ELEMENTI DI STRUTTURA DELLA MATERIA
Corso A - Prof. L. Colombo

Esercitazione no.10 - 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.

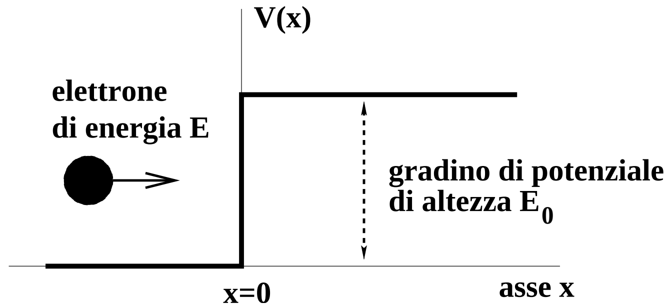

Figura 1: L'elettrone di energia E arriva da sinistra verso destra contro il gradino di potenziale posto in $x = 0$ e di altezza pari a E_0.

Questo problema uno-dimensionale va affrontato scrivendo innanzitutto l'equazione di Schrödinger per il potenziale $V(x)$ assegnato. Utilizzando l'eq.(3.18) del testo[1] e le regole di costruzione per gli operatori quantistici, possiamo immediatamente scrivere

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

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

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ E_0 & \text{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{2}$$

Conviene distinguere tra i due diversi casi $E < E_0$ e $E > E_0$ e trattarli separatamente.

[1] Quando ci riferiamo al testo, intendiamo il volume di L. Colombo, *Elementi di struttura della materia*, edito da Hoepli (Milano).

$\boxed{\textbf{Caso } E < E_0}$

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 vettor d'onda dell'onda di de Broglie associata all'elettrone. Possiamo trascrivere questo risultato in forma matematica

$$\psi_1(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx} \tag{3}$$

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 $V(x) = E_0$. Se indichiamo con $\psi_2(x)$ la funzione d'onda per $x \geq 0$, la corrispondente equazione di Schrödinger si scrive come

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + E_0\right]\psi_2(x) = E\psi_2(x) \tag{4}$$

ovvero

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{2m_e(E-E_0)}{\hbar^2}\right]\psi_2(x) = 0 \tag{5}$$

Notiamo che il coefficiente del secondo termine è negativo in quanto con $E < E_0$; pertanto ponendo

$$\frac{2m_e(E-E_0)}{\hbar^2} = -\alpha^2 \tag{6}$$

con α numero reale, possiamo scrivere

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

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

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

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* perchè 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

$$\psi_2(x) = C\mathrm{e}^{-\alpha x} \quad \text{con} \quad \alpha = \sqrt{\frac{2m_e(E_0 - E)}{\hbar^2}} \tag{9}$$

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 descresce esponenzialmente all'aumentare della distanza (verso destra) dal gradino. Questa è una prima importante differenza tra la soluzione classica e quella quantistica.

Caso $E > E_0$

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

$$\psi_1(x) = A\mathrm{e}^{ikx} + B\mathrm{e}^{-ikx} \tag{10}$$

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

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

dove abbiamo posto

$$\beta^2 = \frac{2m_e(E - E_0)}{\hbar^2} \tag{12}$$

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

$$\psi_2(x) = C\mathrm{e}^{i\beta x} \tag{13}$$

$\boxed{\textbf{Raccordo delle funzioni } \psi_1 \textbf{ e } \psi_2 \textbf{ a } x = 0}$

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*[2].

Nel $\boxed{\textbf{caso } E < E_0}$ le condizioni

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

conducono immediatamente alle seguenti equazioni

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

[2]La continuità della funzione d'onda è ovviamente legata al suo significato probabilistico: poichè 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. Più complessa è la giustificazione per la continuità della derivata prima. La matematica coinvolta, infatti, va oltre il livello di trattazione sviluppato in questo corso. Ci limiteremo ad un argomento qualitativo: dire che la funzione d'onda e la sua derivata sono continue, equivale ad assicurare che il flusso di particelle descritte da quella funzione attraverso la barrera sia continuo. Ciò è del tutto equivalente all'ottica: quando un'onda incide sulla superficie di separazione tra due mezzi, la somma del flusso associato all'onda riflessa e all'onda trasmessa deve essere uguale al flusso associato all'onda incidente. Matematicamente il concetto di flusso è legato alla derivata prima della funzione d'onda.

ovvero

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

da cui, supponendo noto[3] il coefficiente A, si ottiene:

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

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.

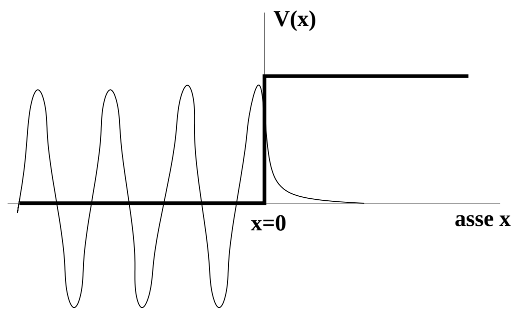

Figura 2: Funzione d'onda per un elettrone che arriva con energia E da sinistra verso destra contro il gradino di potenziale posto in $x = 0$ ed altezza E_0. Soluzione valida per $E < E_0$.

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 $E_0 \to +\infty$), la funzione d'onda deve essere necessariamente nulla[4], ovvero: $\psi_2(x) = 0 \ \forall \ x \geq 0$. La situazione è dunque corrispondente al caso di Fig.3.

Nel $\boxed{\textbf{caso } E > E_0}$ le condizioni (14) conducono immediatamente, supponendo noto[3] il coefficiente A, alle seguenti equazioni

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

[3]Basta imporre le condizioni di normalizzazione della funzione d'onda.

[4]Non si può accedere ad una regione con poenziale infinito!

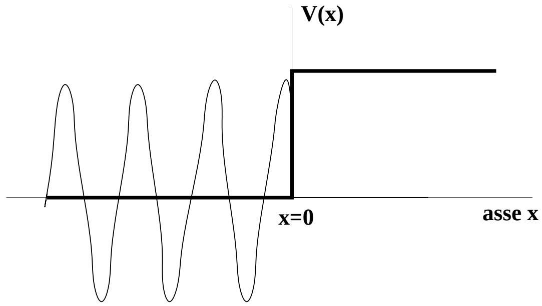

Figura 3: Funzione d'onda per un elettrone che arriva con energia E da sinistra verso destra contro il gradino di potenziale posto in $x = 0$ ed altezza $E_0 \to +\infty$.

e

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

Il significato fisico è diverso dal caso precedente. Poichè 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' poichè essa descrive l'elettrone a destra del gradino di potenziale.

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

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

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

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

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.