Meccanica Quantistica

I postulato	Definizione di funzione d'onda
II postulato	Definizione degli operatori
III postulato	Risultati della misura = autovalori degli operatori
IV postulato	Evoluzione temporale del sistema = Equazione di Schroedinger

Meccanica Quantistica

L'evoluzione temporale della funzione d'onda (e dunque del sistema fisico da essa rappresentato) è data dall'equazione:

$$\mathbf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{t}} \psi = \mathbf{H}\psi$$

Equazione Di Shrödinger

In cui H è l'operatore Hemiltoniano, ovvero l'operatore quantistico assegnato all'espressione classica dell'energia totale del sistema considerato

Per i sistemi conservativi:

$$H\Psi = E\Psi$$

La Meccanica Quantistica: alcuni esempi

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Caso di una particella libera di massa m (caso unidimensionale)

La sua energia potenziale è nulla

Quale sarà la sua equazione agli autovalori?

$$E_T = E_{cin} = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \qquad (56)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \Rightarrow \frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0$$

Quest'equazione che tipo di soluzioni ammette?

$$\psi_1(x) = A\cos(kx)$$

$$\psi_2(x) = B\sin(kx)$$

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

*Esempio*1

$$\psi_1(x) = A\cos(kx)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}Ak^2\cos(kx) + EA\cos(kx) = 0$$

$$k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad (57)$$

$$p = \sqrt{2m_e E}$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi}{\sqrt{2m_e E}}\frac{h}{2\pi}$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e E}}$$

In perfetto accordo con la lunghezza d'onda ricavata da de Broglie (34)

Solo che qui ci siamo arrivati senza alcuna considerazione a priori, ma utilizzando il formalismo della meccanica quantistica

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Quanto vale l'energia?

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$\psi(x) = A\cos(kx)$$

Non è l'unica funzione d'onda ammissibile!

Anche

$$\psi_2(x) = B\sin(kx)$$

E otterremmo lo stesso risultato, sia per k che, ovviamente, per E

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Più in generale, possiamo affermare che l'integrale generale in questo esempio specifico è della forma:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx) \tag{58}$$

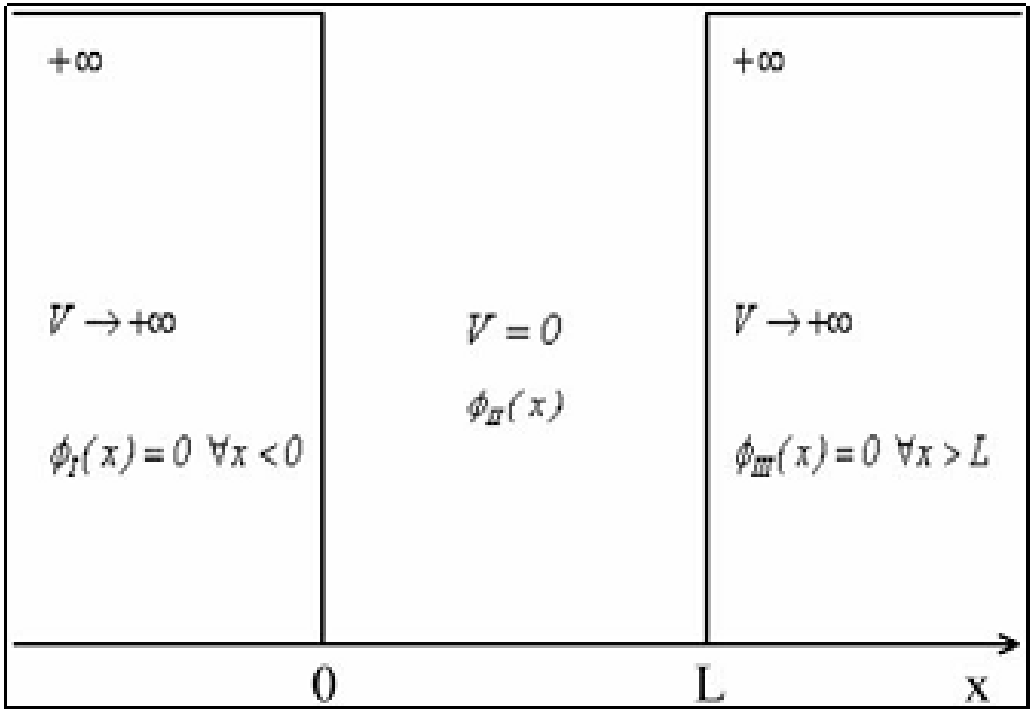
Il che vuol dire che **l'equazione d'onda di una particella libera è rappresentata da un'onda piana ad ampiezza costante in tutto lo spazio**.

Inoltre, avendo detto che tale funzione d'onda è una funzione complessa, ponendo A=1 e B=i

$$\psi(x) = \cos(kx) + i\sin(kx) = e^{ikx} \tag{59}$$

Caso di una particella confinata.

Consideriamo ora il caso di una "particella in una scatola", ovvero quello di una particella di massa m confinata in una "buca di potenziale" di larghezza L e di pareti di potenziale infinitamente alte.



Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Facciamo alcune considerazioni:

- Il potenziale è infinito per $x \leq 0$ e per $x \geq L$
- Il potenziale è nullo per $0 < x < L$

Cosa significa questo?

Ragionevolmente la funzione d'onda al di fuori di tale intervallo è nulla!

Probabilità di trovare la particella al di fuori della buca è nulla!

All'interno della buca la particella si comporta come una particella libera, non è soggetta ad alcuna forza.

Abbiamo però delle condizioni al contorno

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

L'integrale dell'equazione ovvero la funzione d'onda all'interno della buca avrà sempre soluzione:

$$\psi(x) = A\cos(kx) + B\sin(kx)$$

$$\psi(0) = 0 \Rightarrow A\cos(0) = 0 \Rightarrow A = 0$$

$$\psi(L) = 0 \Rightarrow B\sin(kL) = 0$$

$$kL = n\pi$$

B=0 soluzione non accettabile

$$\boxed{k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}}$$

Dalla (57)

$$\frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} L = n\pi \qquad (60)$$

Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 = E_0 n^2 \tag{61}$$

E_n è l'energia della particella confinata nella buca

Da tale relazione si può evincere che:

in una buca di potenziale avente spessore L una particella **non può assumere tutti i valori di energia, ma solo valori discreti**

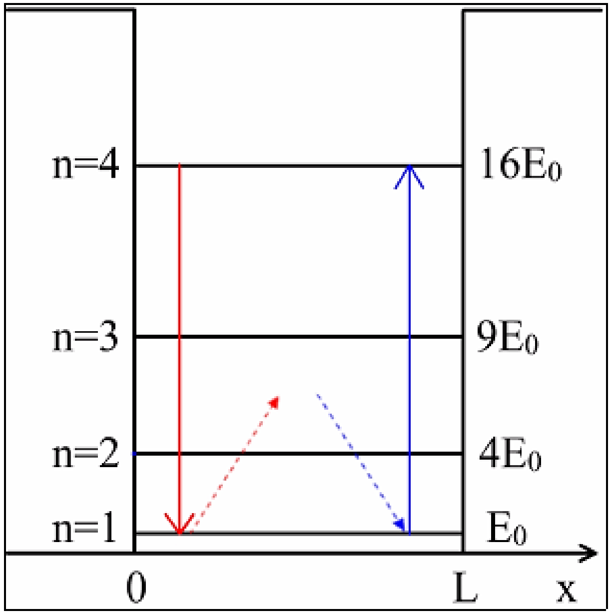
Si è giunti, **senza alcuna assunzione ad hoc**, ma semplicemente **tramite lo schema concettuale della meccanica quantistica**, ad una condizione di **DISCRETIZZAZIONE DELLO SPETTRO DI ENERGIE DI UN SISTEMA FISICO.**

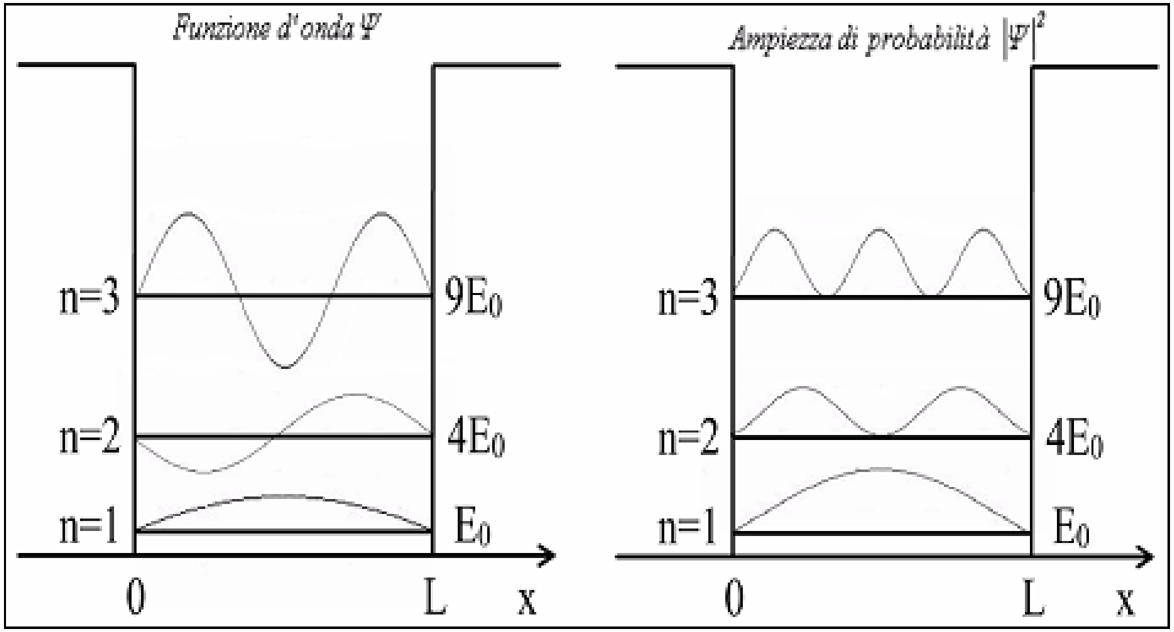
Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

$$k = \frac{n\pi}{L}$$

$$\psi(x) = B\sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_n}} = \frac{2L}{n}$$





Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

$$\psi(x) = B\sin(\frac{n\pi}{L}x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x) =$$

$$= B^2\int_0^L \sin^2\frac{n\pi}{L}x\,dx =$$

$$= B^2\left(\frac{L}{2}\right)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\psi(x)\psi^*(x) = 1$$

Le funzioni vanno normalizzate!

$$B = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$$

Cerchiamo il valore di *B* che normalizza la funzione.

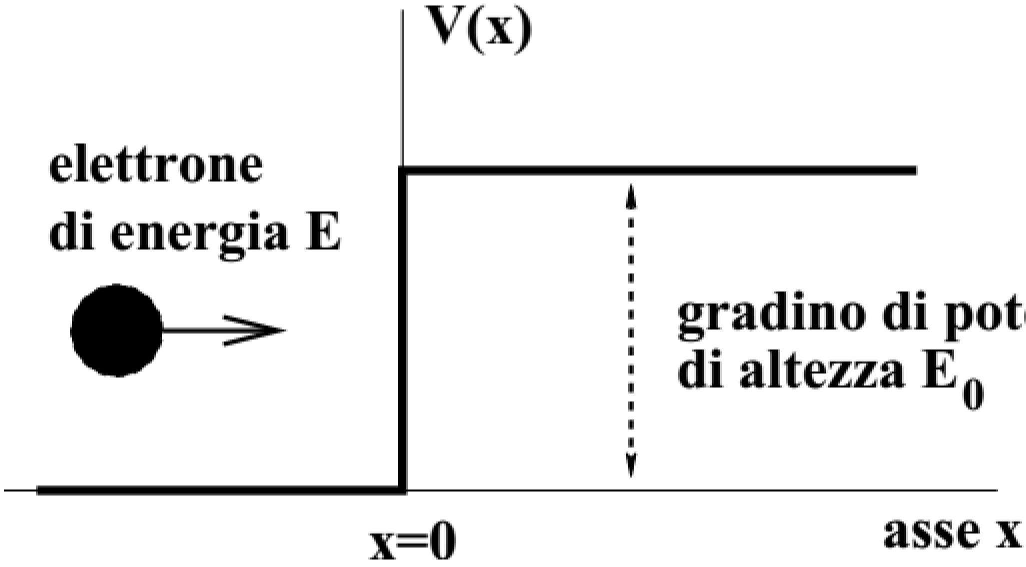
Meccanica Quantistica: alcune applicazioni

Notate che per la **particella libera** tutte le energie erano permesse, perché non c'erano restrizioni: la particella libera può avere **qualsiasi energia** cinetica (si è visto che per esempio l'elettrone viene accelerato inizialmente da una differenza di potenziale, che può essere scelta arbitrariamente)

Viceversa, per la **particella nella scatola** le condizioni al contorno impongono restrizioni alle funzioni d'onda e quindi all'energia, che è ora **quantizzata**. Appare per la prima volta un **numero quantico**, che è il numero intero n =1,2,3. . .

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Consideriamo il caso di un elettrone libero che si muove verso un gradino di potenziale



Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Distinguiamo due casi

1) $E < E_0$
2) $E > E_0$

Scriviamo l'equazione di Schroedinger associata al problema

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

$V(x) = 0$ se $x<0$

$V(x) = E_0$ se $x\geq 0$

<u>Caso 1 $E < E_0$</u>

Per **x<0** l'elettrone si propaga come una particella libera alla quale può sovrapporsi un'onda riflessa, abbiamo che la soluzione dovrà essere del tipo:

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

Per **x≥0**

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

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

$$E - E_0 < 0$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Poniamo:

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

α è un numero reale positivo

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

$$\psi_2(x) = Ce^{\pm\alpha x}$$

$$accettibile$$

$$\psi_2(x) = Ce^{-\alpha x}$$

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

Probabilità non nulla di trovare l'elettrone a destra del gradino!

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Imponiamo ora le condizioni di raccordo sia sulla funzione d'onda che sulla sua derivata prima

Per $E < E_0$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

Otteniamo il seguente sistema:

$$\begin{cases} A + B = C \\ ikA - ikB = -\alpha C \end{cases}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

$$B = \frac{(ik+\alpha)A}{ik-\alpha}$$

$$C = \frac{2ik\alpha A}{ik-\alpha}$$

$$\psi_1(x) = A\left[e^{ikx} + \frac{(ik+\alpha)}{ik-\alpha}e^{-ikx}\right]$$

$$\psi_2(x) = \frac{2ikA}{ik-\alpha}e^{-\alpha x}$$

La probabilità che l'elettrone oltrepassi il gradino è data da $|\Psi|^2$

$$|\psi_2|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

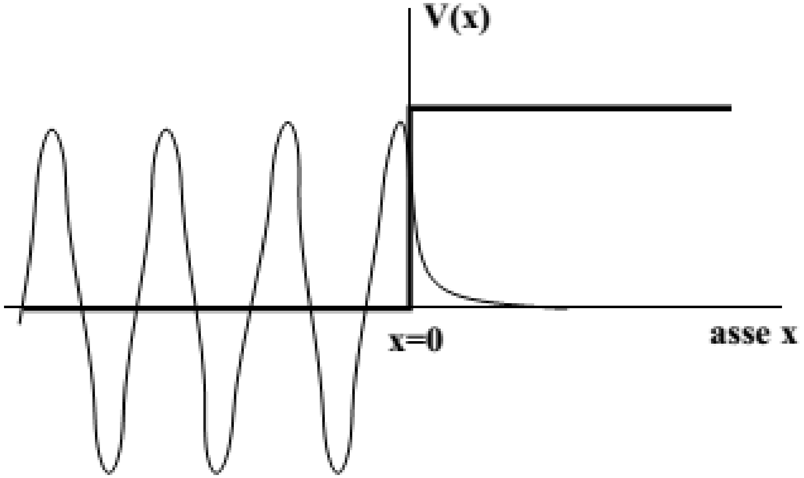
Secondo le leggi della meccanica quantistica

Esiste una probabilità non nulla che l'elettrone attraversi il gradino di potenziale

La funzione d'onda trasmessa tende a decrescere allontanandosi da x=0, e all'aumentare di α

Per $E_0=\infty$ l'onda trasmessa è nulla

$$|\psi_2|^2 = |C|^2 e^{-2\alpha x}$$



Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Caso $E>E_0$

Per **x<0** la trattazione è identica

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

Per **x≥0** l'equazione diventa

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

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

β è un numero reale positivo

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

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

Imponiamo ora le condizioni di raccordo sia sulla funzione d'onda che sulla sua derivata prima

Per $E > E_0$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0)$$

$$\frac{d\psi_1(0)}{dx} = \frac{d\psi_2(0)}{dx}$$

Otteniamo:

$$B = \frac{(k-\beta)A}{k+\beta}$$

$$C = \frac{2kA}{k+\beta}$$

Meccanica Quantistica: gradino di potenziale

$$\psi_1(x) = A\left[e^{ikx} + \frac{k-\beta}{k+\beta}e^{-ikx}\right]$$

$$\psi_2(x) = \frac{2kA}{k+\beta}e^{i\beta x}$$

$$R = \frac{v|B|^2}{v|A|^2} = \left[\frac{k-\beta}{k+\beta}\right]^2$$

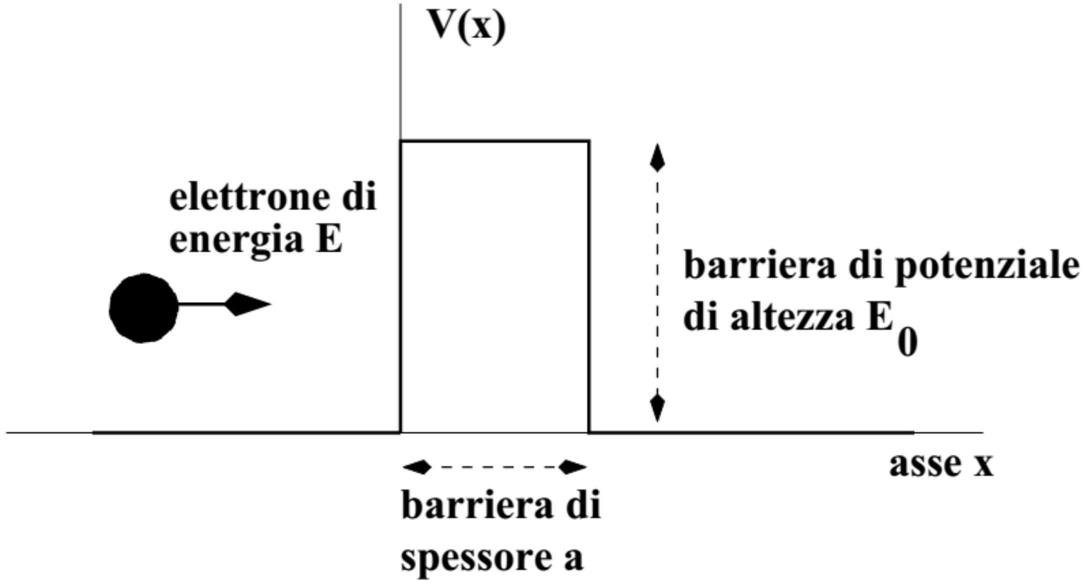
Consideriamo il coefficiente di riflessione

$$T = \frac{v'|C|^2}{v|A|^2} = \frac{\beta}{k}\left[\frac{2k}{k+\beta}\right]^2$$

Secondo le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che l'elettrone venga riflesso dal gradino di potenziale, anche se la sua energia è maggiore

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Consideriamo il caso di un elettrone libero che incontra una barriera di potenziale come quella in figura



Ancora una volta, l'equazione associata è:

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

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

In questo caso

$V(x) = 0 \qquad x < 0$

$V(x) = E_0 \qquad 0 \leq x \leq a$

$V(x) = 0 \qquad x > a$

Caso $E < E_0$

$$\psi_1(x) = Ae^{ik_1x} + Be^{-ik\ x}$$

$$\psi_2(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$$

$$\psi_3(x) = Fe^{ik_2x} + Ge^{-ik_2x}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_eE}{\hbar^2}}$$

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

La componente $+\alpha x$ esiste perché in questo caso la barriera è di larghezza finita, al contrario del caso precedente

Si può però dimostrare che C<<D → solo smorzamento

Inoltre non ho particelle che vengono da destra → G=0

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Facciamo alcune considerazioni

La componente $+\alpha x$ (all'interno della barriera) esiste perché in questo caso **la barriera è di larghezza finita**, al contrario del caso precedente.

La soluzione per $x>a$ ha un'ampiezza F inferiore ad A perché vi sarà **in parte riflessione** dell'onda incidente e **in parte smorzamento** all'interno della barriera

Anche in questo caso posso ricavarmi i valori delle costanti imponendo le condizioni di raccordo

Meccanica Quantistica: Effetto Tunnel

Dobbiamo capire se è possibile che una particella fuoriesca dal gradino di potenziale

A noi in realtà interessa determinare A ed F e il loro rapporto e vedere che **esiste un coefficiente di trasmissione** diverso da 0 e che **aumenta a diminuire dello spessore della barriera**

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

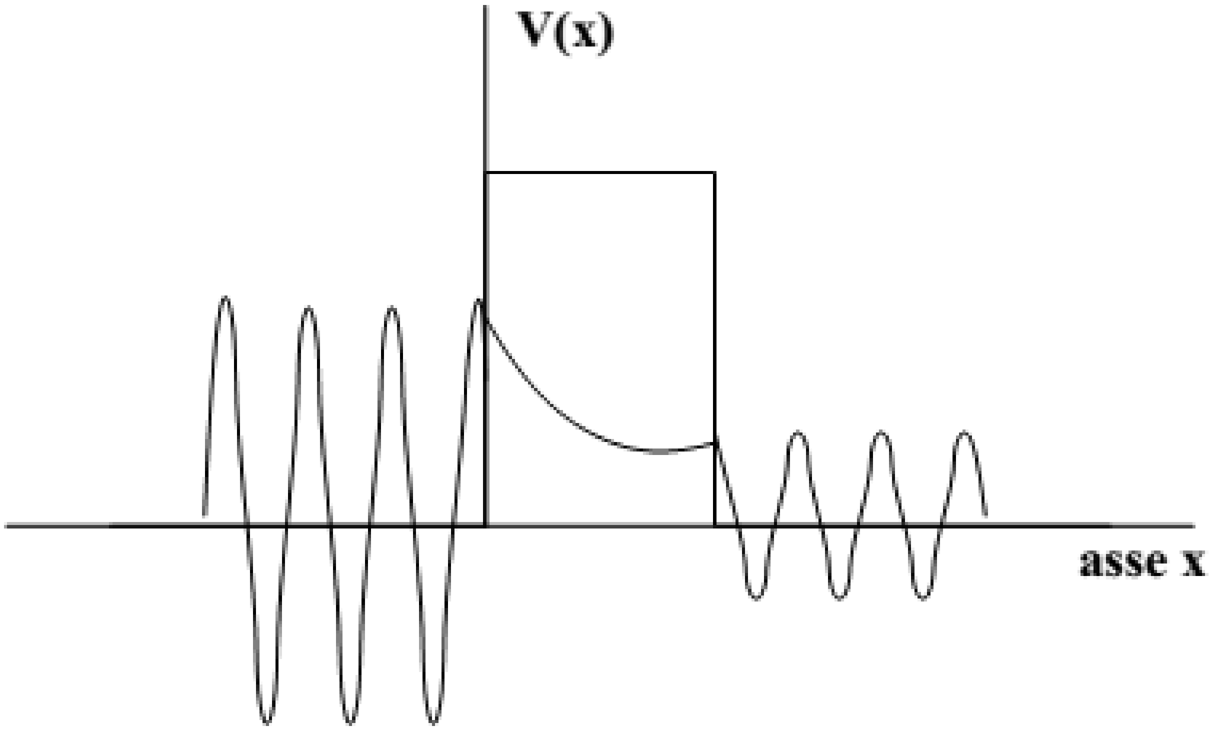
$$\frac{F}{A} = \frac{4ik\alpha e^{-2ika}}{(\alpha + ik)^2 e^{-2\alpha a} - (\alpha - ik)^2 e^{2\alpha a}} \approx \frac{4ik\alpha e^{-2ika}}{(\alpha + ik)^2} e^{-2\alpha a}$$

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} \approx \left[\frac{4\alpha k}{\alpha^2 + k^2}\right] e^{-4\alpha a}$$

Meccanica Quantistica: Effetto Tunnel

Secondo le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che un elettrone (qualsiasi particella materiale) con energia inferiore alla barriera di potenziale, possa superare tale barriera

EFFETTO TUNNEL



Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

Caso E > E_0

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

$$\psi_2(x) = Ce^{i\beta x} + De^{-i\beta x}$$

$$\psi_3(x) = Ee^{ikx}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m_e E}{\hbar^2}}$$

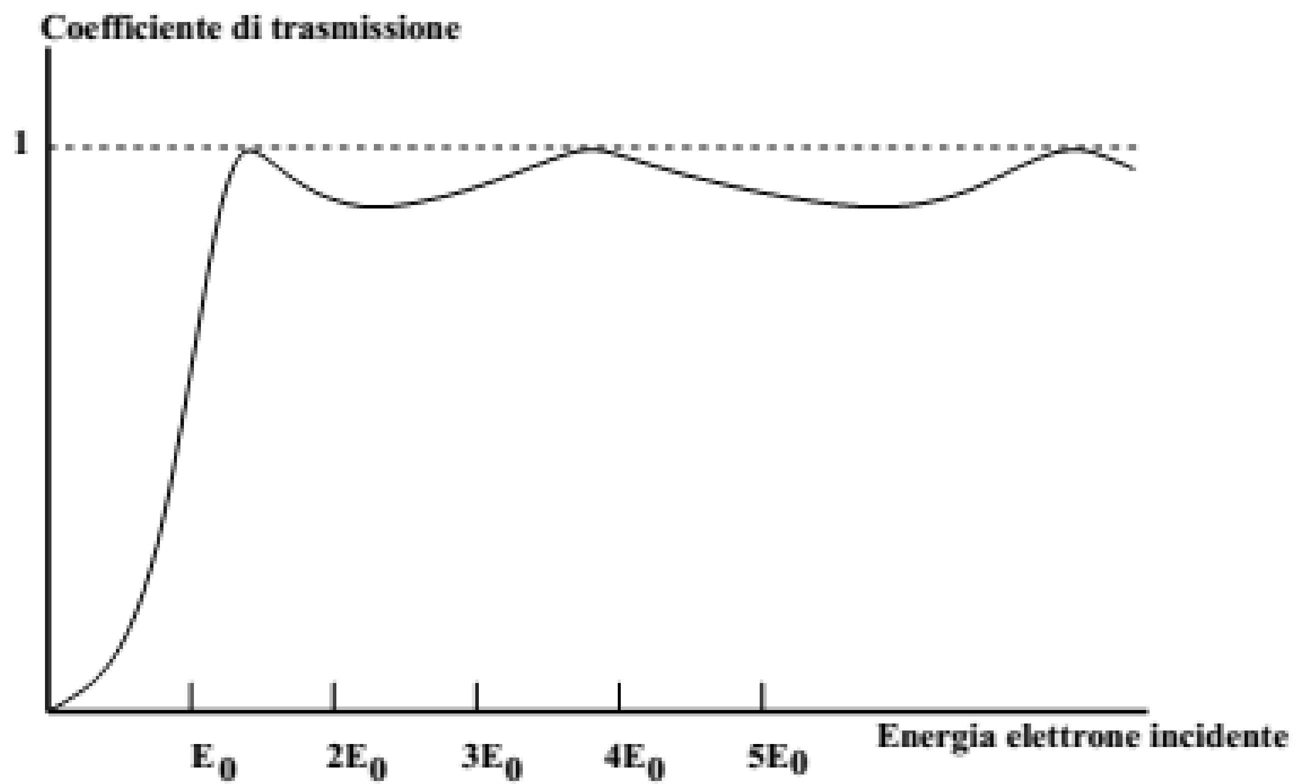
$$\beta = \sqrt{\frac{2m_e (E - E_0)}{\hbar^2}}$$

Per le leggi della meccanica quantistica esiste una probabilità non nulla che l'onda venga riflessa dalla barriera di potenziale

Meccanica Quantistica: barriera di potenziale

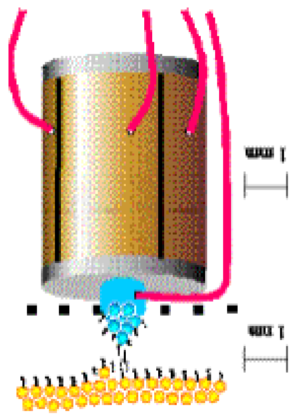
Anche in questo caso, imponendo le condizioni al contorno posso ricavarmi i coefficienti A ed F e calcolare il coefficiente di trasmissione T=F/A

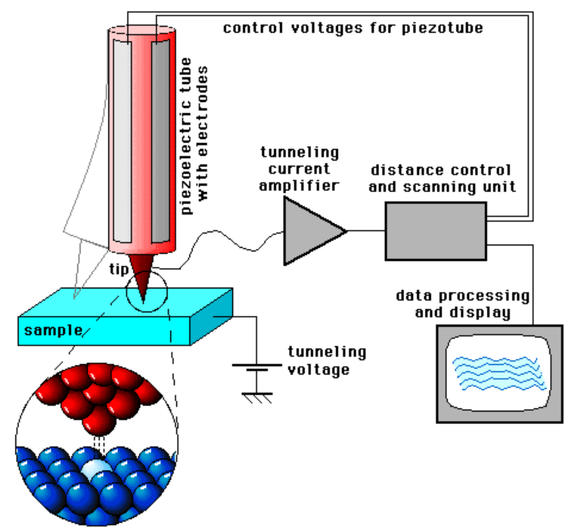
Esistono dei valori di F dell'elettrone incidente per i quali la barriera è trasparente!



Microscopia a Effetto Tunnel

La superficie del campione viene analizzata tramite una sonda
Un **movimentatore piezoelettrico** funziona da trasduttore e serve a muovere il campione rispetto alla punta, o viceversa, nel modo desiderato. Al fine di poter raggiungere la risoluzione atomica esso deve essere in grado di eseguire degli spostamenti con la precisione dell'Ångstrom.
Il segnale ricavato dall'interazione sonda-campione permette di ottenere informazioni sulla morfologia del campione





Interazione punta-campione:

Corrente di tunneling → Scanning Tunneling Microscopy (STM)