$ .



Gli stati legati si hanno per  $-V_0 < E < 0$ .

Le soluzioni sono del tipo:

$$\begin{cases} \mathbf{y}_I(x) = b_+ e^{ik_1 x} + b_- e^{-ik_1 x} \\ \mathbf{y}_{II}(x) = c_+ e^{ik_2 x} + c_- e^{-ik_2 x} \\ \mathbf{y}_{III}(x) = d_+ e^{ik_1 x} + d_- e^{-ik_1 x} \end{cases}$$

$$\text{dove } k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{i}{\hbar}\sqrt{-2mE}, k_2 = \frac{\sqrt{2m(E - (-V_0))}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m(E + V_0)}}{\hbar}$$

Posto  $k_1 = \frac{i}{\hbar}\sqrt{-2mE} = i\mathbf{h}_1$ , sostituendo:

$$\begin{cases} \mathbf{y}_I(x) = b_+ e^{-\mathbf{h}_1 x} + b_- e^{\mathbf{h}_1 x} \\ \mathbf{y}_{II}(x) = c_+ e^{i k_2 x} + c_- e^{-i k_2 x} \quad (*) \\ \mathbf{y}_{III}(x) = d_+ e^{-\mathbf{h}_1 x} + d_- e^{\mathbf{h}_1 x} \end{cases}$$

E' chiaro che  $d_-$  e  $b_+$  devono essere nulli in quanto per  $x$  che tende a  $-\infty$  la  $\mathbf{y}_I(x)$  divergerebbe, ex così la  $\mathbf{y}_{III}$  per  $x$  che tende a  $+\infty$ .

Per semplificare il problema sfruttiamo il fatto che il sistema è simmetrico. Poiché la scelta del verso delle  $x$  è arbitraria, la densità di probabilità in un punto  $-\bar{x}$  è uguale a quella in  $\bar{x}$ . Allora possiamo dire che l'operatore Hamiltoniano è invariante per inversione delle  $x$ . Sia  $\hat{P}$  l'operatore parità, che cambia  $x$  in  $-x$ .  $\hat{P}$  ed  $\hat{H}$  commutano:  $[\hat{P}, \hat{H}] = \hat{P}\hat{H} - \hat{H}\hat{P} = 0$ . Due operatori che

commutano hanno autostati in comune. Infatti:  $\hat{H}|\mathbf{y}_n\rangle = E_n|\mathbf{y}_n\rangle$ , da cui  $[\hat{P}, \hat{H}]|\mathbf{y}_n\rangle = E_n\hat{P}|\mathbf{y}_n\rangle - \hat{H}\hat{P}|\mathbf{y}_n\rangle = 0 \Rightarrow \hat{P}|\mathbf{y}_n\rangle$  è un autostato di  $\hat{H}$ .

$\hat{P}\mathbf{y}(x) = p\mathbf{y}(-x) = \mathbf{y}(-x)$ . Se applico due volte l'operatore parità ottengo:

$\hat{P}^2\mathbf{y}(x) = \hat{P}\hat{P}\mathbf{y}(x) = \hat{P}\mathbf{y}(-x) = \mathbf{y}(x)$ . D'altra parte  $\hat{P}^2\mathbf{y}(x) = p^2\mathbf{y}(x) \Rightarrow p = \pm 1$  Quindi questi valori di  $p$  sono autovalori dell'operatore, e di conseguenza risulta:

$$\hat{P}\mathbf{y}(x) = p\mathbf{y}(x) = \pm\mathbf{y}(-x)$$

Abbiamo dimostrato che le autofunzioni del sistema (\*) sono pari o dispari, ma dato che  $\hat{H}$  ha alcuni autostati in comune con  $\hat{P}$ , le autofunzioni soluzioni del sistema (\*) non possono che essere funzioni pari o dispari.

Ora, considerando sempre il sistema studiamo separatamente i due casi:

a) funzione pari:  $\mathbf{y}(x) = \mathbf{y}(-x)$

b) funzioni dispari:  $\mathbf{y}(x) = -\mathbf{y}(-x)$

Risulta:

$$\begin{cases} b_- = d_+ \\ c_+ = c_- \end{cases}$$

Risulta:

$$\begin{cases} b_- = -d_+ \\ c_+ = -c_- \end{cases}$$

Cerchiamo a questo punto le espressioni delle due funzioni.

Per le funzioni pari riscriviamo il sistema (\*) tenendo conto delle condizioni di cui sopra:

$$\begin{cases} D e^{\mathbf{h}_1 x} \\ C \cos(k_2 x) \\ D e^{-\mathbf{h}_1 x} \end{cases}$$

Analogamente per le funzioni dispari si ottiene:

$$\begin{cases} -D e^{\mathbf{h}_1 x} \\ C \sin(k_2 x) \\ D e^{-\mathbf{h}_1 x} \end{cases}$$

Ora, imponendo la condizione di continuità per la funzione e la sua derivata prima in  $a/2$ , si ricava:

$\mathbf{y}(x)$  pari:

$$\begin{cases} C \cos\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = D e^{-\hbar_1 \frac{a}{2}} \\ -C k_2 \sin\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = -D \hbar_1 e^{-\hbar_1 \frac{a}{2}} \end{cases}$$

$\mathbf{y}(x)$  dispari:

$$\begin{cases} C \sin\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = D e^{-\hbar_1 \frac{a}{2}} \\ C k_2 \cos\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = -D \hbar_1 e^{-\hbar_1 \frac{a}{2}} \end{cases}$$

da cui

$$k_2 \tan\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = \hbar_1$$

e

$$k_2 \cot\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = \hbar_1$$

Ogni valore di  $k_2$  e di  $\hbar_1$  contiene il valore di E che immaginiamo abbia il sistema.

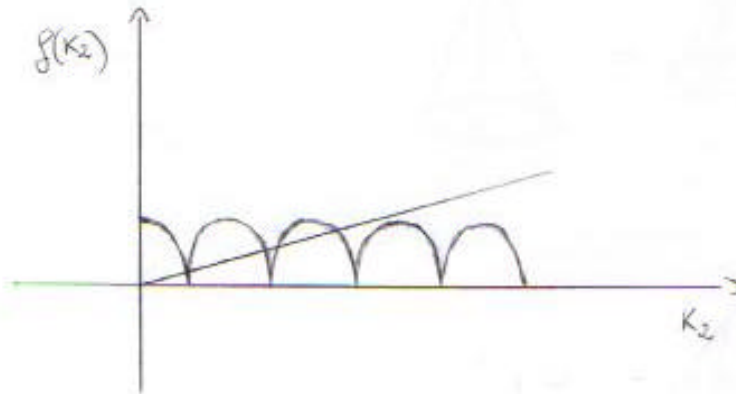
Consideriamo il quadrato di tutti i termini della prima di queste relazione, ricordando che

$$k_2^2 = 2m \frac{E + V_0}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad \hbar_1^2 = \frac{-2mE}{\hbar^2}$$

con dei semplici passaggi matematici si ottiene:

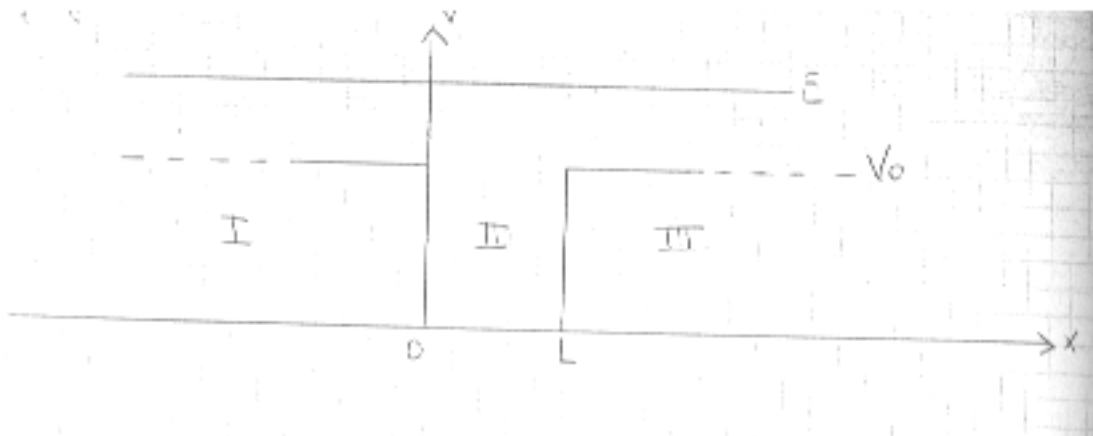
$$2m(E + V_0) \sin^2\left(k_2 \frac{a}{2}\right) = -2mE \cos^2\left(k_2 \frac{a}{2}\right) \Rightarrow \hbar k_2 = \sqrt{2mV_0} \left| \cos k_2 \frac{a}{2} \right|$$

A questo punto se risolviamo graficamente l'equazione:  $\frac{\hbar k_2}{\sqrt{2mV_0}} = \left| \cos K_2 \frac{a}{2} \right|$



Troviamo che i punti di intersezione fra le due curve, per i quali la tangente è positiva, danno dei valori di  $k_2$  quantizzati che corrispondono ai valori di energia possibile. E' chiaro, lo si evince anche dal grafico, che quando la retta non incontra più la funzione armonica, non abbiamo più stati legati, che sono in numero finito.

Altri interessanti fenomeni appaiono se si considera il moto di particelle in stati non legati. Consideriamo ad esempio il caso di una particella che si muove in una regione con una buca di potenziale come quella descritta all'inizio del paragrafo.



L'energia della particella dell'equazione di Schrödinger è data da

**Equazione 31** 
$$\mathbf{y}(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & x < 0 \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x}, & 0 < x < L \\ Fe^{ik_1x} + Ge^{-ik_1x}, & x > L \end{cases}$$

con 
$$k_1 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

$$k_2 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Il primo termine nella funzione d'onda per la regione  $x < 0$  rappresenta l'onda progressiva che si avvicina alla buca e il secondo termine l'onda che viene riflessa dalla buca. Infatti, sebbene sia  $E > V_0$ , nel caso quantistico si può dimostrare che esiste una probabilità finita e diversa da zero che la buca rifletta indietro l'onda.

Analogamente il primo termine nella funzione d'onda per la regione  $x > L$  rappresenta l'onda trasmessa oltre la buca e il secondo termine dovrebbe rappresentare l'onda riflessa indietro. Poiché non c'è nulla che possa causare una riflessione possiamo porre  $G=0$ . Possiamo fissare ad arbitrio il valore di un'altra costante. Poniamo  $A=1$ ; spiegheremo dopo il significato fisico di tale scelta. Determiniamo gli altri coefficienti imponendo la continuità di  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  in  $x = 0$  e  $x = L$ :

**Equazione 32** 
$$\begin{cases} \mathbf{y}(0) = 1 + B = C + D \\ \mathbf{y}(L) = Ce^{ik_2L} + De^{-ik_2L} = Fe^{ik_1L} \\ \mathbf{y}'(0) = ik_1 - ik_1B = ik_2C - ik_2D \\ \mathbf{y}'(L) = ik_2Ce^{ik_2L} - ik_2De^{-ik_2L} = ik_1Fe^{ik_1L} \end{cases}$$

Dalla seconda e dalla quarta equazione si ricava

$$\begin{cases} Ce^{ik_2L} + De^{-ik_2L} = Fe^{ik_1L} \\ Ce^{ik_2L} - De^{-ik_2L} = \frac{k_1}{k_2} Fe^{ik_1L} \end{cases}$$

Dalle altre due condizioni di continuità si ricava:

$$\begin{cases} 1+B=C+D \\ 1-B=\frac{k_1}{k_2}(C-D) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1+B=Fe^{ik_1L}\left(\cos k_2L-i\frac{k_1}{k_2}\sin k_2L\right) \\ 1-B=\frac{k_1}{k_2}Fe^{ik_1L}\left(\frac{k_1}{k_2}\cos k_2L-i\sin k_2L\right)=Fe^{ik_1L}\left(\cos\frac{k_2}{k_1}\sin k_2L\right) \end{cases}$$

$$F=\frac{e^{-ik_1L}}{\cos k_2L-i\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin k_2L}$$

$$B=iFe^{ik_1L}\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin k_2L=\frac{i\frac{k_2^2-k_1^2}{2k_1k_2}\sin k_2L}{\cos k_2L-i\frac{k_1^2+k_2^2}{2k_1k_2}\sin k_2L}$$

Alla circostanza che F e B sono immaginari si attribuisce il significato fisico di uno sfasamento tra onda incidente e riflessa (o trasmessa).

Si definisce flusso di probabilità incidente la probabilità al secondo di trovare una particella che attraversa un punto in  $x < 0$  nella direzione delle x crescenti.

Si definisce flusso di probabilità riflesso la probabilità al secondo di trovare una particella che attraversa un punto in  $x < 0$  nella direzione delle x decrescenti.

Si definisce flusso di probabilità incidente la probabilità al secondo di trovare una particella che attraversa un punto in  $x > L$  nella direzione delle x crescenti.

Poiché la probabilità al secondo che una particella attraversi un dato punto è proporzionale alla distanza che essa percorre al secondo, il flusso di probabilità è proporzionale non solo all'intensità dell'onda ma anche alla velocità della particella.

Definiamo coefficiente di riflessione R il rapporto tra il flusso di probabilità riflesso e il flusso di probabilità incidente. In base a quanto detto si ha:

$$R=\frac{v_1B^*B}{v_1A^*A}=|B|^2$$

Fissare  $A=1$  significa fissare la corrente di particelle incidente. Definiamo coefficiente di trasmissione T il rapporto tra il flusso di probabilità trasmesso e il flusso di probabilità incidente.

Si ha

$$T=\frac{v_1F^*F}{v_1A^*A}=|F|^2$$

In particolare nel caso particolare si ha

$$T=\frac{1}{\cos^2 k_2L+\frac{(k_1^2+k_2^2)}{4k_1^2k_2^2}\sin^2 k_2L}=\frac{1}{1+\left[\frac{(k_1^2+k_2^2)}{4k_1^2k_2^2}-1\right]\sin^2 k_2L}=\frac{1}{1+\left[\frac{(k_1^2-k_2^2)}{2k_1^2k_2^2}\right]^2\sin^2 k_2L}=\frac{1}{1+h}$$

avendo posto

$$h=\left[\frac{(k_1^2-k_2^2)}{2k_1^2k_2^2}\right]^2\sin^2 k_2L.$$

Analogamente si trova che  $R=\frac{h}{1+h}$  come ci aspettavamo, dovendo essere  $R+T=1$  in condizioni stazionarie.

Poiché  $k_2^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$ ,  $k_1^2 = \frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}$  si ha:

**Equazione 33** 
$$\mathbf{h} = \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 k_2 L$$

cioè  $\mathbf{h}$  ha un comportamento oscillante con  $\sin^2 k_2 L$ .

In particolare, quando  $kL = n\pi \Rightarrow \mathbf{h} = 0 \Rightarrow R = 0$  e  $T = 1$ . E' come se ci fosse un fenomeno di interferenza regolato dalla lunghezza della buca. Infatti se esprimiamo il numero d'onda  $k$  in funzione della lunghezza d'onda  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$  la massima trasmissione si ha quando

$$\frac{2\pi}{\lambda} L = n\pi \Rightarrow \frac{L}{\lambda} = \frac{n}{2}.$$

Osserviamo che l'ampiezza di oscillazione di  $\mathbf{h}$  diventa sempre più piccola quando  $E$  diventa sempre più grande. Ci sono cioè delle oscillazioni smorzate dal coefficiente di trasmissione. Per  $E \rightarrow V_0$ , invece,  $T \rightarrow 0$  e  $R \rightarrow 1$ .

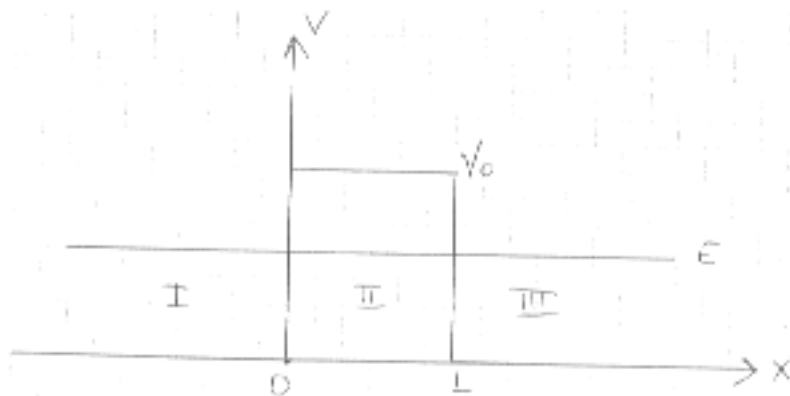
## Barriera di potenziale

Consideriamo una barriera di potenziale cioè un potenziale definito come segue:

**Equazione 34** 
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{per } 0 < x < L \\ 0 & \text{per } x < 0, x > L \end{cases}$$

Distinguiamo i due casi  $E < V_0$  ed  $E > V_0$

a)  $E < V_0$



Scriviamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger nelle tre regioni:

**Equazione 35** 
$$\mathbf{y}(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \\ Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} & 0 < x < L \\ Fe^{ik_1x} & x > L \end{cases}$$

con

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$$

Le ragioni per cui  $A=1$  e  $C=0$  sono state spiegate nella buca. Imponiamo la continuità di  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  in 0 e in  $L$ :

**Equazione 36** 
$$\begin{cases} \mathbf{y}(0) = 1 + B = C + D \\ \mathbf{y}(L) = Ce^{k_2L} + De^{-k_2L} = Fe^{ik_1L} \\ \mathbf{y}'(0) = ik_1 - ik_1B = k_2C - k_2D \\ \mathbf{y}'(L) = k_2Ce^{k_2L} - k_2De^{-k_2L} = ik_1Fe^{ik_1L} \end{cases}$$

Dalla 2<sup>a</sup> e dalla 4<sup>a</sup> equazione si ricava

**Equazione 37** 
$$\begin{cases} Ce^{k_2L} + De^{-k_2L} = Fe^{ik_1L} \\ Ce^{k_2L} - De^{-k_2L} = i\frac{k_1}{k_2}Fe^{ik_1L} \end{cases}$$

Sommando membro a membro le ultime due uguaglianze si ricava

**Equazione 38** 
$$Ce^{k_2L} = \frac{F}{2} \left( 1 + i\frac{k_1}{k_2} \right) e^{ik_1L}$$

Sottraendo

**Equazione 39** 
$$De^{-k_2L} = \frac{F}{2} \left( 1 - i\frac{k_1}{k_2} \right) e^{ik_1L}$$

da cui

**Equazione 40** 
$$\begin{cases} C = \frac{F}{2} \left( 1 + i\frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_2L} e^{ik_1L} \\ D = \frac{F}{2} \left( 1 - i\frac{k_1}{k_2} \right) e^{-k_2L} e^{ik_1L} \end{cases}$$

Dalle altre due condizioni di continuità si ricava

**Equazione 41** 
$$\begin{cases} 1 + B = C + D \\ 1 - B = -i\frac{k_2}{k_1}(C - D) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} Fe^{ik_1L} \left( \cosh k_2L - i\frac{k_1}{k_2} \sinh k_2L \right) \\ Fe^{ik_1L} \left( \cosh k_2L + i\frac{k_2}{k_1} \sinh k_2L \right) \end{cases}$$

da cui si ricava

**Equazione 42**

$$\left\{ \begin{array}{l} F = \frac{e^{-ik_1L}}{\cosh k_2L - i \frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2} \sinh k_2L} \\ B = - \frac{i \frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2} \sinh k_2L}{\cosh k_2L - i \frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2} \sinh k_2L} \end{array} \right.$$

Il coefficiente di trasmissione è dato da

**Equazione 43**

$$T = |F|^2 = \frac{1}{\cosh^2 k_2L + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2 \sinh^2 k_2L} = \frac{1}{1 + \left[1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2\right] \sinh^2 k_2L} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k_1^2 - k_2^2}{2k_1k_2}\right)^2 \sinh^2 k_2L} = \frac{1}{1 + \mathbf{h}}$$

Osserviamo che in questo caso,  $T$  non può raggiungere mai il valore 1 giacché il seno iperbolico e dunque  $\mathbf{h}$  non si annulla mai per  $E < V_0$ . E' conveniente esprimere  $\mathbf{h}$  in funzione di  $V_0$  e  $E$ :

**Equazione 44**

$$\mathbf{h} = \frac{\left(\frac{2mE}{\hbar^2} + \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\right)^2}{4 \cdot \frac{2mE}{\hbar^2} \cdot \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} \sinh^2 \left( \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} L \right) = \frac{4m^2V_0^2}{16m^2E(V_0 - E)} \sinh^2 \left( \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} L \right) = \frac{V_0^2}{4E(V_0 - E)} \sinh^2 \left( \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}} L \right)$$

Quando  $E \rightarrow 0^+$  allora  $\mathbf{h} \rightarrow \infty$  e  $T \rightarrow 0$ .

Quando  $E \rightarrow V_0$  allora  $\mathbf{h}$  e  $T$  tendono ad un valore finito.

E' interessante il ruolo svolto in questo caso da  $L$ . Se  $L$  è molto grande il seno iperbolico diverge esponenzialmente e il coefficiente di trasmissione va a zero. In questo caso cioè,  $T$  non dipende solo da  $E$  e  $V_0$  ma anche dalla larghezza della barriera. Se  $L$  è molto grande allora  $\mathbf{h}$  è molto grande e risulta

**Equazione 45**

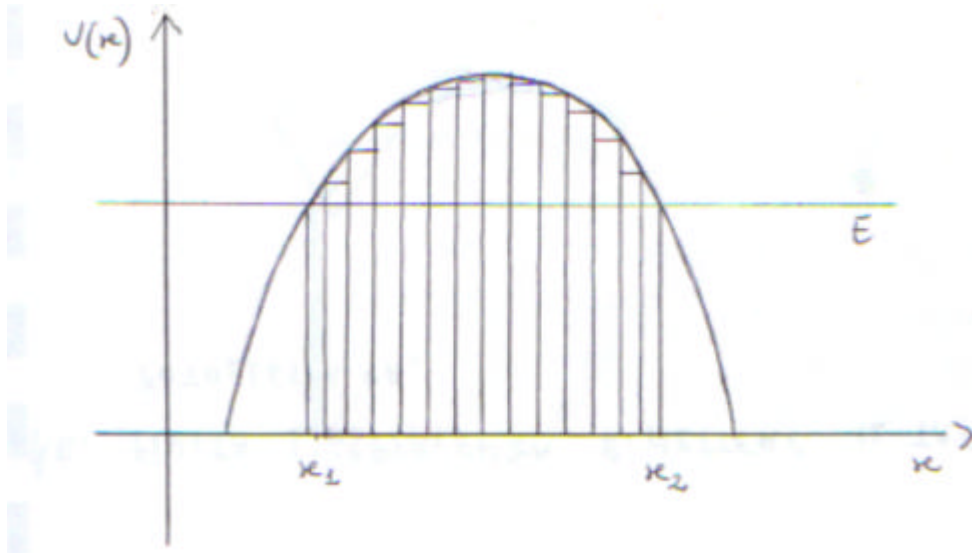
$$T \approx \mathbf{h}^{-1} \Rightarrow T \approx \frac{4E(V_0 - E)}{V_0^2} \cdot 4 \cdot e^{-2k_2L} = \frac{16E(V_0 - E)}{V_0^2} e^{-2k_2L}$$

in quanto  $\sinh k_2L \rightarrow \frac{e^{k_2L}}{2}$  per  $k_2L$  molto grande.

Viceversa, se  $L$  è molto piccolo il seno iperbolico tende a zero e  $T$  tende a 1. Una barriera di potenziale può essere molto alta ma se è anche sufficientemente stretta può essere attraversata da una particella che abbia  $E < V_0$  con probabilità finita e diversa da zero.

Ovviamente in natura non troviamo una barriera effettiva a gradino ma una curva.

Dividiamo la curva in rettangoli infinitesimi pensando appunto la barriera come una successione di barriere rettangolari infinitesime.



Essendo  $L$  l'ampiezza di una barriera a gradino, il coefficiente di trasmissione (cioè la probabilità che la particella in esame si trovi oltre la barriera) è proporzionale a  $e^{-2kL}$ , come abbiamo già visto. Per una singola barriera infinitesima allora si ha:

$$e^{-2kL} \rightarrow e^{-2k(x)dx} \text{ dato che } k \text{ varia con } x, k(x) = \frac{\sqrt{2m(E - V(x))}}{\hbar}, \text{ e } L \rightarrow dx.$$

La probabilità di trovare la mia particella tra  $x$  e  $x+\Delta x$  è data da

$$P(x + \Delta x) = P(x) \cdot e^{-2k(x)dx}, \text{ dove } P(x) \text{ è la probabilità di trovare la particella in } x.$$

Se  $\Delta x$  è piccolo, sviluppando in serie l'esponenziale (arrestandoci al primo termine), abbiamo:

$$P(x + \Delta x) = P(x) \cdot e^{-2k(x)dx} = P(x) \cdot [1 - 2k(x)\Delta x] = P(x) + \frac{dP(x)}{dx} \Delta x, \text{ da cui}$$

$$\frac{dP(x)}{dx} \Delta x = 2P(x) \cdot k(x)\Delta x, \text{ ovvero } \frac{dP(x)}{P(x)} \Delta x = 2k(x)dx \text{ che, integrata, mi dà}$$

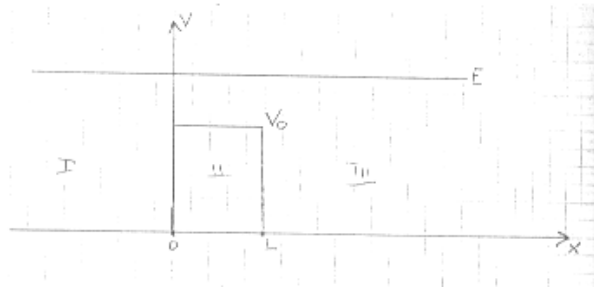
$$[\ln P(x)]_{x_1}^{x_2} = -2 \int_{x_1}^{x_2} k(x)dx \Rightarrow \frac{P(x_2)}{P(x_1)} = e^{-2 \int_{x_1}^{x_2} k(x)dx}$$

$$-2 \int_a^b k(x)dx = -2 \int_a^b \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E - V(x)|} dx$$

$$\text{La quantità } G = \int_a^b \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m|E - V(x)|} dx \text{ è detta fattore di Gamow.}$$

b)  $E > V_0$

Consideriamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger per una particella che incide su una barriera di altezza  $V_0$ , e la particella abbia energia  $E > V_0$



**Equazione 46** 
$$y(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & 0 < x < L \\ Fe^{ik_1x} & \end{cases}$$

con

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ e } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}$$

Ripetendo il procedimento già illustrato, si trova

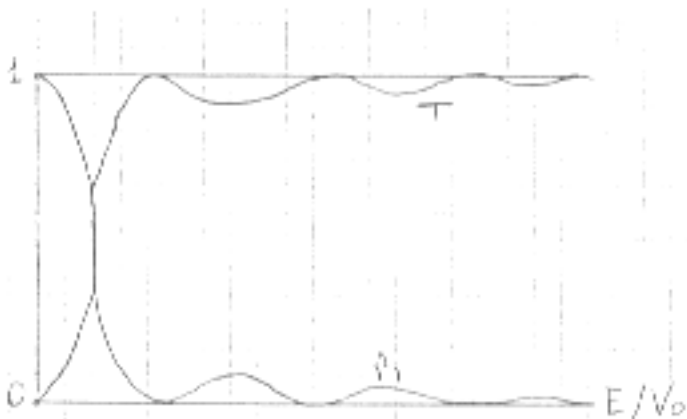
**Equazione 47** 
$$T = \frac{1}{1+h}; \quad R = \frac{h}{1+h}$$

dove

**Equazione 48** 
$$h = \frac{V_0^2}{4E(E - V_0)} \sin^2 k_2 L$$

Ritroviamo quei fenomeni di interferenza già osservati nel caso della buca.

Mostriamo l'andamento dei coefficienti di riflessione  $R$  e di trasmissione  $T$  per una particella incidente su una barriera di potenziale di altezza  $V_0$  e larghezza  $L$  in funzione del rapporto  $\frac{E}{V_0}$ :



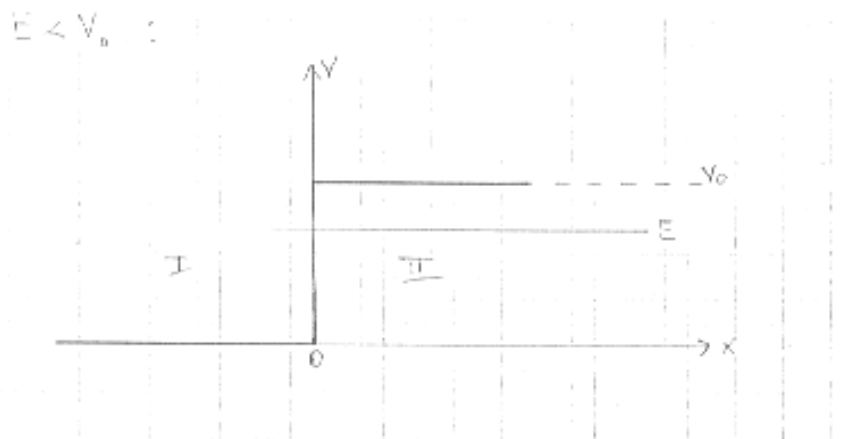
## Gradino di potenziale

Sia dato un gradino di potenziale, cioè un potenziale definito così:

**Equazione 49** 
$$V(x) = \begin{cases} V_0 & \text{per } x > 0 \\ 0 & \text{per } x < 0 \end{cases}$$

Al solito distinguiamo i casi  $E < V_0$  ed  $E > V_0$ .

a)  $E < V_0$



Scriviamo la soluzione dell'equazione di Schrödinger nelle due regioni individuate dal gradino

**Equazione 50** 
$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \\ De^{-k_2x} & x > 0 \end{cases}$$

con

$$k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \text{ e } k_2 = \sqrt{\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2}}.$$

Abbiamo eliminato l'esponenziale  $Ce^{k_2x}$  nella regione  $x > 0$  giacché è fisicamente inaccettabile. Imponendo la continuità della funzione d'onda e della sua derivata in  $x = 0$ , si ha

**Equazione 51** 
$$\begin{cases} \psi(0) = 1 + B = D \\ \psi'(0) = ik_1 - ik_1B = -k_2D \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 + B = D \\ 1 - B = i \frac{k_2}{k_1} D \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} D = \frac{2k_1}{k_1 + ik_2} \\ B = \frac{k_1 - ik_2}{k_1 + ik_2} \end{cases}$$

Calcoliamo il coefficiente di riflessione

**Equazione 52** 
$$R = \frac{v_1 BB^*}{v_1 AA^*} = |B|^2 = \frac{(k_1 - ik_2)(k_1 + ik_2)}{(k_1 + ik_2)(k_1 - ik_2)} = 1$$

Il fatto che questo rapporto è uguale ad uno significa che una particella incidente su un gradino di potenziale con energia totale minore dell'altezza del gradino ha probabilità uno di essere riflessa, cioè è sempre riflessa. Il fatto però che  $B$  sia complesso significa che onda riflessa ed incidente non sono in fase. E' come se la particella riuscisse a superare la barriera e poi, dopo un certo tempo, tornasse indietro.

In effetti osservando l'espressione della funzione d'onda nella regione  $x > 0$ , c'è una apprezzabile probabilità di trovare la particella con una coordinata  $x > 0$  in una regione che inizia a  $x = 0$  e si estende per una distanza di penetrazione  $\Delta x$  che è

uguale a  $\frac{1}{k_2}$ . La ragione è che  $e^{-2k_2x}$  ( $= \psi\psi^* = \text{probabilità}$ ) va molto rapidamente a zero quando  $x$

è molto più grande di  $\frac{1}{k_2}$ . Poiché  $k_2 = \sqrt{\frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}}$  abbiamo

**Equazione 53** 
$$\Delta x = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V_0 - E)}}.$$

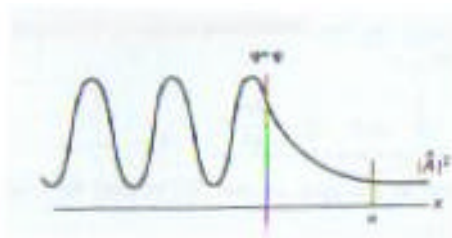
Mostriamo che la penetrazione nella regione classicamente proibita non è in contrasto con il principio di conservazione dell'energia. Infatti se siamo in grado di dire che la particella si trova in una regione di ampiezza  $\Delta x$ , sappiamo che il suo impulso è determinato con una incertezza  $\Delta p$  che deve verificare la relazione di Heisenberg

**Equazione 54** 
$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta x} = \sqrt{2m(V_0 - E)}$$

Di conseguenza, l'energia della particella è incerta di una quantità

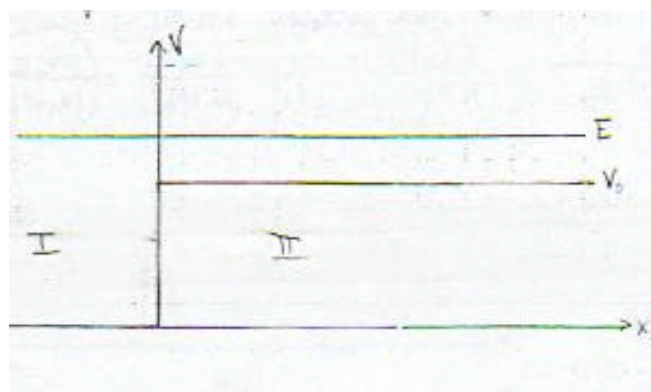
$$\Delta E \approx \frac{(\Delta p)^2}{2m} \approx V_0 - E \Rightarrow E \pm \Delta E \approx E \pm (V_0 - E) = \begin{cases} V_0 \\ 2E - V_0 \end{cases}$$

e non è più possibile dire che l'energia totale  $E$  della particella è minore in modo preciso dell'energia potenziale  $V_0$ . Per questo abbiamo l'effetto tunnel: alcune particelle riescono a saltare il gradino di potenziale. A tal proposito si veda la figura seguente.



Ovviamente, quando  $V_0$  diventa molto grande, la particella non ha più probabilità di superare la barriera ed infatti per  $V_0 \rightarrow \infty$ ,  $B \rightarrow -1$ .

b)  $E > V_0$



Scriviamo le soluzioni dell'equazione di Schrodinger:

$$\mathbf{y}(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Be^{-ik_1x}, & x < 0, \quad k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \\ Ce^{ik_2x}, & x > 0, \quad k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar} \end{cases}$$

Questa volta abbiamo eliminato  $De^{-ik_1x}$  nella regione  $x > 0$  perché non c'è niente che possa provocare una riflessione dell'onda una volta che abbia superato il gradino. Imponendo la continuità di  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  in  $x=0$  si ha:

$$\begin{cases} \mathbf{y}(0) = 1 + B = C \\ \mathbf{y}'(0) = ik_1 - ik_1B = ik_2C \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} 1 + B = C \\ 1 - B = \frac{k_2}{k_1}C \end{cases} \Rightarrow$$

$$\Rightarrow \begin{cases} C = \frac{2}{1 + \frac{k_2}{k_1}} = \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \\ B = \frac{\left(1 - \frac{k_2}{k_1}\right)C}{2} = \frac{k_1 - k_2}{2k_1} \cdot \frac{2k_1}{k_1 + k_2} = \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \end{cases}$$

Determiniamo i coefficienti R e T:

$$R = \frac{v_1 B B^*}{v_1 A A^*} = |B|^2 = \left( \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

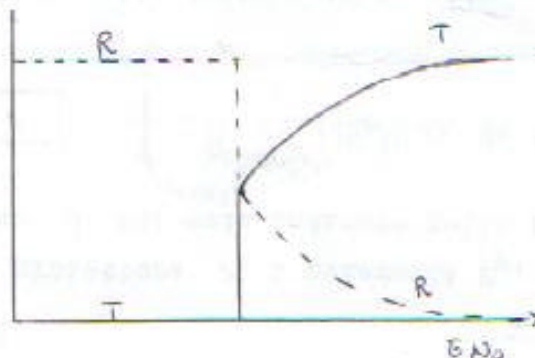
$$T = \frac{v_2 C C^*}{v_1 A A^*} = \frac{p_2 C C^*}{m \frac{p_1}{m}} = \frac{\hbar k_2 |C|^2}{\hbar k_1} = \frac{k_2}{k_1} \cdot \frac{4k_1^2}{(k_1 + k_2)^2} = \frac{4k_1 k_2}{(k_1 + k_2)^2}$$

Se  $E \gg V_0$  ci aspettiamo che la particella non veda più la barriera di potenziale; e infatti, se  $E \gg V_0$  allora  $k_1 \approx k_2 \Rightarrow R \approx 0$  e  $T \approx 1$

Quando  $E \rightarrow V_0$  allora  $k_2 \rightarrow 0 \Rightarrow T \rightarrow 0$  e  $R \rightarrow 1$

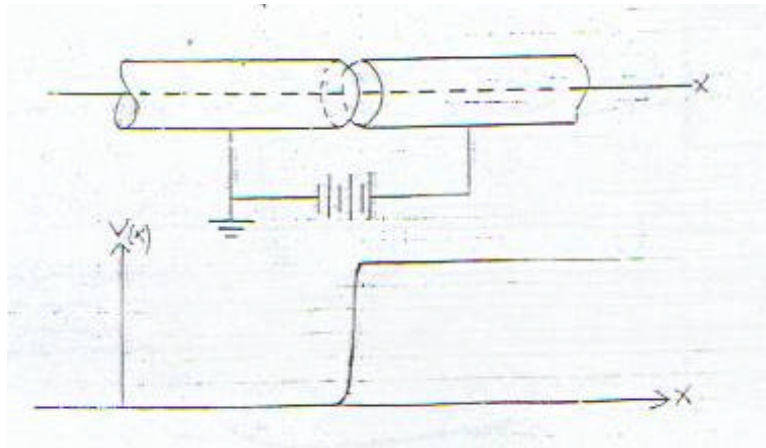
I coefficienti B e C sono reali. Questo comporta che lo sfasamento tra onda incidente e onda riflessa sia nullo.

Rappresentiamo i coefficienti di riflessione e trasmissione per una particella incidente su un gradino di potenziale di altezza  $V_0$ , in funzione del rapporto  $E/V_0$ :



Possiamo confrontare questa figura con quella relativa alla barriera. Per entrambi i potenziali  $R \rightarrow 1$  quando  $E/V_0 \rightarrow 0$ , e  $R \rightarrow 0$  quando  $E/V_0 \rightarrow \infty$ . Ma, per la barriera di potenziale il coefficiente di riflessione si approssima ad 1 gradualmente, a piccole energie, poiché la larghezza finita della regione classicamente proibita permette la trasmissione. Inoltre, il coefficiente di riflessione della barriera oscilla a grandi energie a causa delle interferenze nelle riflessioni dalle due discontinuità.

Come ultima cosa, illustriamo un sistema fisico con una funzione di energia potenziale che può essere approssimata da un gradino di potenziale.



Una particella carica si muove lungo l'asse di due elettrodi cilindrici caricati a potenziale diverso. La sua energia potenziale è costante lungo ciascun elettrodo, ma cambia molto rapidamente quando si passa dall'uno all'altro.