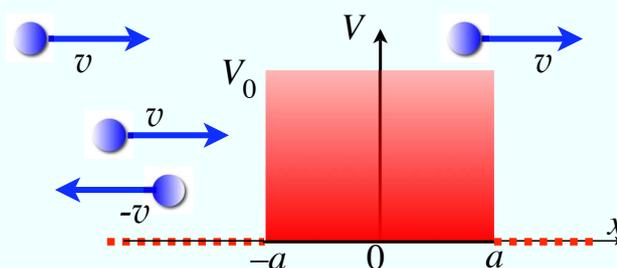


# La barriera di potenziale: effetto tunnel

1

## Barriera di potenziale: caso classico

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$
$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a$$

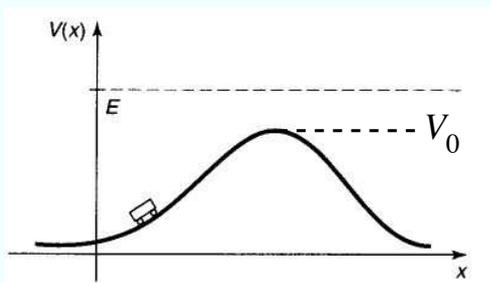


### *Classicamente:*

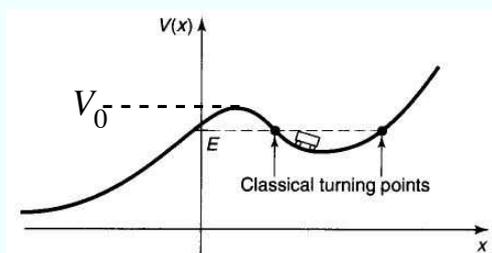
- momento  $p$  qualunque (può avere qualunque velocità)
- posizione  $x$
- energia totale pari a  $E = p^2/2m$ .
  
- se  $E > V_0$ , la particella supera la barriera.
- Se  $E < V_0$ , la particella rimbalza indietro.

2

## Barriera di potenziale: caso classico



Se  $E > V_0$ , la particella supera la barriera;  
 Se  $E < V_0$  la particella rimbalza indietro.



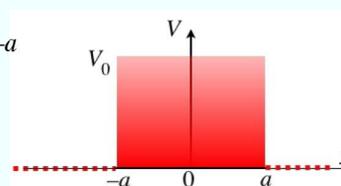
Se  $E > V_0$ , la particella supera la barriera: stato di diffusione (nel caso particolare, va a  $-\infty$ );  
 Se  $E < V_0$  la particella resta nella buca: stato legato.

Figure da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

## Barriera: la fdo

~~$\psi(x) = 0, |x| < a$~~   
 Non è proibito trovare la particella nella barriera (zona classicamente proibita)

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



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:

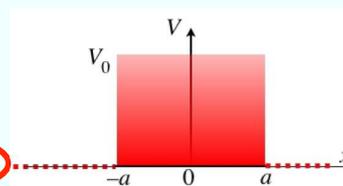
1-  $\psi$  deve essere continua nei punti di discontinuità dell'energia potenziale; se non lo fosse, in quei punti la densità di probabilità sarebbe indeterminata.

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 di riflessione classica

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$

$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a$$



$$E < V_0$$

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

dove  $k, \kappa$  sono reali (verificare).

Attenzione:  $E < V_0$

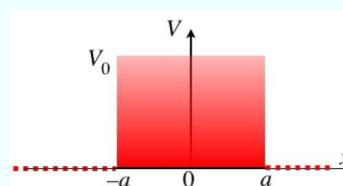
5

## Regione classicamente proibita: $-a < x < a$

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$

$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a$$

$$E < V_0$$



$$|x| < a$$

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

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

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

Soluzione generale dentro la barriera (verificate):

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

N.B.: Queste soluzioni, sebbene date da esponenziali reali, *non* sono proibite perché definite solo per  $|x| < a$ . La fdo complessiva è quindi ancora normalizzabile.

6

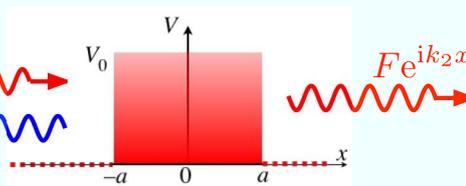
## Regione di propagazione: $|x| > a$

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$

$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a \quad E < V_0$$

$$Ae^{ik_1x}$$

$$Be^{-ik_1x}$$



$$|x| > a$$

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

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

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

Soluzione generale (verificate):

$$x < -a \quad \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$x > a \quad \psi(x) = Fe^{ikx}$$

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

Nota: come per la particella libera, non sono soluzioni normalizzabili. Per aggirare il problema, si considerano le probabilità *relative* di trasmissione e riflessione:

$$|T| = \frac{|F|^2}{|A|^2} \quad |R| = \frac{|B|^2}{|A|^2} = 1 - |T|$$

7

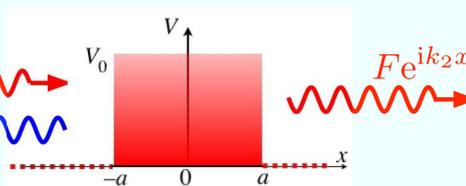
## Calcolo della fdo (schema)

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$

$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a \quad E < V_0$$

$$Ae^{ik_1x}$$

$$Be^{-ik_1x}$$



$$x < -a$$

$$|x| < a$$

$$x > a$$

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

$$\psi(x) = Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}$$

$$\psi(x) = Fe^{ikx}$$

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ikAe^{ikx} - ikBe^{-ikx}$$

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = \kappa Ce^{\kappa x} - \kappa De^{-\kappa x}$$

$$\frac{d\psi(x)}{dx} = ikFe^{ikx}$$

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

imponendo la continuità della fdo e della derivata in  $a$  e  $-a$ , ottengo  $A, B, C, D, F$  come funzioni di  $k, \kappa$  e  $a$ .

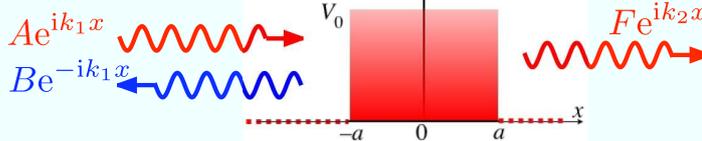
8

## Trasmissione e riflessione

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$

$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a$$

$$E < V_0$$



Una particella incidente sulla barriera (da sinistra) con  $E < V_0$  può essere *riflessa* (e questo è il solo possibile risultato classico), ma può anche essere *trasmessa*.

Usando: [http://www.westga.edu/~jhasbun/osp/Potential\\_Barrier.htm](http://www.westga.edu/~jhasbun/osp/Potential_Barrier.htm)

si noti:

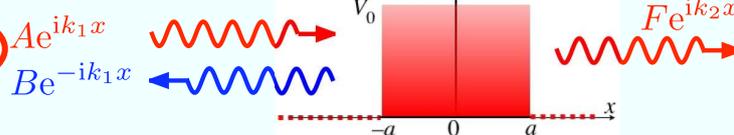
- 1- per energie  $E \gtrsim V_0$  si hanno picchi intensi in corrispondenza della barriera
- 2- la riflessione parziale sulla barriera dà luogo a onde stazionarie per  $x < -a$  (si faccia caso alla densità di probabilità a sinistra e a destra della barriera, non alla funzione d'onda)

## Trasmissione e riflessione

$$V(x) = V_0 \text{ per } a > x > -a$$

$$V(x) = 0 \text{ per } |x| > a$$

$$E < V_0$$



Una particella incidente sulla barriera (da sinistra) con  $E < V_0$  può essere *riflessa* (e questo è il solo possibile risultato classico), ma può anche essere *trasmessa*.

Ricordando:  $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad x < -a$

$$\psi(x) = Fe^{ikx} \quad x > a$$

con le espressioni esplicite di  $A$ ,  $B$ ,  $F$

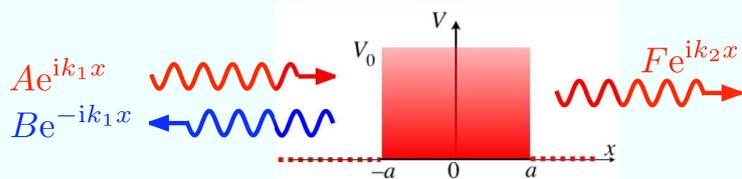
si può calcolare il *coefficiente di trasmissione*:  $|T| = \frac{|F|^2}{|A|^2}$

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

## Trasmissione e riflessione

Si ottiene:

$E < V_0$



$Ae^{ik_1x}$  (red wave moving right)  
 $Be^{-ik_1x}$  (blue wave moving left)  
 $Fe^{ik_2x}$  (red wave moving right)

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

per barriera sufficientemente  
spessa, ovvero  $\kappa a > 1$ :

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

con

$$\kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$$

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

e nello stesso limite:

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

La trasmissione è una funzione (circa) *esponenziale* dello spessore della barriera

### Simulazioni:

Riflessione e trasmissione di un pacchetto d'onde da una barriera:

<http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/> Sez. 1.5

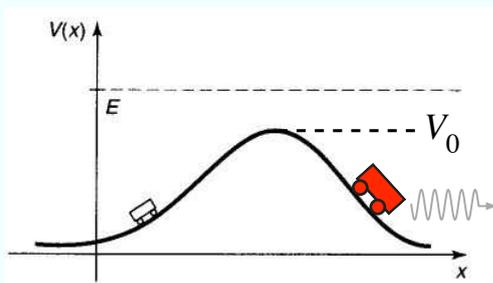
<http://www-ekp.physik.uni-karlsruhe.de/~feindt/schrodinger/example4.htm>  
(Höhe: altezza; Wellenlänge: lunghezza d'onda; Schärfe: acutezza; Breite: larghezza)

Si noti l'interferenza fra pacchetto incidente e riflesso,  
a sinistra della barriera.

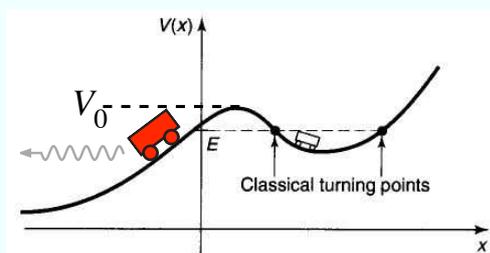
Riflessione e trasmissione per una situazione stazionaria (flusso continuo di  
particelle provenienti da sinistra):

[http://www.westga.edu/~jhasbun/osp/Potential\\_Barrier.htm](http://www.westga.edu/~jhasbun/osp/Potential_Barrier.htm)

## Differenze dal caso classico



Se  $E > V_0$ , la particella ha probabilità finita di essere riflessa dalla barriera;  
Se  $E < V_0$  la particella ha probabilità finita di proseguire nella direzione delle  $x$  positive.



Se  $E < V_0$  la particella ha probabilità finita di proseguire nella direzione delle  $x$  positive: non è uno stato legato.

Figure da Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics

## Il microscopio a scansione a effetto tunnel

# STM: Scanning Tunneling Microscope

Inventato nel 1981 da Binnig e Rohrer  
(IBM Zurigo), Nobel 1986

Il principio: una punta metallica scandisce una superficie, in *estrema* prossimità di essa. Fra la punta e la superficie esiste una differenza di potenziale.

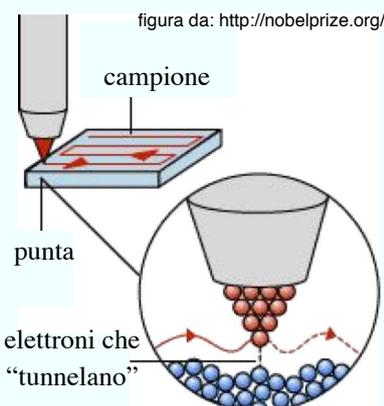
Richiamo: fra la punta e il materiale sotto studio esiste quindi una barriera di potenziale (tipicamente, il vuoto), per cui il coefficiente di trasmissione è:

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

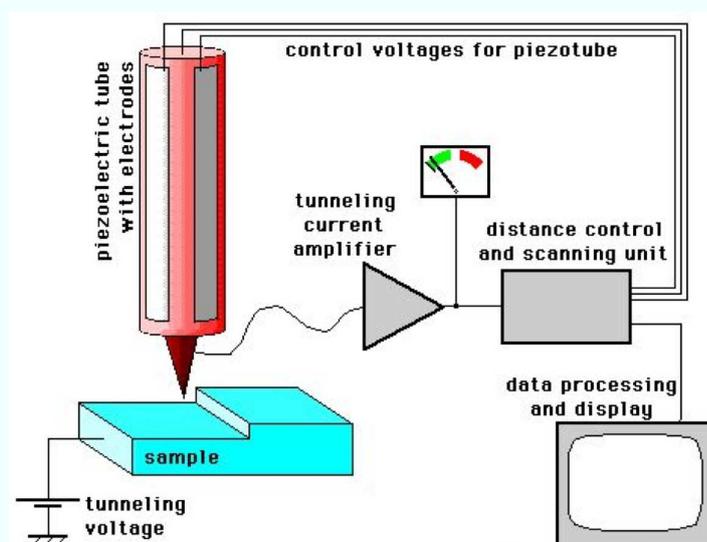
Per effetto tunnel elettroni possono fluire fra i due oggetti, dando luogo a una corrente *molto sensibile* alla distanza fra punta e superficie.

La punta è molto acuta (dimensioni ~1 atomo).

L'effetto tunnel è a raggio *molto breve* (dipendenza esponenziale con lo spessore della barriera), per cui la corrente di tunnel è molto sensibile alla distanza fra punta e campione. È possibile quindi determinare la morfologia della superficie con estrema accuratezza.



## STM



gif animata da:

**How an STM works ...**

© Michael Schmid  
Institut f. Allgemeine Physik  
TU Wien 1997-2002

[http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/STM\\_Gallery/stm\\_schematic.html](http://www.iap.tuwien.ac.at/www/surface/STM_Gallery/stm_schematic.html)

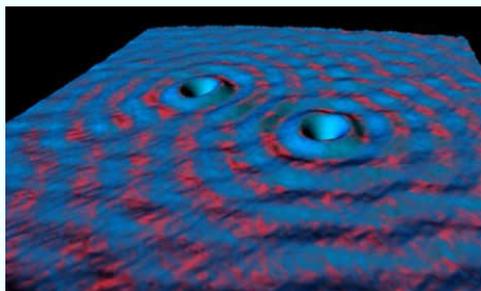
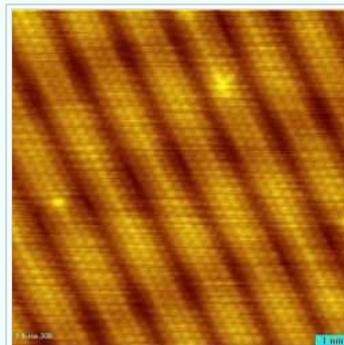
Un gioco (simulatore di STM): <http://www.quantum-physics.polytechnique.fr/>

Sez. 1.6

## STM imaging

Il microscopio tunnel può ottenere immagini sulla scala di  $2 \text{ \AA}$  (scala atomica).

Immagine della superficie (100) di oro. Lo stress superficiale (meccanico e chimico) induce la cosiddetta *ricostruzione*, ovvero una disposizione atomica differente da quella all'interno del campione. (immagine da wikipedia)



Atomi di S su superficie di Cu, e corrispondenti onde stazionarie degli elettroni. (immagine Stanford University)

La scansione è fortemente influenzata, oltre che dalla distanza punta-campione, anche dalla *densità elettronica* del campione. È possibile quindi ottenere delle immagini delle onde superficiali di carica (densità di probabilità): vedi quantum corrals. Ciò è possibile quando si tratta di onde *stazionarie*.