Seconda parte: stati liberi

- Stati liberi e stati legati
- Prototipo di stato libero
- Salti di potenziale
- Stati liberi per la buca di potenziale finita
- Barriera finita di potenziale
- Effetto tunnel: riflessione e trasmissione
- Effetto tunnel: microscopia ad effetto tunnel
- Effetto tunnel: altri esempi
- Livelli energetici nei conduttori

Stati liberi

Stati legati: la particella è confinata in una zona finita di spazio.

(cum grano salis)

Stati liberi: la particella può essere ovunque nello spazio.

Caratteristiche generali in MQ:

- Assenza di onde stazionarie

- Assenza di quantizzazione

Prototipo di stato libero

- Richiami di onde piane:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2}+U(x)\Psi(x,t)=i\hbar\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t}$$

Se $U(x)=0$ allora:

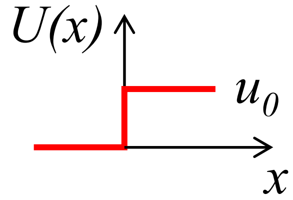
$\Psi(x,t)=e^{i(kx-\omega t)}$ è un'onda piana progressiva ($\langle p\rangle=+k\hbar$)

$\Psi(x,t)=e^{i(-kx-\omega t)}$ è un'onda piana regressiva ($\langle p\rangle=-k\hbar$)

Entrambe di energia $E=\hbar\omega=\dfrac{\hbar^2k^2}{2m}$

Se $U(x)\neq 0$ allora avrò soluzioni diverse, ma vicine a queste, o combinazioni di queste….

Salto di potenziale



- Iniziamo con il caso più semplice:

Supponiamo di sapere che vi è una sorgente di particelle (elettroni) che provengono da sinistra con $E>u_0$ e che nel loro percorso incontrano il salto di potenziale.

$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$ è l'onda iniziale ($x<0$), con $E=\hbar\omega$, $k=\sqrt{2mE}/\hbar$

In generale per $x<0$: $\Psi_I(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)} + Be^{i(-kx-\omega t)}$

Per $x>0$, $\Psi_{II}(x,t) = Ce^{i(k'x-\omega' t)}$ con $\omega' = E/\hbar = \omega$, $k' = \sqrt{2m(E-u_0)}/\hbar$

Oss: per $x>0$ manca l'onda regressiva per le nostre condizioni iniziali!

Se richiedo la continuità a $x=0$, ogni t, trovo: $A+B=C, \quad k(A-B)=k'C$

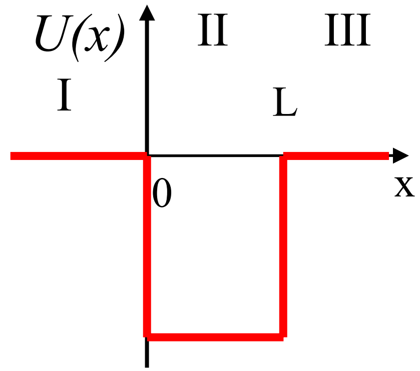
In generale: B≠0 → ho SEMPRE un'onda riflessa dal salto di potenzial

C≠0 → ho un'onda trasmessa dopo il salto di potenziale ($E>u_0$)

Stati liberi per la buca di potenziale

Consideriamo ora quanto avviene nel caso precedente (sorgente di Elettroni a sinistra) nel caso della buca di potenziale:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \quad (I) \\ -U_0 & 0 < x < L \quad (II) \\ 0 & x > L \quad (III) \end{cases}$$



Le soluzioni ad *E* fissata sono:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{+i(kx-\omega t)} + Be^{+i(-kx-\omega t)} & x < 0 \quad (I) \\ Ce^{+i(k'x-\omega t)} + De^{+i(-k'x-\omega t)} & 0 < x < L \quad (II) \\ Fe^{+i(kx-\omega t)} & x > L \quad (III) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE}/\hbar \\ k' &= \sqrt{2m(E+U_0)}/\hbar \end{aligned}$$

Condizioni al contorno in 0 e in L → 4 relazioni: fisso B,C,D,F

Non ho alcuna relazione di quantizzazione!

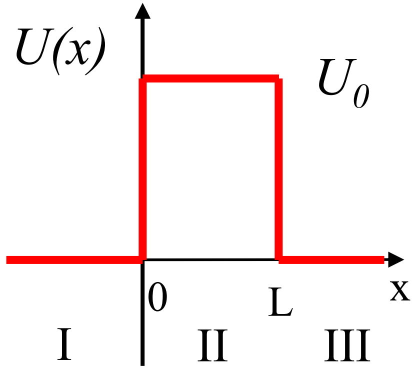
Definisco: probabilità di **riflessione** $R = |B|^2/|A|^2 = f_1(k,L,U_0)$

Probabilità di **trasmissione** $T = |F|^2/|A|^2 = f_2(k,L,U_0)$

Barriera finita di potenziale

Caso analogo (uguale!!) al precedente ma diverso dal caso classico:

$$U(x)=\begin{cases} 0 & x<0 \quad (I) \\ +U_0 & 0<x<L \quad (II) \\ 0 & x>L \quad (III) \end{cases}$$



Supponiamo di avere a sinistra una sorgente di elettroni con $E<U_0$:

$\Psi(x,t)=e^{i(kx-\omega t)}$ è l'onda iniziale ($x<0$), con $E=\hbar\omega$, $k=\sqrt{2mE}/\hbar$

Classicamente la particella rimarrebbe nella zona I (rimbalza in $x=0$)

Quantisticamente il sistema è descritto dalle stesse equazioni di prima:

Unica differenza: $-U_0 \rightarrow +U_0$

$\psi_{II}(x)=Ce^{+ik'x}+De^{-ik'x}$ con $k'=\sqrt{2m(E-U_0)}/\hbar$ $(\in\mathbb{C}$ se $E<U_0)$

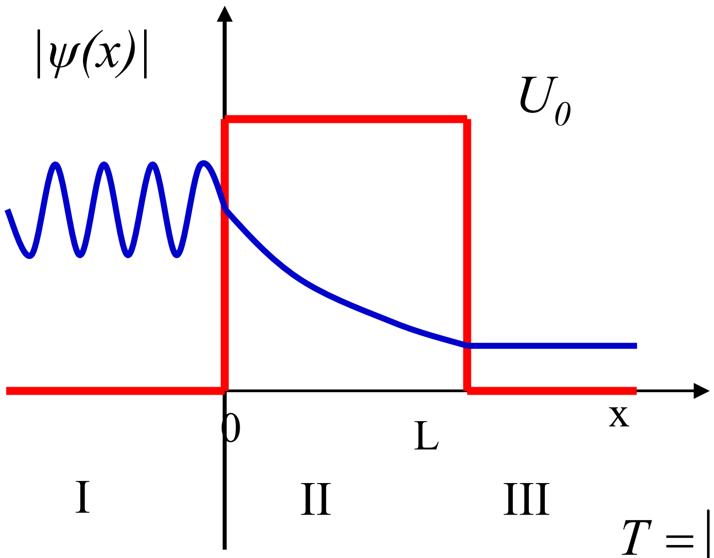
Effetto tunnel: riflessione e trasmissione

Soluzione generale per $E<U_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x<0 \quad (I) \\ Ce^{+\alpha x} + De^{-\alpha x} & 0<x<L \quad (II) \\ Fe^{+ikx} & x>L \quad (III) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{array}{c} k = \sqrt{2mE}/\hbar \\ \alpha = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar \ \ (\in \mathbb{R}) \end{array}$$

Condizioni al contorno in 0 e in L → 4 relazioni: fisso B,C,D,F

Non ho alcuna relazione di quantizzazione!



La particella può penetrare dentro la barriera di potenziale, ed uscirne a x>L

Probabilità di **trasmissione** dell'onda

$$T = |F|^2/|A|^2 = f_2(E,L,U_0) \approx \exp\left(-2L\frac{\sqrt{2m(U_0-E)}}{\hbar}\right)$$

Trasmissione risonante

Caso analogo per $E>U_0$. Stesso formalismo, stessi risultati.

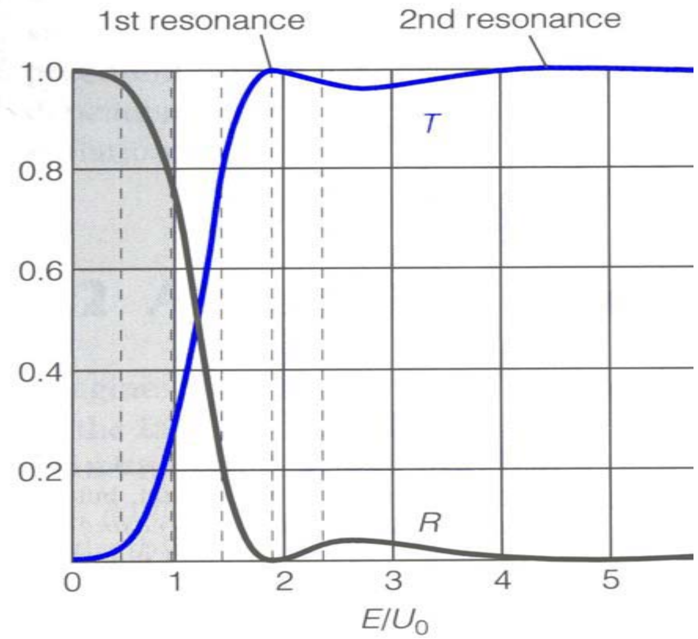
Definisco: probabilità di **riflessione** dell'onda $R = |B|^2/|A|^2 = f_1(E, L, U_0)$

Probabilità di **trasmissione** dell'onda $T = |F|^2/|A|^2 = f_2(E, L, U_0)$

Svolgendo i conti:

posto $\beta = \sin^2\left[\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}L\right]$ e $\gamma = 4\frac{E}{U_0}\left(\frac{E}{U_0}-1\right)$

Si ottiene: $R = \frac{\beta}{\beta+\gamma}$ e $T = \frac{\gamma}{\beta+\gamma}$ $(T+R=1)$



Nota bene: quando

$$\beta = \sin^2\left[\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}}{\hbar}L\right] = 0 \qquad R=0, T=1$$

Trasmissione risonante

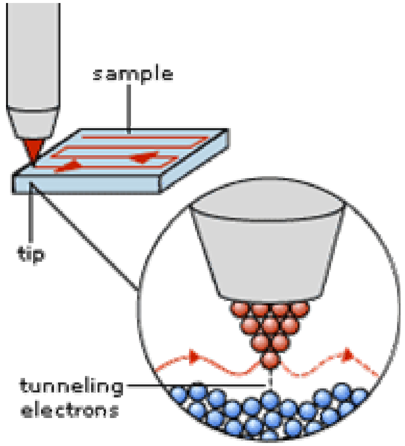
Effetto tunnel: microscopia ad effetto tunnel

L’effetto tunnel (T) di

dall’ampiezza della z   ıte

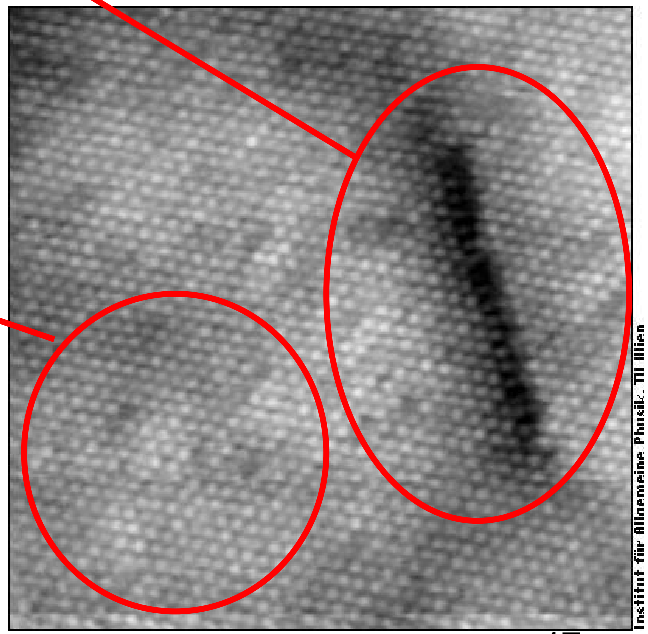
Questa sensibilità e’ s   ad
effetto tunnel.

Difetto nel reticolo



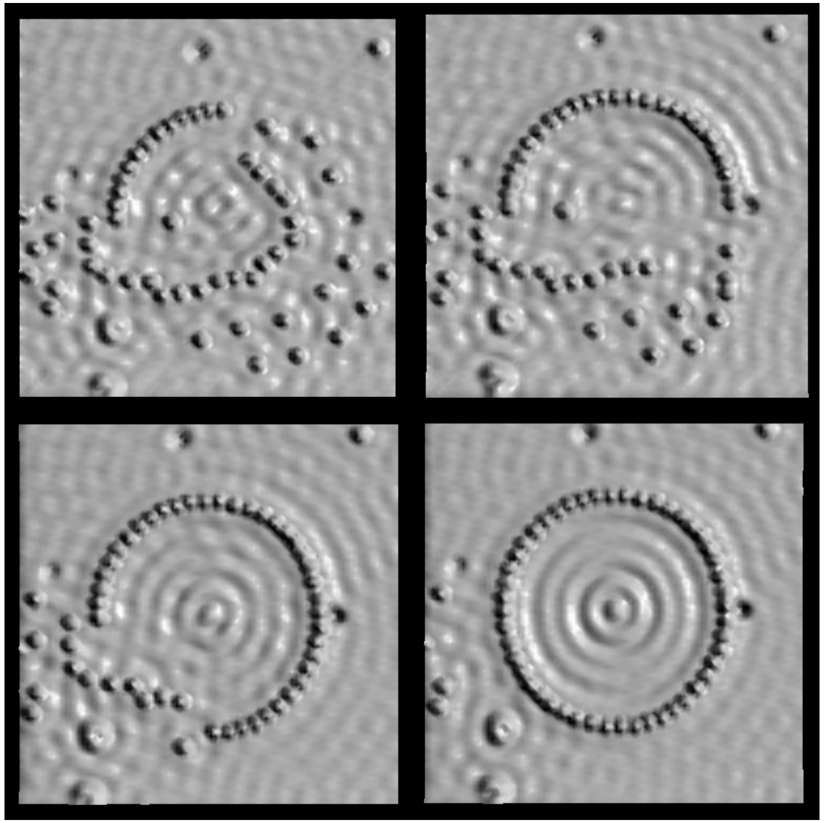
Ca   ıa punta
co   e
dis   .
Gl   o dalla
punta al campione per effetto tunnel.
L’intensità della corrente dipende dalla distanza atomo della punta-atomo del campione! Il moto della punta sulla faccia del campione permette la ricostruzione bidimensionale delle posizioni degli atomi.

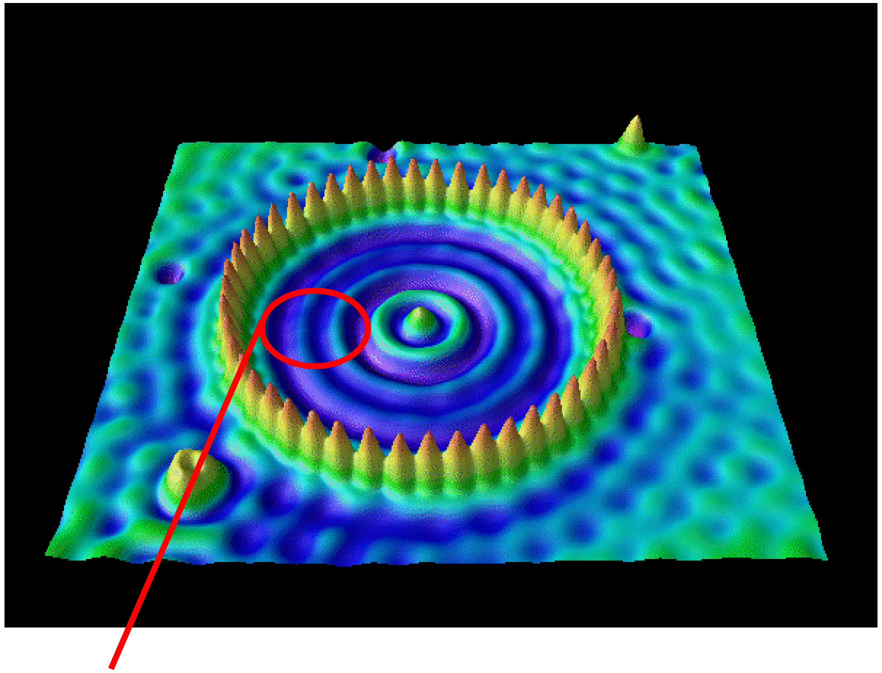
Reticolo atomico regolare



Microscopia ad effetto tunnel

Costruzione di immagini con singoli atomi (IBM Labs)!





Onde stazionarie di probabilità

Posizionamento di 48 atomi di Fe su un substrato di Cu a 4K

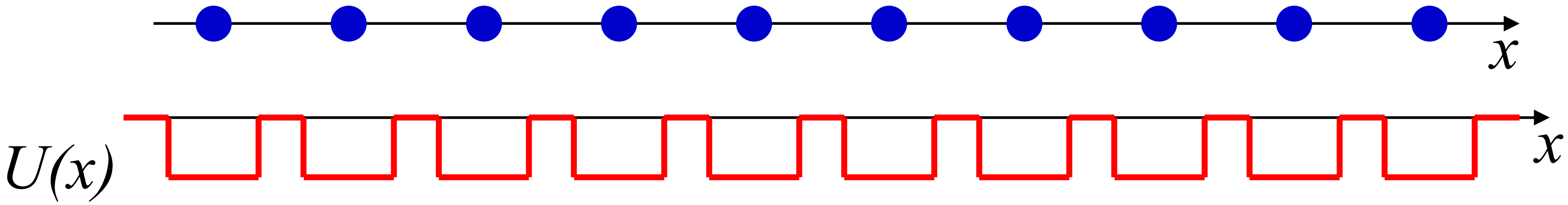
Esempi di effetto tunnel

L'effetto tunnel ha un ruolo in un numero notevole di situazioni tra cui:

- Decadimenti radiattivi dei nuclei
- Fusione nucleare
- Semiconduttori

Livelli energetici nei conduttori

Modellino di una fila di atomi di materiale conduttore:



U(x) è un potenziale periodico *U(x+a)=U(x)* sentito dagli *elettroni*.
Le $\psi(x)$ avranno la stessa periodicità: $\psi(x+a)= e^{i\theta}\psi(x)\approx e^{ikx}$

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

Gli stati degli elettroni saranno caratterizzati dalla comparsa di bande energetiche permesse e bande proibite (i dettagli dipendono dalla forma di *U(x)*)