

Ciclo formativo per Insegnanti di Scuola Superiore - anno scolastico 2017-2018

Seconda lezione - Milano, 24 ottobre 2017

STRUTTURA FORMALE DELLA MECCANICA QUANTISTICA

Esercitazione

Luciano Colombo

Dipartimento di Fisica - Università degli Studi di Cagliari
Cittadella Universitaria, 09042 Monserrato (Ca)

E-mail: luciano.colombo@unica.it

Website: people.unica.it/lucianocolombo

© 2017 Luciano Colombo – AVVERTENZA

La riproduzione, anche parziale, di questa dispensa in qualsivoglia formato cartaceo, elettronico o multimediale è **severamente vietata**.

Eventuali richieste di autorizzazione all'uso di questa Dispensa vanno indirizzate tramite messaggi di posta elettronica direttamente all'Autore.

Costanti fisiche

Simbolo	Grandezza	Valore
R	costante universale dei gas	8.314 J K^{-1}
\mathcal{N}_A	numero di Avogadro	6.022×10^{23}
k_B	costante di Boltzmann	$1.3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
$k_B T$	a temperatura $T=293\text{K}$	$4.05 \times 10^{-21} \text{ J}$
m_e	massa elettrone	$9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$
m_p	massa protone	$1.67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$
e	carica elettrone	$1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$
e/m	rapporto carica/massa elettrone	$1.76 \times 10^{11} \text{ C Kg}^{-1}$
h	costante di Planck	$6.62 \times 10^{-34} \text{ J s}$
\hbar	$h/2\pi$	$1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}$
c	velocità della luce nel vuoto	$3.00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
σ	costante di Stefan	$5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
\mathcal{R}	costante di Rydberg	109677 cm^{-1}
μ_B	magnetone di Bohr	$9.27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$

Esercitazione no.1 - Elettrone contro un gradino di potenziale

Si consideri un elettrone di energia E in movimento in una regione descritta da un potenziale a gradino come in figura. Studiare la funzione d'onda elettronica per questo problema.

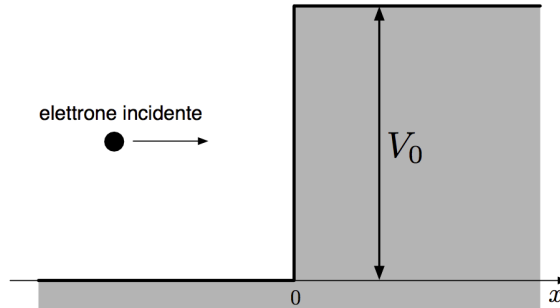


Figura 1: L'elettrone di energia E arriva da sinistra verso destra contro il gradino di potenziale posto in $x = 0$ e di altezza pari a V_0 .

Questo problema unidimensionale va affrontato scrivendo innanzitutto l'equazione di Schrödinger per il potenziale $V(x)$ assegnato:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (1)$$

dove m_e è la massa dell'elettrone e il potenziale $V(x)$ è quello rappresentato in figura, ovvero:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ V_0 & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \quad (2)$$

Convien distinguere tra i due diversi casi $E < V_0$ e $E > V_0$ e trattarli separatamente.

Caso $E < V_0$

Secondo la fisica classica una particella incidente con energia inferiore al gradino non ha alcuna possibilità di superare la barriera. Secondo la meccanica quantistica, invece, la soluzione del problema è più complessa.

Iniziamo a considerare la regione a sinistra del gradino di potenziale, cioè la regione $x < 0$. Qui il potenziale che agisce sull'elettrone è nullo e, dunque, esso si muove come *particella libera*. Noi abbiamo già risolto il problema quantistico per una particella libera e sappiamo che la sua funzione d'onda è tipo onda piana. Quando un'onda incide sulla barriera provenendo da sinistra, subirà un ovvio fenomeno di riflessione. Pertanto nella regione $x < 0$ la funzione d'onda nella sua forma più generale è data dalla sovrapposizione di un'onda piana incidente $\exp(ikx)$ (che propaga da sinistra verso destra) e di un'onda piana riflessa $\exp(-ikx)$ (che propaga da destra verso sinistra). Naturalmente k rappresenta il vettore d'onda dell'onda di de Broglie associata all'elettrone. Possiamo trascrivere questo risultato in forma matematica

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (3)$$

dove abbiamo indicato con $\psi_1(x)$ la funzione d'onda nella regione $x < 0$ e con A, B i coefficienti della combinazione lineare tra le due soluzioni particolari (onda incidente e onda riflessa, rispettivamente) dell'equazione di Schrödinger.

Nella regione a destra del gradino di potenziale, cioè nella regione $x \geq 0$, la situazione è più complessa visto che l'elettrone sperimenta un potenziale costante pari a $V(x) = V_0$. Se indichiamo con $\psi_2(x)$ la funzione d'onda per $x \geq 0$, la corrispondente equazione di Schrödinger si scrive come

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V_0 \right] \psi_2(x) = E\psi_2(x) \quad (4)$$

ovvero

$$\left[\frac{d^2}{dx^2} + \frac{2m_e(E - V_0)}{\hbar^2} \right] \psi_2(x) = 0 \quad (5)$$

Notiamo che il coefficiente del secondo termine è negativo in quanto con $E < V_0$; pertanto ponendo

$$\frac{2m_e(E - V_0)}{\hbar^2} = -\alpha^2 \quad (6)$$

con α numero reale, possiamo scrivere

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} - \alpha^2\psi_2(x) = 0 \quad (7)$$

È facile verificare per sostituzione diretta che la soluzione della precedente equazione deve essere della forma

$$\psi_2(x) \sim e^{\pm\alpha x} \quad (8)$$

Considerata la sua definizione, osserviamo che $\alpha > 0$. Ciò implica che la soluzione $\psi_2(x) \sim \exp(+\alpha x)$ rappresenta una funzione monotona crescente per $x > 0$. Questa soluzione, pertanto, risulta *fisicamente inaccettabile* perché assurdamente comporterebbe una probabilità di presenza dell'elettrone crescente al crescere della distanza dal gradino di potenziale. Concludiamo, quindi, che l'unica soluzione accettabile è

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x} \quad \text{con} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m_e(V_0 - E)}{\hbar^2}} \quad (9)$$

dove C è la solita costante da ricavare imponendo le condizioni di normalizzazione alla funzione d'onda.

Il risultato che abbiamo appena ricavato è intrigante: secondo la meccanica quantistica esiste *una probabilità non nulla di trovare l'elettrone a destra del gradino di potenziale*. Tale probabilità decresce esponenzialmente all'aumentare della distanza (verso destra) dal gradino. Questa è una prima importante differenza tra la soluzione classica e quella quantistica.

Caso $E > V_0$

Secondo la fisica classica una particella incidente con energia superiore al gradino riesce a superare la barriera, propagando verso destra con energia cinetica inferiore rispetto a quella posseduta nella regione $x < 0$.

Secondo la meccanica quantistica, invece, dobbiamo risolvere separatamente il problema di Schrödinger nelle regioni a sinistra e a destra del gradino di potenziale.

Per $x < 0$ la situazione è formalmente identica al caso discusso in precedenza. La soluzione per la funzione d'onda $\psi_1(x)$ è dunque

$$\psi_1(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (10)$$

Per $x \geq 0$, invece, la corrispondente equazione di Schrödinger si scrive come

$$\frac{d^2\psi_2(x)}{dx^2} + \beta^2\psi_2(x) = 0 \quad (11)$$

dove abbiamo posto

$$\beta^2 = \frac{2m_e(E - V_0)}{\hbar^2} \quad (12)$$

Il coefficiente β è reale positivo e, quindi, la soluzione può essere immediatamente scritta nella forma

$$\psi_2(x) = Ce^{i\beta x} \quad (13)$$

Raccordo delle funzioni ψ_1 e ψ_2 a $x = 0$

Abbiamo fin ad adesso risolto il problema separatamente per le due regioni $x < 0$ e $x \geq 0$. Dobbiamo, adesso, trovare il modo di raccordare $\psi_1(x)$ a $\psi_2(x)$ nel punto $x = 0$.

Il criterio generale da seguire è quello di *imporre la continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima nel punto di raccordo*. La continuità della funzione d'onda è ovviamente legata al suo significato

probabilistico: poiché il suo modulo quadro nel punto $x = 0$ rappresenta l'ampiezza della probabilità di trovare l'elettrone in quel punto, è ovvio che essa debba variare con continuità. La giustificazione per la continuità della derivata prima è legata al fatto che abbiamo assunto un'altezza di gradino finita. Dunque, la derivata seconda esiste finita, ovvero: la derivata prima è derivabile e, dunque, continua.

Nel **caso** $E < V_0$ le condizioni

$$\psi_1(x=0) = \psi_2(x=0) \quad \text{e} \quad \left[\frac{d\psi_1(x)}{dx} \right]_{x=0} = \left[\frac{d\psi_2(x)}{dx} \right]_{x=0} \quad (14)$$

conducono immediatamente alle seguenti equazioni

$$A + B = C \quad \text{e} \quad ikA - ikB = -\alpha C \quad (15)$$

ovvero

$$B = \frac{(ik + \alpha)A}{ik - \alpha} \quad \text{e} \quad C = \frac{2ikA}{ik - \alpha} \quad (16)$$

da cui, supponendo noto il coefficiente A^1 , si ottiene

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A \left(e^{ikx} + \frac{ik+\alpha}{ik-\alpha} e^{-ikx} \right) & \text{per } x < 0 \\ \psi_2(x) = \frac{2ik}{ik-\alpha} A e^{-\alpha x} & \text{per } x \geq 0 \end{cases} \quad (17)$$

La rappresentazione grafica di Fig.2 fornisce una visione intuitiva dell'andamento della funzione d'onda di un elettrone che "sente" un gradino di potenziale.

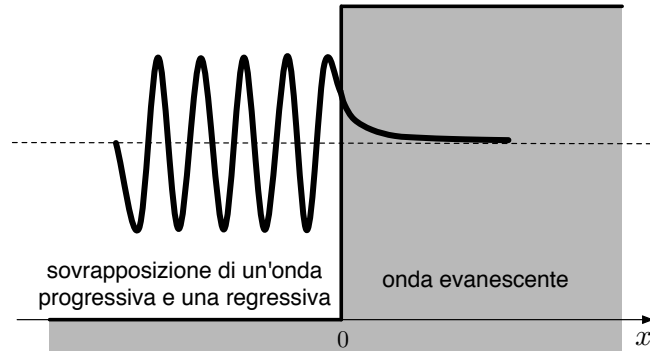


Figura 2: Funzione d'onda per un elettrone che arriva con energia E da sinistra verso destra contro il gradino di potenziale posto in $x = 0$ ed altezza V_0 . Soluzione valida per $E < V_0$.

La parte esponenziale decrescente per $x > 0$ tenderà a zero tanto più rapidamente quanto maggiore risulterà il parametro α . In altre parole, maggiore è l'altezza del gradino, minore è la penetrazione della funzione d'onda. Nel caso limite di *gradino infinitamente alto* (cioè per $V_0 \rightarrow +\infty$), la funzione d'onda deve essere necessariamente nulla², ovvero: $\psi_2(x) = 0 \quad \forall x \geq 0$.

Nel **caso** $E > V_0$ le condizioni (14) conducono immediatamente, supponendo noto il coefficiente A (vedi nota [1] a piè pagina), alle seguenti equazioni

$$B = \frac{(k - \beta)A}{k + \beta} \quad \text{e} \quad C = \frac{2kA}{k + \beta} \quad (18)$$

e

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A \left(e^{ikx} + \frac{k-\beta}{k+\beta} e^{-ikx} \right) & \text{per } x < 0 \\ \psi_2(x) = \frac{2k}{k+\beta} A e^{i\beta x} & \text{per } x \geq 0 \end{cases} \quad (19)$$

¹Questa assunzione formale corrisponde alla situazione reale di un tipico esperimento in cui si *conosce* il flusso di elettroni incidenti (legato ad A), e si vuole *misurare* o *predire teoricamente* il flusso di elettroni riflessi e trasmessi (legati, rispettivamente, a B e C).

²Non si può accedere ad una regione con potenziale infinito!

Il significato fisico è diverso dal caso precedente. Poiché l'energia dell'elettrone incidente è maggiore del gradino di potenziale, esso può propagare a destra dello stesso. Ciò è descritto dalla componente $\psi_2(x)$ della funzione d'onda. Esiste, a differenza del caso classico, anche la possibilità che l'elettrone venga riflesso dal gradino di potenziale: ciò corrisponde al secondo termine della espressione per la componente $\psi_1(x)$.

Considerazioni conclusive

La meccanica quantistica suggerisce un modo molto intuitivo di descrivere l'interazione di un elettrone con un gradino di potenziale, mutuando il linguaggio proprio dell'ottica fisica. Essa, infatti, consente di sviluppare una descrizione in termini di *riflessione* e *trasmissione* della funzione d'onda descrivente l'elettrone.

Ricordando che l'intensità di un'onda è pari al quadrato della sua ampiezza, possiamo scrivere che l'*intensità dell'onda incidente* è pari a $|A|^2$. Fisicamente, questa grandezza rappresenta il numero di elettroni per unità di volume che incidono sul gradino, provenendo da sinistra. Il *flusso incidente* rappresenta, invece, il numero di elettroni che passano attraverso l'unità di superficie nell'unità di tempo. Matematicamente il flusso incidente di un'onda è dato dal prodotto $v|A|^2$, dove v è la velocità di propagazione dell'onda. In maniera del tutto analoga si definiscono il *flusso riflesso* $v|B|^2$ ed il *flusso trasmesso* $v'|C|^2$. Abbiamo ovviamente usato la stessa velocità v per onda incidente e riflessa, visto che propagano nella stessa regione $x < 0$ di spazio. Al contrario, per l'onda trasmessa abbiamo indicato una diversa velocità v' poiché essa descrive l'elettrone a destra del gradino di potenziale.

Si definisce **coefficiente di riflessione** R il rapporto tra flusso riflesso e flusso incidente

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \left(\frac{k - \beta}{k + \beta} \right)^2 \quad (20)$$

e **coefficiente di trasmissione** T il rapporto tra flusso trasmesso e flusso incidente

$$T = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2} = \frac{\beta}{k} \left(\frac{2k}{k + \beta} \right)^2 \quad (21)$$

Naturalmente è verificata la condizione $R + T = 1$ che equivale ad esprimere la conservazione del numero totale di elettroni durante il processo di incidenza, riflessione e trasmissione.

Esercitazione no.2 - Elettrone contro una barriera di potenziale

Si consideri un elettrone di energia E in movimento in una regione descritta da una barriera di potenziale come in figura (altezza della barriera: V_0 ; spessore della barriera: a). Studiare la funzione d'onda elettronica per questo problema.

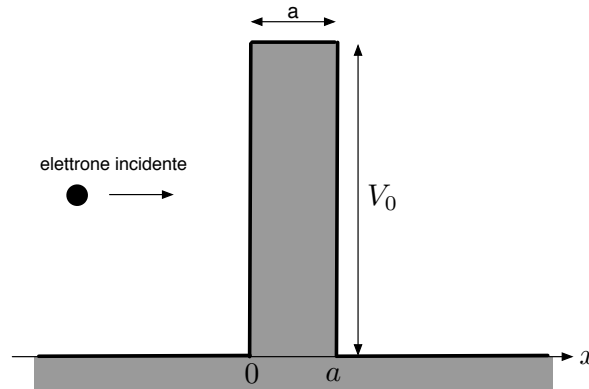


Figura 3: L'elettrone di energia E arriva da sinistra verso destra contro la barriera di potenziale di altezza V_0 e di spessore a .

Questo problema uno-dimensionale va affrontato scrivendo innanzitutto l'equazione di Schrödinger per il potenziale $V(x)$ assegnato:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E\psi(x) \quad (22)$$

dove m_e è la massa dell'elettrone e il potenziale $V(x)$ è quello rappresentato in figura, ovvero:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ V_0 & \text{se } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{se } x > a \end{cases} \quad (23)$$

Questa volta studiamo solo il caso $E < V_0$ per il quale (i) sono massime le differenze tra fisica classica e quantistica e (ii) si può discutere una applicazione tecnologica particolarmente interessante.

Caso $E < V_0$

Secondo la fisica classica una particella incidente con energia inferiore alla barriera non ha alcuna possibilità di superarla.

Ragionando in termini quantistici, invece, possiamo immediatamente scrivere la funzione d'onda $\psi(x)$ nella forma

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & \text{per } x < 0 \\ \psi_2(x) = Ce^{+\alpha x} + De^{-\alpha x} & \text{per } 0 \leq x \leq a \\ \psi_3(x) = A'e^{+ikx} & \text{per } x > a \end{cases} \quad (24)$$

dove

$$k = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}} \quad \text{e} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m_e (E - V_0)}{\hbar^2}} \quad (25)$$

Per quanto riguarda la soluzione $\psi_1(x)$ relativa alla regione $x < 0$, si estendono le considerazioni già fatte: essa rappresenta la sovrapposizione di un'onda incidente (che propaga da sinistra verso destra) e di un'onda riflessa (che propaga da destra verso sinistra). Nel caso, invece, della soluzione $\psi_2(x)$ relativa alla regione di barriera $0 \leq x \leq a$, essa rappresenta la sovrapposizione di un'onda che decade esponenzialmente a partire da $x = 0$ e di un'onda che corrisponde alla soluzione $\exp(+\alpha x)$ che in questo caso non deve essere esclusa per motivi fisici: la larghezza di barriera, infatti, è in questo caso finita. Infine, la soluzione $\psi_3(x)$ per $x > a$ rappresenta la componente di onda trasmessa. La sua ampiezza A' è ovviamente diversa

dall'ampiezza A dell'onda incidente, a causa del fatto che: (i) alla barriera si verifica riflessione e (ii) attraverso la barriera si verifica smorzamento (decadimento esponenziale) dell'onda.

Il risultato ottenuto è di importanza fondamentale: *secondo le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che l'elettrone incidente sulla barriera di potenziale (con energia inferiore alla barriera) possa "penetrarla" e passarci attraverso.* Questo fatto è noto col nome di **effetto tunnel** ed è alla base del principio di funzionamento di alcuni moderni dispositivi elettronici a stato solido. L'andamento complessivo della funzione d'onda è rappresentato in Fig.4.

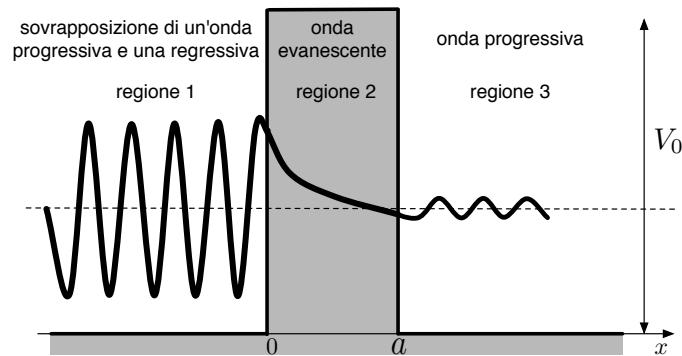


Figura 4: Andamento della funzione d'onda per un elettrone di energia E incidente (da sinistra verso destra) contro la barriera di potenziale di altezza $V_0 > E$ e di spessore a .

La fisica quantistica di una barriera di potenziale risulta chiara utilizzando il linguaggio dell'ottica, come concesso dal fatto che l'elettrone è descritto in meccanica quantistica tramite un'onda (di materia). Ricordiamo innanzitutto che *l'intensità di un'onda è in generale proporzionale al quadrato della sua ampiezza.* Ricordiamo altresì che per le onde di materia tale intensità corrisponde al *numero di elettroni presenti nell'onda di materia.* Introduciamo quindi il concetto di *flusso di un'onda di materia* come il *numero di elettroni che attraversano l'unità di superficie nell'unità di tempo.* Con questa definizione il flusso risulta ovviamente proporzionale (i) alla velocità di propagazione degli elettroni e (ii) all'intensità dell'onda materiale ad essi associata. Combinando queste definizioni possiamo scrivere che nella situazione descritta

il flusso incidente sulla barriera $\sim v|A|^2$

il flusso riflesso dalla barriera $\sim v|B|^2$

il flusso trasmesso oltre la barriera $\sim v'|A'|^2$

dove abbiamo indicato con v e v' le velocità dell'elettrone rispettivamente nella regione 1 ($x < 0$) e nella regione 2 ($x > a$), corrispondenti a valori non necessariamente uguali. In analogia all'ottica si possono anche calcolare i seguenti

coefficiente di riflessione:	$R = \frac{\text{flusso riflesso}}{\text{flusso incidente}} = \frac{v B ^2}{v A ^2}$
coefficiente di trasmissione:	$T = \frac{\text{flusso trasmesso}}{\text{flusso incidente}} = \frac{v' A' ^2}{v A ^2}$

per la barriera: essi devono ovviamente rispettare la condizione $R + T = 1$.

Se consideriamo in particolare il coefficiente di trasmissione T ci rendiamo facilmente conto che esso è funzione dell'energia E dell'elettrone incidente attraverso i coefficienti A ed A' e la velocità v . È possibile dimostrare che la funzione $T = T(E)$ ha il tipico andamento riportato in Fig.5. Le informazioni contenute in questo grafico sono davvero importanti, alcune addirittura assolutamente inaspettate. Innanzitutto osserviamo che la probabilità di trasmissione è significativamente alta solo se il valore dell'energia dell'elettrone incidente è maggiore dell'altezza di barriera. Tuttavia, anche in questo caso la trasmissione è nella maggior parte dei casi inferiore al 100%: una parte dell'onda sarà comunque riflessa. Tuttavia, esistono valori particolari di E in corrispondenza dei quali $T = 1$, ovvero: per certi valori di energia dell'elettrone incidente la barriera è perfettamente trasparente. Inoltre, contrariamente a quanto previsto

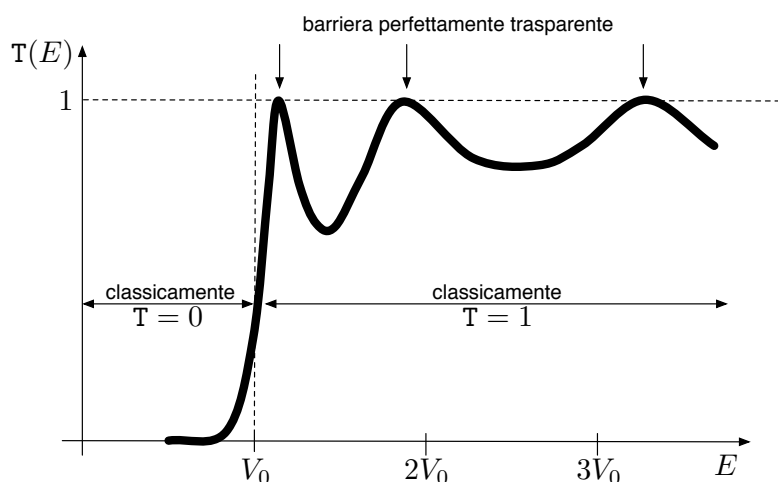


Figura 5: Coefficiente di trasmissione di una barriera di potenziale V_0 in funzione dell'energia E di un elettrone incidente. Le frecce individuano le energie di incidenza in corrispondenza delle quali la barriera è perfettamente trasparente ($T=1$). Per confronto sono riportati i soli due casi previsti dalla fisica classica.

dalla fisica classica, l'elettrone ha una piccola, ma non nulla, probabilità di passare oltre la barriera anche quando la sua energia è inferiore all'altezza di quest'ultima.

L'interpretazione probabilistica della meccanica quantistica ci è di aiuto per comprendere il significato di un coefficiente $T \neq 0$ (perfetta riflessione) o $T \neq 1$ (completa trasmissione), i soli due casi previsti dalla fisica classica. Dire, ad esempio, che $T = 0.85$ equivale ad affermare che in un ipotetico esperimento in cui 100 elettroni con identica energia vengono accelerati contro la stessa barriera, in media solo 85 passano per tunneling quantistico, mentre 15 sono riflessi. Non si può prevedere quale elettroni passi o quale venga riflesso, ma in media i numeri di particelle che corrispondono ai due casi stanno in rapporto 15/85.

Applicazione ingegneristica: il microscopio elettronico ad effetto tunnel

- L'effetto tunneling quantistico è utilizzato per realizzare il *microscopio elettronico ad effetto tunnel* (Tunneling Electron Microscope, TEM) dove si sfrutta una geometria come quella illustrata schematicamente in Fig.6: una punta molto acuminata di materiale conduttore viene posta molto vicina alla superficie del campione da studiare. Il dispositivo è completato in modo tale che si possa misurare la corrente di elettroni che passa dal campione alla punta TEM, mantenendo il tutto in condizioni di vuoto spintissimo. In condizioni ordinarie ovviamente non si osserva alcuna corrente: non essendoci contatto fisico tra punta e superficie, lo strato di vuoto che le separa funziona da barriera di potenziale per gli elettroni presenti nella punta. Applicando una opportuna differenza di potenziale tra punta e campione è invece rivelato il passaggio di elettroni che riescono a penetrare la suddetta barriera per effetto tunnel.

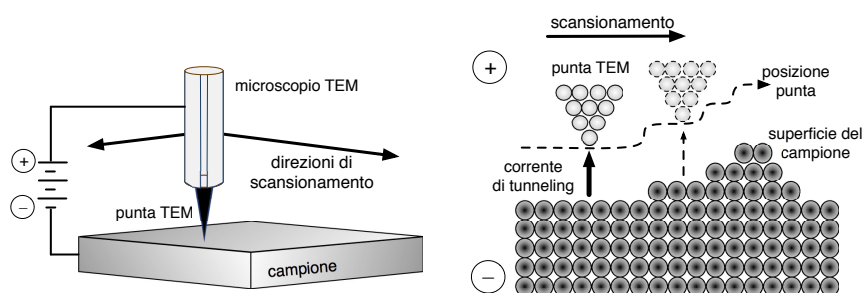


Figura 6: Schema di un microscopio ad effetto tunnel (sinistra) ed esempio di una immagine di topografia superficiale di un campione cristallino (destra).

L'intensità della corrente di tunneling dipenderà ovviamente dalla tensione applicata (che ha il compito di accelerare gli elettroni contro la barriera), da quanti stati quantistici sono localmente disponibili nel campione per fornire gli elettroni che possono subire effetto tunnel e dalla distanza punta-superficie. Se si immagina di poter scansionare tale superficie modificando in contemporanea la tensione applicata in modo che risulti costante la corrente di tunneling, ne risulta che la distanza punta-superficie varia in funzione della posizione: questa procedura fornisce una immagine topografica alla scala atomica della superficie stessa. La risoluzione spaziale di un microscopio TEM è davvero elevatissima, scendendo alla scala delle tipiche distanze atomo-atomo dei materiali a stato solido.