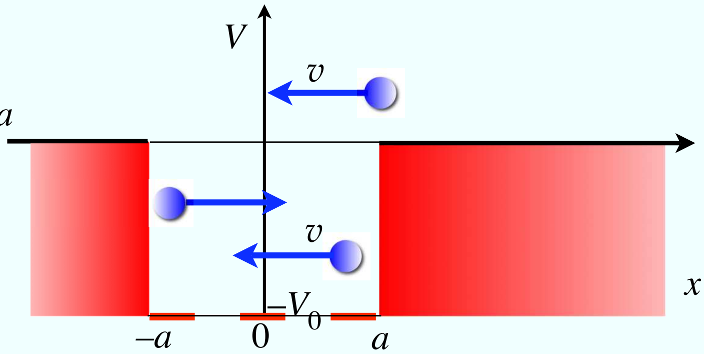
La buca di potenziale di altezza finita e altri problemi di trasmissione e riflessione

Buca di potenziale finita: caso classico

$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$



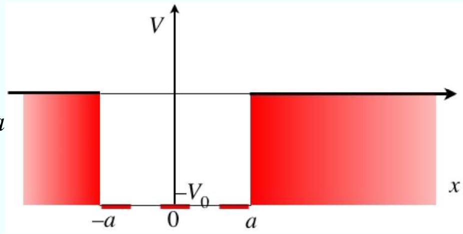
Classicamente:

– momento p qualunque (può avere qualunque velocità)
– posizione x
– energia totale pari a $E = p^2/2m - V_0$ (nella buca) o $E = p^2/2m$ (fuori dalla buca).

All'interno della buca:

– se $-V_0 < E < 0$: come nella buca infinita, particella confinata nella scatola.
– Se $E = -V_0$ la particella è *in quiete*.

La fdo



$$\cancel{\psi(x) = 0, \quad |x| \geq a}$$

Perché non è proibito trovare la particella fuori dalla buca ($\neq$buca infinita)

$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

Stati legati o *stati di diffusione*, a seconda del valore dell'energia E

$E > 0$: stati di diffusione;
$0 > E > -V_0$: stati legati.

Autofunzioni: risolvere (separatamente nelle varie regioni) l'equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo:

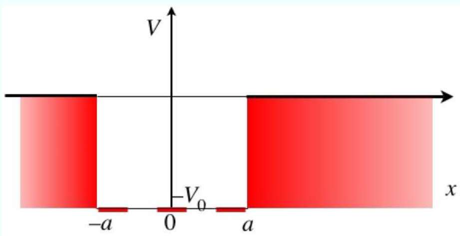
$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V\psi = E\psi$$

con le seguenti condizioni per le soluzioni:

1– ψ deve essere continua nei punti di discontinuità dell'energia potenziale; se non lo fosse, in quei punti la densità di probabilità sarebbe indeterminata.

2– $d\psi/dx$ deve essere continua nei punti di discontinuità dell'energia potenziale; se non lo fosse, avrei delle divergenze nell'eq. di Schr., nel termine: $-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2}$

Stati legati



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

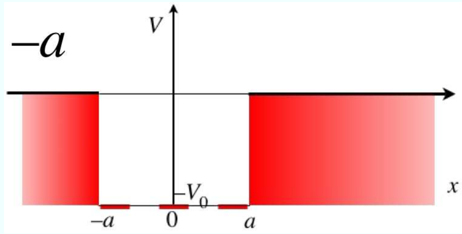
$V(x) = 0$ per $|x| > a$

stati legati: $0 > E > -V_0$

$x < -a$	$\lvert x\rvert < a$	$x > a$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$
$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi$	$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = -l^2\psi$	$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi$
$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$	$l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$	$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$

dove l, κ sono reali (verificare).

Stati legati: $x < -a$



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

stati legati: $0 > E > -V_0$

$\boxed{x < -a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

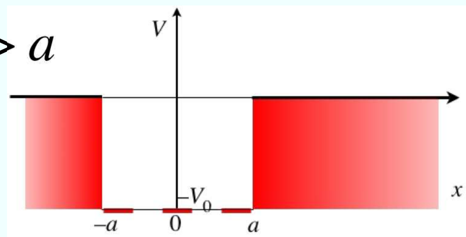
Soluzione generale (verificate):

$$\psi(x) = \cancel{A\mathrm{e}^{-\kappa x}} + B\mathrm{e}^{\kappa x}$$

diverge per $x \to -\infty$

$$\boxed{x < -a \ : \qquad \psi(x) = B\mathrm{e}^{\kappa x}}$$

Stati legati: $x > a$



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

stati legati: $0 > E > -V_0$

$\boxed{x > a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = \kappa^2\psi$$

$$\kappa = \frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}$$

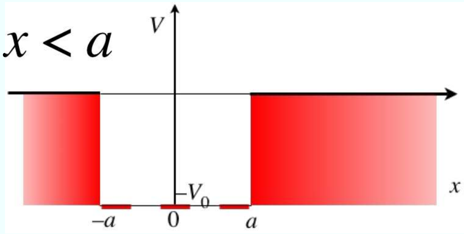
Soluzione generale (verificate):

$$\psi(x) = F\mathrm{e}^{-\kappa x} + \cancel{G\mathrm{e}^{\kappa x}}$$

diverge per $x \to +\infty$

$$\boxed{x > a \ : \qquad \psi(x) = F\mathrm{e}^{-\kappa x}}$$

Stati legati: $-a < x < a$



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

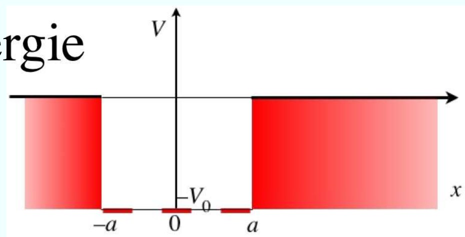
stati legati: $0 > E > -V_0$

$\boxed{|x| < a}$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi$
$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = -l^2\psi$
$l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$

Soluzione generale (verificate):

$$\boxed{\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx)}$$

Stati legati: spettro delle energie



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

stati legati: $0 > E > -V_0$

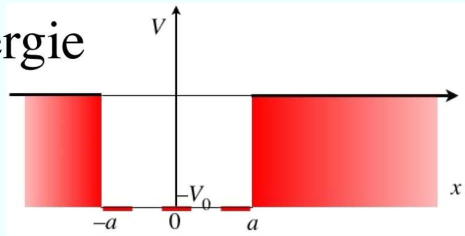
$x < -a$	$|x| < a$	$x > a$
$\psi(x) = Be^{\kappa x}$	$\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx)$	$\psi(x) = Fe^{-\kappa x}$
$\frac{d\psi}{dx} = \kappa Be^{\kappa x}$	$\frac{d\psi}{dx} = lC\cos(lx) - lD\sin(lx)$	$\frac{d\psi}{dx} = -\kappa Fe^{-\kappa x}$

Uguagliando in $-a$ e in a le funzioni trovate e le loro derivate, ottengo equazioni trascendenti fra i coefficienti l e κ.

$\kappa = l\tan(la)$ per corrispondenti autofunzioni *pari* (C=0)

$\kappa = -l\cot(la)$ per corrispondenti autofunzioni *dispari* (D=0)

Stati legati: spettro delle energie



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

stati legati: $0 > E > -V_0$

$\kappa = l \tan(la)$ per corrispondenti autofunzioni *pari* (C=0)

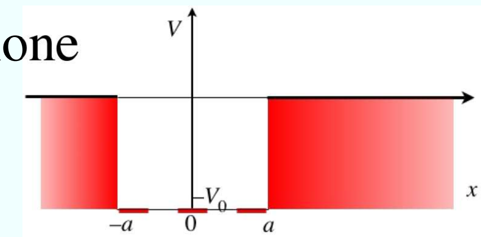
$\kappa = -l \cot(la)$ per corrispondenti autofunzioni *dispari* (D=0)

Si trova che, *indipendentemente dalla larghezza e dalla profondità della buca*, esiste sempre uno stato legato (ed è pari)

Si noti che le autofunzioni (e quindi la densità di probabilità) si estendono *fuori* dai confini della buca: classicamente è inspiegabile. Questo effetto è particolarmente evidente per energie prossime alla cima della buca (verificate con i simulatori).

Simulazioni:
http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/ Sez. 2.3 (Sez. 2.4 nella versione CD)
http://www.falstad.com/qm1d/

Stati di diffusione



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

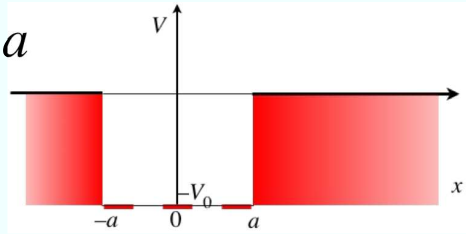
stati di diffusione: $E > 0$

$x < -a$	$\|x\| < a$	$x > a$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$
$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$	$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = -l^2\psi$	$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$
$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$	$l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$	$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$

dove l, k sono reali (verificare).

Attenzione: $E > 0$

Stati di diffusione: $-a < x < a$



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

$E > 0$

$\boxed{|x| < a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = -l^2\psi$$

$$l = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$$

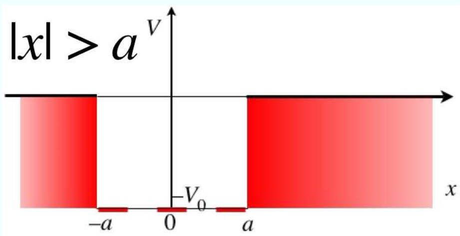
Soluzione generale (verificate):

$$\boxed{\psi(x) = C\sin(lx) + D\cos(lx)}$$

dentro la buca:
esattamente come per gli stati legati

Enrico Silva - diritti riservati - Non è permessa, fra l'altro, l'inclusione anche parziale in altre opere senza il consenso scritto dell'autore

Stati di diffusione: $|x| > a$



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

$V(x) = 0$ per $|x| > a$

$E > 0$

$\boxed{|x| > a}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$$

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k^2\psi$$

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

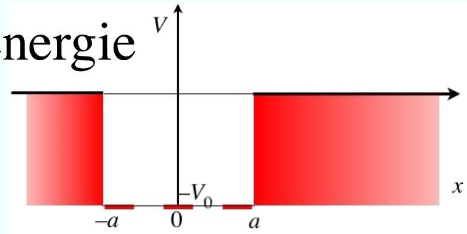
Soluzione generale (verificate):

$x < -a$ $\qquad \psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$

$x > a$ $\qquad \psi(x) = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$

avendo supposto che, nella regione
più a destra, non vi sia una
particella proveniente da $+\infty$.

Stati di diffusione: spettro delle energie



$V(x) = -V_0$ per $a > x > -a$

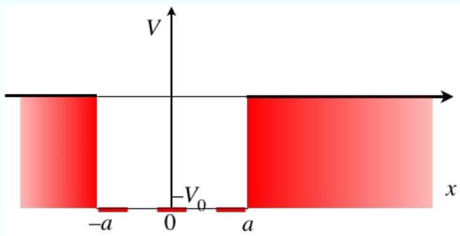
$V(x) = 0$ per $|x| > a$

$E > 0$

Uguagliando ora in $-a$ e in a le funzioni trovate e le loro derivate, ottengo delle equazioni che impongono delle relazioni fra i coefficienti *A, B, C, D, F*.

Non trovo limitazioni sulle energie: *spettro continuo,* analogamente alla particella libera.

Trasmissione e riflessione



$E > 0$

Una particella incidente sulla buca (da sinistra) con $E > 0$ può essere *trasmessa* (e questo è il solo possibile risultato classico), ma può anche essere *riflessa*.

Ricordando: $\psi(x) = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}$ $\qquad x < -a$

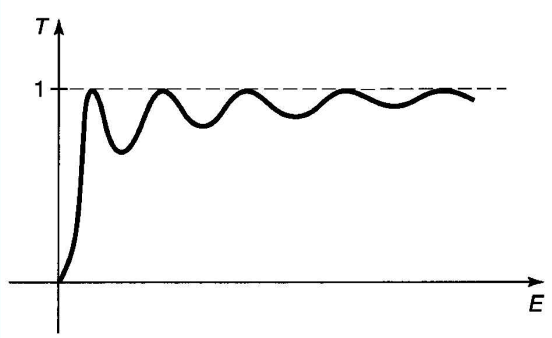
$\psi(x) = F\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$ $\qquad x > a$

si può calcolare il *coefficiente di trasmissione:* $|T| = \dfrac{|F|^2}{|A|^2}$

e il *coefficiente di riflessione:* $|R| = 1 - |T|$

Trasmissione e riflessione

Coefficiente di trasmissione



$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{V_0^2}{4E(E+V_0)} \sin^2\left(\frac{2a}{\hbar}\sqrt{2m(E+V_0)}\right)$$

Si ha T=1 (buca trasparente) per (...)=$n\pi$, ovvero: $E_n + V_0 = \dfrac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m(2a)^2}$

nota: corrispondono alle energie della buca infinita

Nota: quando la buca è molto profonda T-> 0.
La particella viene riflessa da una buca profonda!!!

Simulazioni: http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~feindt/schrodinger/example4.htm

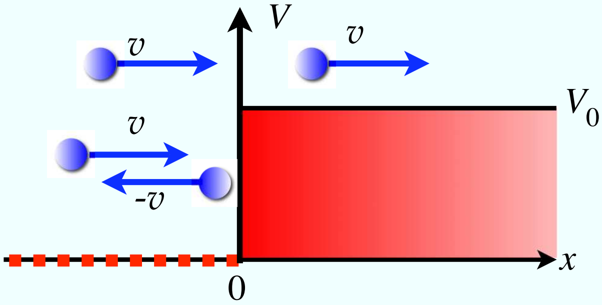
(Höhe: altezza; Wellenlänge: lunghezza d'onda; Schärfe: acutezza; Breite: larghezza)

Il gradino di potenziale

Gradino di potenziale positivo: caso classico

$V(x) = V_0$ per $x > 0$

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

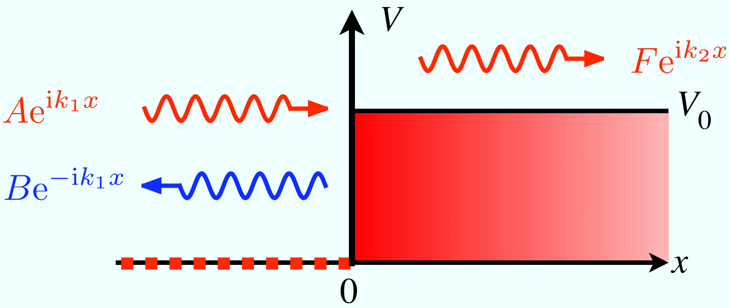


Classicamente:
la particella è dotata di momento p qualunque (può avere qualunque velocità) e posizione x, ha energia totale pari a $E = p^2/2m$.
Se $E > V_0$, la particella procede nella zona $x > 0$.
Se $E < V_0$, la particella viene riflessa indietro.

Gradino positivo di potenziale

$V(x) = V_0$ per $x > 0$

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



Quantisticamente: ragioniamo sulla fdo.

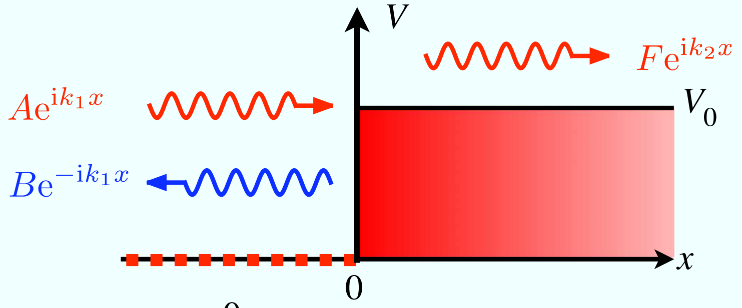
Similmente alla buca di potenziale finita, consideriamo stati di diffusione a sinistra (particella incidente e riflessa) e a destra (trasmissione).

Supponendo di inviare numerose particelle, possiamo disinteressarci dell'evoluzione temporale e considerare gli stati stazionari (anche se non fisici, si potrà comunque costruire un flusso di particelle con essi)

Gradino positivo

$V(x) = V_0$ per $x > 0$

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



$x < 0$	$x > 0$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} + V_0\psi = E\psi$
$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k_1^2\psi$	$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\psi = -k_2^2\psi$
$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$	$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$

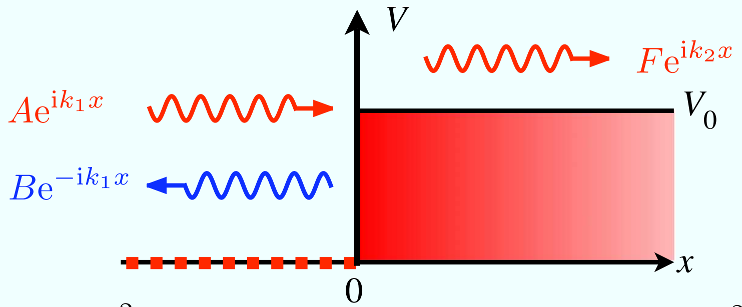
Condizioni al contorno:
1– ψ continua in 0.
2– $d\psi/dx$ continua in 0.

Notare: $k_2 \neq k_1$, la lunghezza d'onda varia. Controllate con il simulatore.

http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/ Sez. 2.2
(Sez. 2.3 per la versione CD)

Trasmissione e riflessione

Usando le condizioni al contorno, si ha per la frazione delle particelle incidenti che viene:



riflessa: $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left|\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right|^2$ trasmessa: $T = 1 - R = \frac{k_2|F|^2}{k_1|A|^2}$

Note:

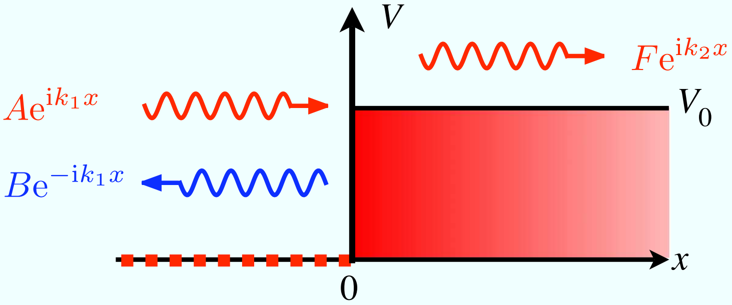
1] $T \neq |F|^2/|A|^2$: questo sarebbe la trasmissione delle densità di probabilità, mentre noi dobbiamo imporre che sia $R+T = 1$ per la *corrente* di probabilità: nella regione "2" la velocità è differente dalla regione "1", in particolare $k_2/k_1 = v_2/v_1$.

2] se $E<V_0$, k_2 è immaginario puro, e $R = 1$. Ciò non vuol dire che $|\psi(x)|^2$ sia nulla per $x>0$: esiste una densità di probabilità non nulla per $x>0$, ma che decresce esponenzialmente. Controllate con i simulatori.

Trasmissione e riflessione

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

$$T = 1 - R = \frac{k_2|F|^2}{k_1|A|^2}$$



Nota: $T \neq |F|^2/|A|^2$: questo sarebbe la trasmissione delle densità di probabilità, mentre noi dobbiamo imporre che sia $R+T = 1$ per la *corrente* di probabilità: nella regione "2" la velocità è differente dalla regione "1", in particolare $k_2/k_1 = v_2/v_1$.

Analogia 1: corrente elettrica, in cui ho la conservazione di $j = \rho_V v$, non ρ_V.

Analogia 2: propagazione di un'onda fra due tratti di corda tesa con differenti masse per unità di lunghezza (e quindi velocità di propagazione differenti)

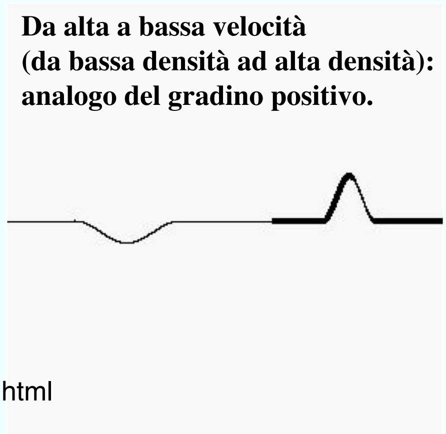
Riflessione e trasmissione per un pacchetto d'onde incidente su un potenziale a gradino:

http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/ Sez. 1.5
(Sez. 1.4 versione CD)

http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~feindt/schrodinger/example4.htm

http://www-classic.uni-graz.at/imawww/vqm/pages/samples/107_06b.html

Analogia: riflessione da una discontinuità di densità su una corda tesa



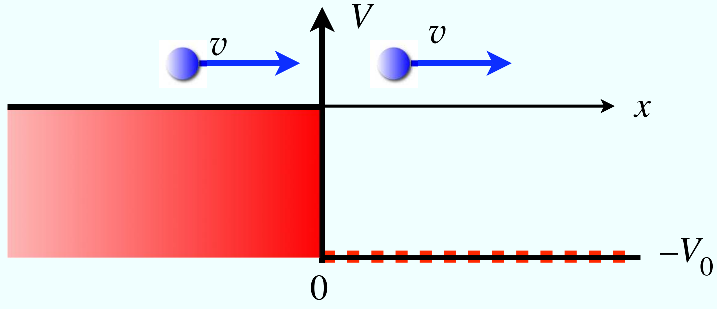
Animation courtesy of Dr. Dan Russell, Kettering University

http://www.kettering.edu/~drussell/Demos/reflect/reflect.html

Gradino di potenziale negativo: caso classico

$V(x) = -V_0$ per $x > 0$

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



Classicamente:

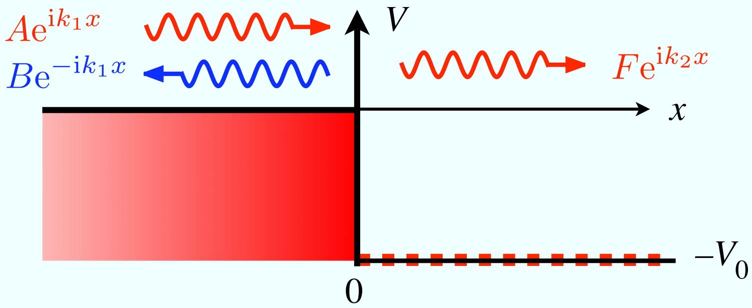
la particella è dotata di momento p qualunque (può avere qualunque velocità) e posizione x, ha energia totale pari a $E = p^2/2m$.

Se $E > 0$, la particella procede comunque nella zona $x > 0$.

Gradino negativo di potenziale

$V(x) = -V_0$ per $x > 0$

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



Quantisticamente: ragioniamo sulla fdo.

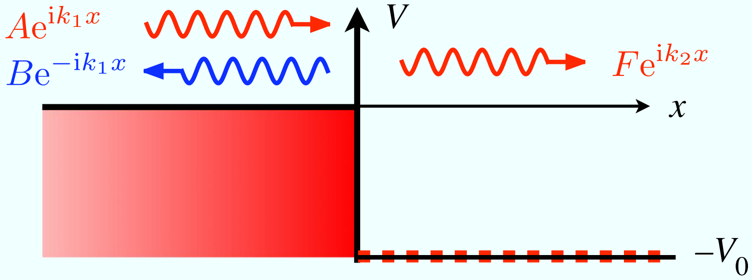
Similmente alla buca di potenziale finita, consideriamo stati di diffusione a sinistra (particella incidente e riflessa) e a destra (trasmissione).

Supponendo di inviare numerose particelle, possiamo disinteressarci dell'evoluzione temporale e considerare gli stati stazionari (anche se non fisici, si potrà comunque costruire un flusso di particelle con essi)

Gradino negativo

$V(x) = -V_0$ per $x > 0$

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



$x < 0$	$x > 0$
$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi$	$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} - V_0\psi = E\psi$
$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi = -k_1^2\psi$	$\frac{d^2\psi}{dx^2} = -\frac{2m(E+V_0)}{\hbar^2}\psi = -k_2^2\psi$
$k_1 = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$	$k_2 = \frac{\sqrt{2m(E+V_0)}}{\hbar}$

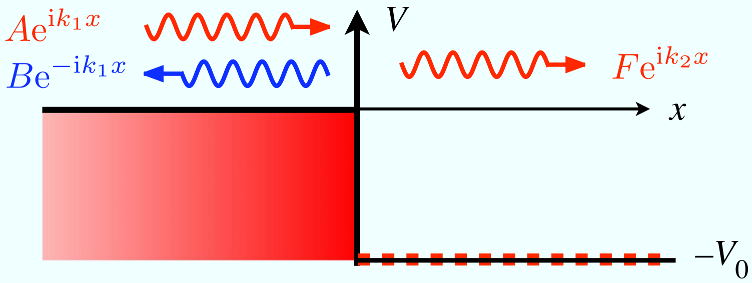
Condizioni al contorno:
1– ψ continua in 0.
2– $d\psi/dx$ continua in 0.

Notare: $k_2 \neq k_1$, la lunghezza d'onda varia. Controllate con il simulatore.

http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/ Sez. 2.2

Trasmissione e riflessione

Usando le condizioni al contorno, si ha per la frazione delle particelle incidenti che viene:



riflessa: $R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2}\right)^2$ trasmessa: $T = 1 - R = \frac{k_2|F|^2}{k_1|A|^2}$

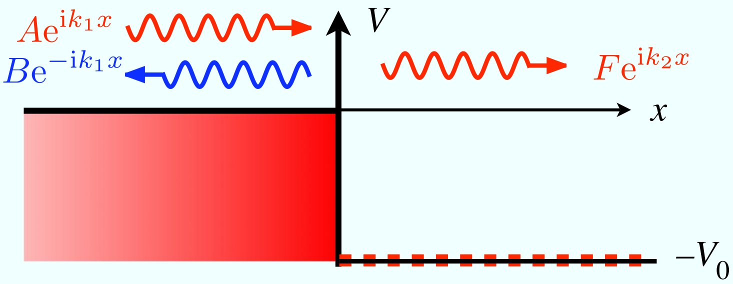
Ho "particelle riflesse" anche per $E > V_0$

Nota: $T \neq |F|^2/|A|^2$: questo sarebbe la trasmissione delle densità di probabilità, mentre noi dobbiamo imporre che sia $R+T = 1$ per la *corrente* di probabilità: nella regione "2" la velocità è differente dalla regione "1", in particolare $k_2/k_1 = v_2/v_1$.

Trasmissione e riflessione

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

$$T = 1 - R = \frac{k_2|F|^2}{k_1|A|^2}$$



Nota: $T \neq |F|^2/|A|^2$: questo sarebbe la trasmissione delle densità di probabilità, mentre noi dobbiamo imporre che sia $R+T = 1$ per la *corrente* di probabilità: nella regione "2" la velocità è differente dalla regione "1", in particolare $k_2/k_1 = v_2/v_1$.

Analogia 1: corrente elettrica, in cui ho la conservazione di $j = \rho_V v$, non ρ_V.

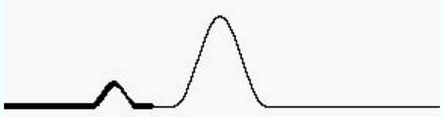
Analogia 2: propagazione di un'onda fra due tratti di corda tesa con differenti masse per unità di lunghezza (e quindi velocità di propagazione differenti)

Riflessione e trasmissione per un pacchetto d'onde incidente su un potenziale a gradino negativo:

http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~feindt/schrodinger/example4.htm

Analogia: riflessione da una discontinuità di densità su una corda tesa

Da bassa ad alta velocità (da alta densità a bassa densità): analogo di un gradino negativo



Animation courtesy of Dr. Dan Russell, Kettering University

http://www.kettering.edu/~drussell/Demos/reflect/reflect.html