

Elettronica dello Stato Solido

Lezione 6: Potenziali mono-dimensionali non confinati



Daniele Ielmini

DEIB – Politecnico di Milano

daniele.ielmini@polimi.it

Outline

- La particella libera
- Gradino di potenziale
- Barriera di potenziale
- Tunneling
- Stati non stazionari
- Conclusioni

Equazione di Schrödinger

- Tempo dipendente:
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} + \mathbf{V}_0 \right) \Psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t}$$

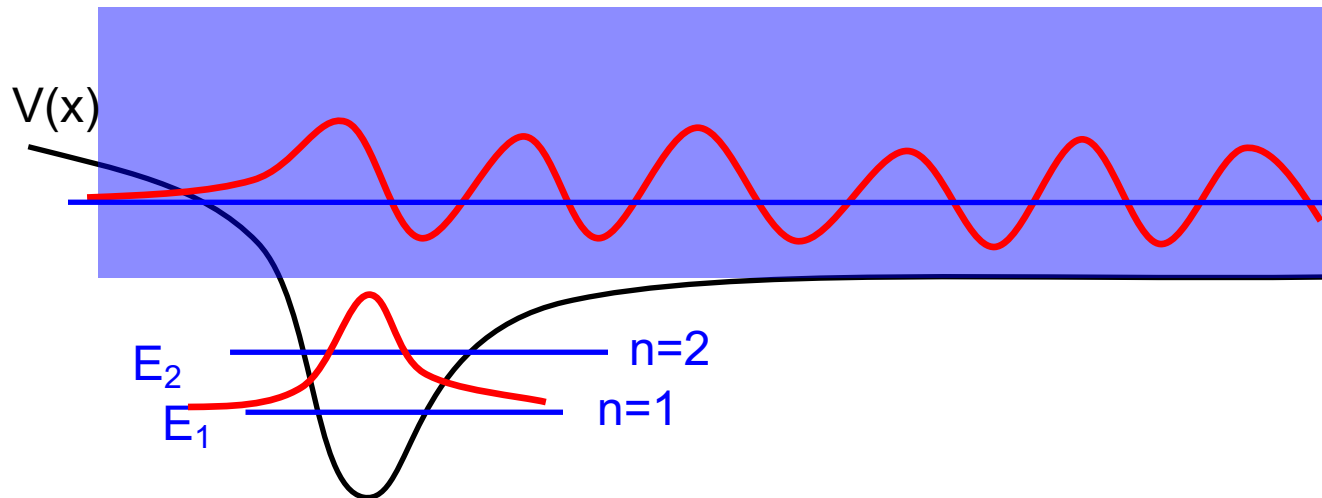
- Tempo-indipendente:
$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{d\mathbf{x}^2} + \mathbf{V}(\mathbf{x}) \right) \psi(\mathbf{x}) = \mathbf{E} \psi(\mathbf{x})$$

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) \varphi(t) = \psi(\mathbf{x}) \varphi(0) e^{-i \frac{E}{\hbar} t}$$

- Funzione $\Psi(\mathbf{x}, t)$ = funzione d'onda
- Funzione $\psi(\mathbf{x})$ = autofunzione (eigenfunction, dal tedesco eigen = caratteristico)

Autofunzioni confinate e non confinate

- Stati confinati $\rightarrow$ set discreto di autovalori e autofunzioni
- Stati non confinati $\rightarrow$ set continuo di autovalori/autofunzioni
- In questi casi l'energia è un dato noto (e.g. potenziale di accelerazione di un elettrone)



La particella libera

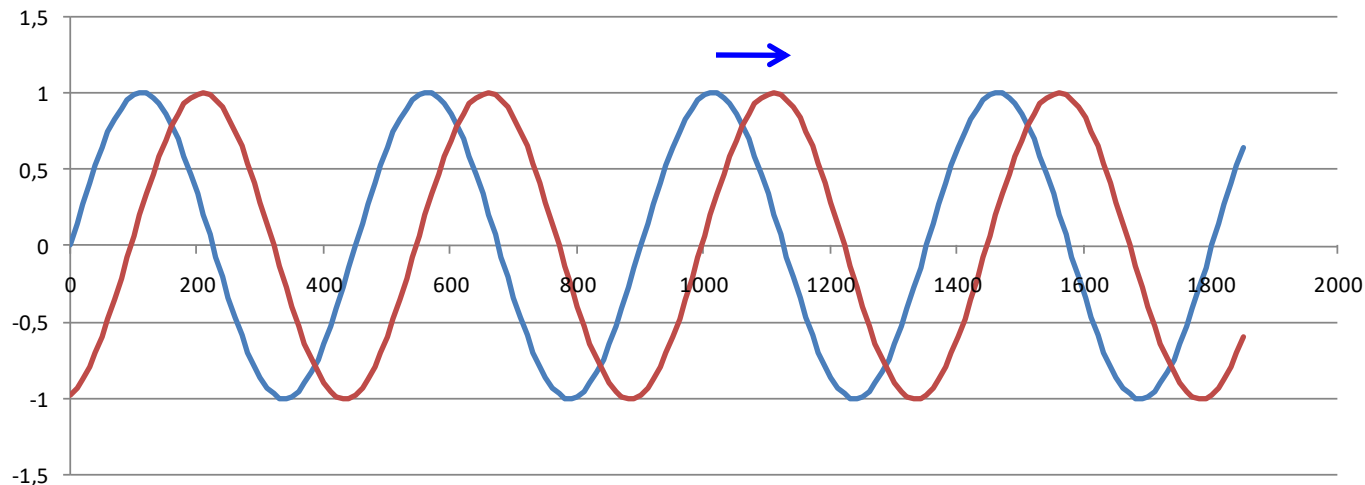
- $V = \text{const} \rightarrow$ non ci sono forze agenti sulla particella, classicamente si prevede velocità = costante ed energia cinetica = costante
- Dato che il potenziale V è definito a meno di una costante, scegliamo $V = 0$
- Equazione:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{x}^2} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x})$$
- Per ogni autovalore $E > 0$, l'autofunzione (soluzione generale) è: $\psi(\mathbf{x}) = A e^{ikx} + B e^{-ikx}$
- Dove $k = (2mE)^{1/2}/\hbar$

Onda viaggiante

- Prendiamo ad esempio la componente Ae^{ikx} , la funzione d'onda si ottiene come:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})e^{-i\omega t} = \mathbf{A}e^{i(kx - \omega t)}$$

- Questa è un'onda viaggiante verso gli x crescenti, infatti la parte reale è data da $\text{Acos}(kx - \omega t)$, dove i picchi si spostano con legge $kx - \omega t = 2n\pi$, cioè $x = x_0 + \omega t/k = x_0 + v_f t$



Valore d'aspettazione di p_x

- Per convincerci del moto della particella, calcoliamo $\langle p_x \rangle$:
$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \hat{p}_x \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x}$$
- con
$$\hat{p}_x \Psi(\mathbf{x}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar k \Psi(\mathbf{x}, t)$$
- e quindi:
$$\langle p_x \rangle = \hbar k \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \Psi(\mathbf{x}, t) d\mathbf{x} = \hbar k = \sqrt{2mE}$$

cioè il momento atteso classicamente per una particella con energia cinetica E . (Nota che l'integrale della densità di probabilità $|\Psi(\mathbf{x}, t)|^2$, cioè la probabilità di trovare la particella nello spazio, deve essere uguale a uno)

Onda verso x decrescenti

- Invece la componente Be^{-ikx} , che dà funzione d'onda:
$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) = \psi(\mathbf{x})e^{-i\omega t} = \mathbf{B}e^{i(-kx - \omega t)}$$
si sposta verso sinistra

- In questo caso il momento è dato da:

$$\langle p_x \rangle = -\hbar k \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\mathbf{x}, \mathbf{t}) \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t}) d\mathbf{x} = -\hbar k = -\sqrt{2mE}$$

- In entrambi i casi (onda verso dx e sx) il momento è perfettamente determinato, senza incertezza, dato che $p=(2mE)^{1/2}$ ed $E =$ costante nota $\rightarrow$ determinazione completa del momento, è compatibile con il principio di Heisenberg?

Indeterminazione spaziale

- Che forma assume la densità di probabilità per le due onde viaggianti?

$$\Psi^*(\mathbf{x}, t)\Psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A}^* e^{-i(kx - \omega t)} \mathbf{A} e^{i(kx - \omega t)} = \mathbf{A}^* \mathbf{A} = |\mathbf{A}|^2$$

- Costante: la particella è equiprobabilmente delocalizzata sull'intero asse x
- Compatibile con il principio di indeterminazione: $\Delta p = 0$, $\Delta x = \infty$
- Problema: normalizzazione, essendo $\int_{-\infty}^{+\infty} |\mathbf{A}|^2 d\mathbf{x} = \infty$
mentre vorremmo che sia unitario. In realtà non è necessario normalizzare perché tutte le grandezze interessanti (e.g. p , E) risultano indipendenti da A

Flusso di probabilità

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\Psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \Psi(\mathbf{x}, t) - \Psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \Psi^*(\mathbf{x}, t) \right)$$

- Onda verso x crescenti: $\Psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{A} e^{i(kx - \omega t)}$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(\mathbf{A}^* e^{-i(kx - \omega t)} i k \mathbf{A} e^{i(kx - \omega t)} + \mathbf{A} e^{i(kx - \omega t)} i k \mathbf{A}^* e^{-i(kx - \omega t)} \right) = \frac{\hbar \mathbf{k}}{m} |\mathbf{A}|^2$$

- Onda verso x decrescenti: $\Psi(\mathbf{x}, t) = \mathbf{B} e^{-i(kx + \omega t)}$

$$\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2mi} \left(-\mathbf{B}^* e^{i(kx + \omega t)} i k \mathbf{B} e^{-i(kx + \omega t)} - \mathbf{B} e^{-i(kx + \omega t)} i k \mathbf{B}^* e^{i(kx + \omega t)} \right) = -\frac{\hbar \mathbf{k}}{m} |\mathbf{B}|^2$$

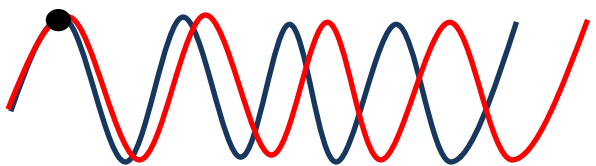
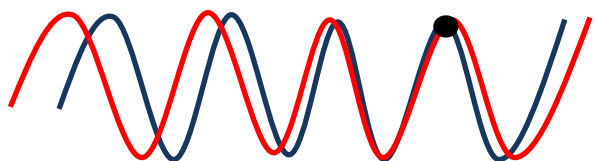
- Prefattore = p_x/m = velocità di *gruppo*

Velocità di fase e di gruppo

- Velocità di fase dell'onda: $\Psi(\mathbf{x}, t) = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)}$

$$\mathbf{v}_f = \frac{\omega}{\mathbf{k}} = \frac{\mathbf{E}}{\hbar \mathbf{k}} = \frac{\hbar \mathbf{k}}{2m}$$

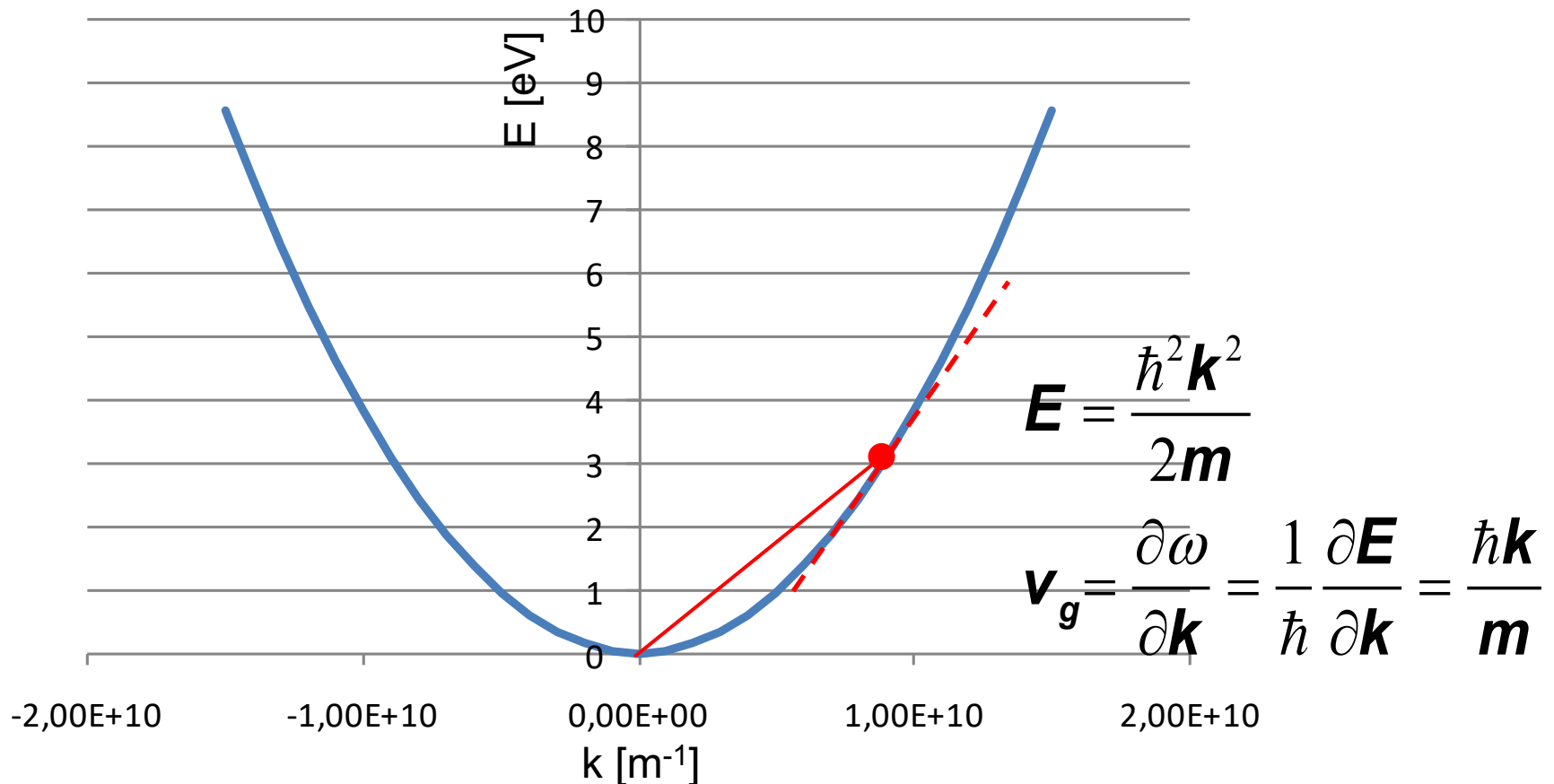
- Velocità di gruppo è la velocità che avrebbe un pacchetto d'onde centrato in $\mathbf{k}$

- $t = 0$  $\mathbf{f}(\mathbf{x}, t) = e^{i(k_1 \mathbf{x} - \omega_1 t)} + e^{i(k_2 \mathbf{x} - \omega_2 t)}$
- $t = \Delta t$  $= e^{i(k_1 \mathbf{x} - \omega_1 t)} \left(1 + e^{i(\Delta \mathbf{k} \mathbf{x} - \Delta \omega t)} \right)$

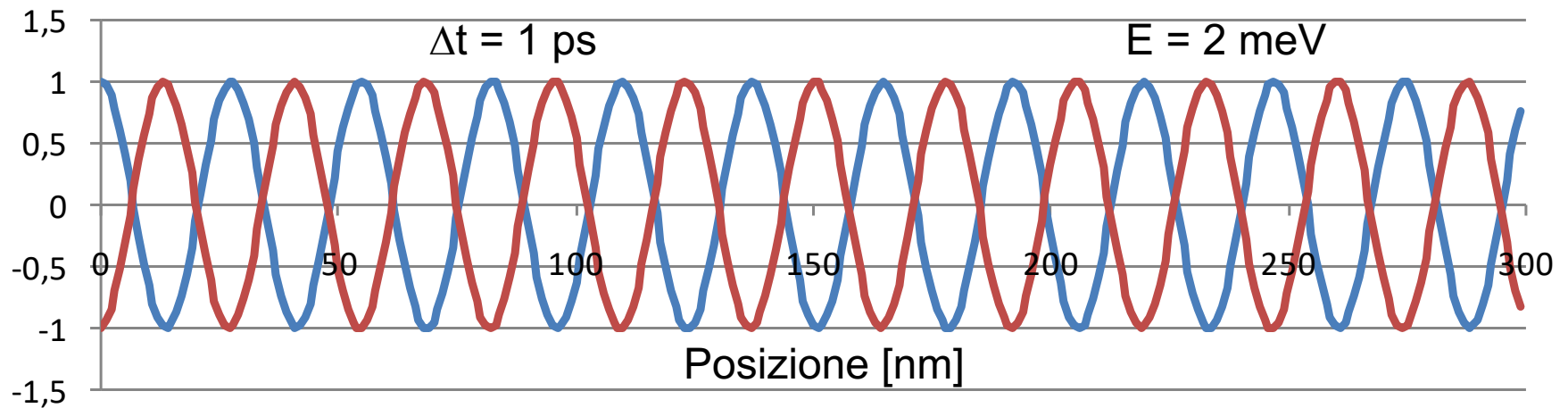
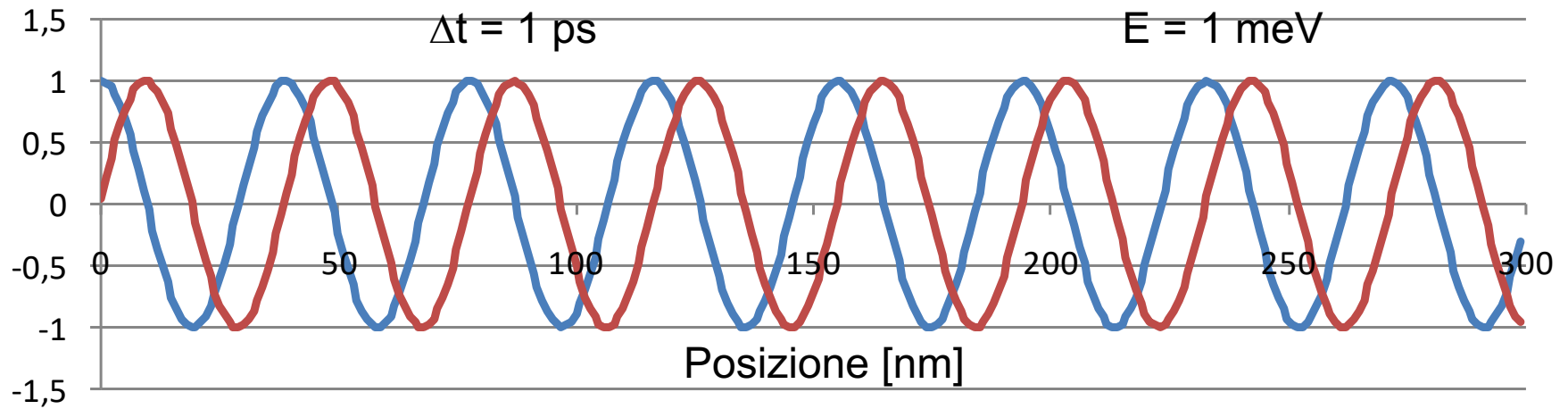
$$|\mathbf{f}(\mathbf{x}, t)|^2 = \left| 1 + e^{i\Delta \mathbf{k}(\mathbf{x} - \frac{\Delta \omega}{\Delta \mathbf{k}} t)} \right|^2 \rightarrow \mathbf{v}_g = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{k}}$$

Relazione di dispersione

- È la relazione che lega E (oppure ω) a k
- È una parabola per la particella libera
- Tutti i valori sono possibili (continuo)



Due esempi



Funzioni d'onda libera

- Onda viaggiante verso x crescenti

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})e^{-i\omega t} = e^{i(kx - \omega t)}$$



- Onde viaggianti verso x crescenti e decrescenti di pari ampiezza

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})e^{-i\omega t} = e^{i(kx - \omega t)} + e^{i(-kx - \omega t)}$$

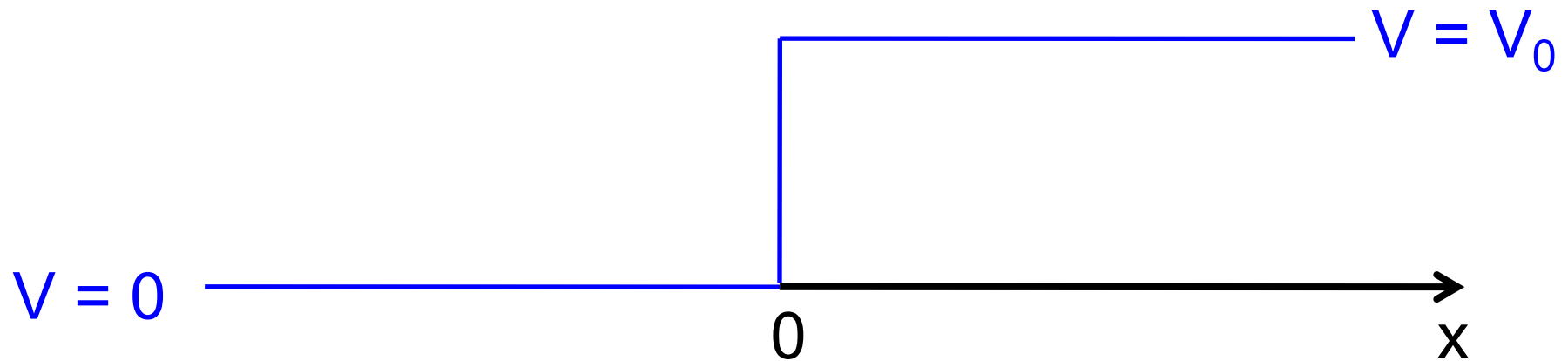


- Onde viaggianti verso x crescenti e decrescenti di diversa ampiezza

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x})e^{-i\omega t} = \left(2e^{ikx} + e^{-ikx}\right)e^{-i\omega t}$$

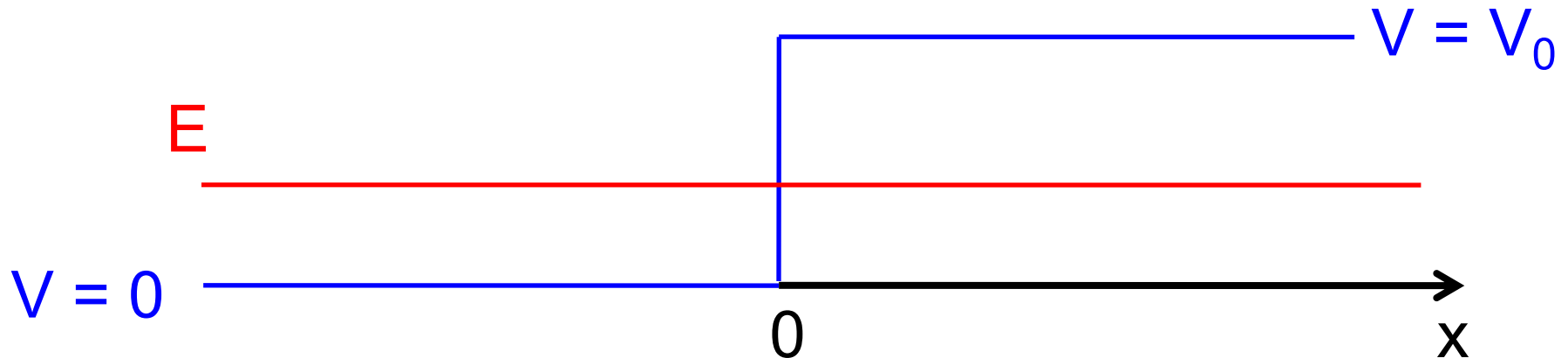


Gradino di potenziale



- $V = 0$ per $x < 0$
 - $V = V_0$ per $x > 0$
 - $x < 0 \rightarrow$ autofunzione $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
 - $x > 0 \rightarrow$ dipende dal segno di $E - V_0$
 - Per $E < V_0$, la regione a $x > 0$ è classicamente proibita
- $$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}^2} + V_0(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x})$$

Caso $E < V_0$



- $x < 0 \rightarrow \psi(\mathbf{x}) = \mathbf{A}e^{ikx} + \mathbf{B}e^{-ikx}$
- $x > 0 \rightarrow \frac{d^2\psi(\mathbf{x})}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi(\mathbf{x}) = \mathbf{C}e^{\alpha x} + \mathbf{D}e^{-\alpha x}$

(L'equazione $d^2\psi/dx^2 = \alpha^2\psi$ ammette soluzione generale esponenziale) $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$

Nota: l'esponenziale crescente ($\psi \rightarrow \infty$ per $x \rightarrow +\infty$) deve essere scartato, per tenere finita l'autofunzione $\rightarrow C = 0$

Condizioni al contorno

- L'autofunzione e la sua derivata devono essere continue, questo ci dà due condizioni al contorno per fissare due delle tre costanti di integrazione

$$\psi(0^-) = \psi(0^+)$$

$$\left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^-} = \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^+}$$

$$Ae^{ik^*0} + Be^{-ik^*0} = De^{-\alpha^*0} \rightarrow A + B = D$$

$$ikAe^{ik^*0} - ikBe^{-ik^*0} = -\alpha De^{-\alpha^*0} \rightarrow ikA - ikB = -\alpha D$$

- Diventa $\begin{cases} A + B = D \\ A - B = i\frac{\alpha}{k}D \end{cases}$ e quindi

$$\begin{cases} A = \frac{k + i\alpha}{2k} D \\ B = \frac{k - i\alpha}{2k} D \end{cases}$$

- D è lasciato arbitrario

Funzione d'onda

- La funzione d'onda risulta:

onda viaggiante
verso x crescenti

onda viaggiante
verso x decrescenti

$$\psi(\mathbf{x} < 0) = \frac{\mathbf{k} + i\alpha}{2\mathbf{k}} D e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} + \frac{\mathbf{k} - i\alpha}{2\mathbf{k}} D e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega t)}$$

$$\psi(\mathbf{x} > 0) = D e^{-\alpha \mathbf{x}} e^{-i\omega t}$$

- Si può leggere come onda viaggiante verso destra che viene riflessa dal gradino
- Qual è il rapporto tra la componente riflessa e quella incidente? Rapporto tra i coefficienti in modulo quadro: $\left| \frac{(\mathbf{k} - i\alpha) / 2\mathbf{k}}{(\mathbf{k} + i\alpha) / 2\mathbf{k}} \right|^2 = 1$
- Viene riflessa interamente!

Onda stazionaria

- Sviluppando i conti nell'autofunzione a

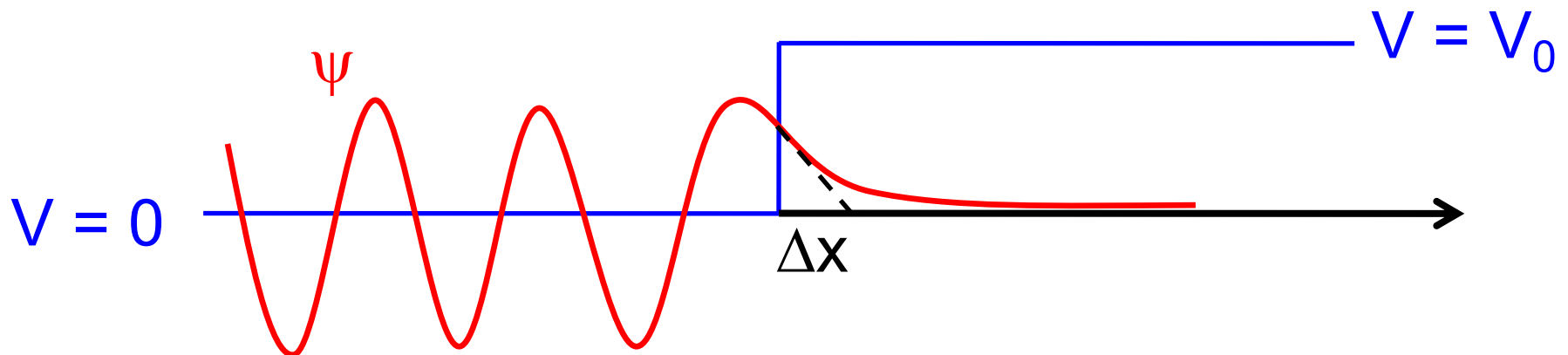
$x < 0$:

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{\mathbf{k} + i\alpha}{2\mathbf{k}} D e^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} + \frac{\mathbf{k} - i\alpha}{2\mathbf{k}} D e^{-i\mathbf{k}\mathbf{x}} = D \left(\cos \mathbf{k}\mathbf{x} - \frac{\alpha}{\mathbf{k}} \sin \mathbf{k}\mathbf{x} \right)$$

- È un'onda stazionaria, perché una volta moltiplicata per la parte temporale $e^{-i\omega t}$ i nodi sono fermi, solo l'ampiezza oscilla
- Onde viaggianti in direzione opposta con uguale lunghezza d'onda e ampiezza danno sempre luogo a un'onda stazionaria (effetto di interferenza)

Penetrazione nel gradino

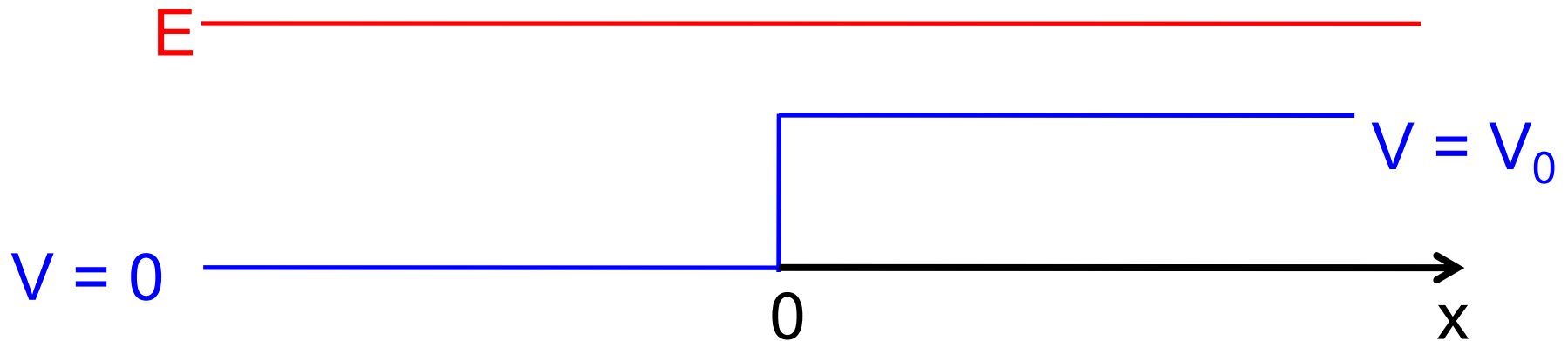
- Classicamente ci aspettiamo che la probabilità di trovare la particella a $x > 0$ sia nulla
- In realtà c'è probabilità finita di trovare la particella: risultato unicamente prevedibile dalla meccanica quantistica
- Una stima della penetrazione è data dalla costante di decadimento della funzione esponenziale $\Delta x = \alpha^{-1} = \hbar / (2m(V_0 - E))^{1/2}$



Penetrazione nel gradino

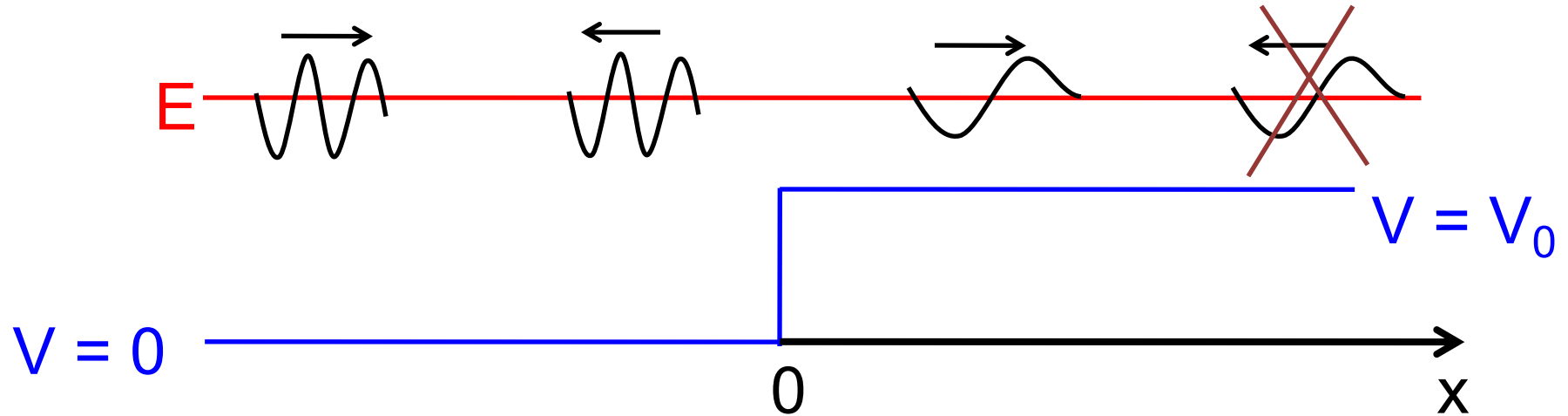
- Indeterminazione: $\Delta p \approx \hbar / \Delta x = (2m(V_0 - E))^{1/2}$, e quindi l'indeterminazione sull'energia è pari a $\Delta E = \Delta p^2 / 2m = V_0 - E \rightarrow$ la penetrazione della barriera si giustifica con un'indeterminazione sull'energia totale, che potrebbe essere quindi maggiore di quella potenziale nel breve tempo della penetrazione nel gradino
- L'effetto di penetrazione porta al tunneling, effetto prettamente quantistico in cui le particelle possono attraversare regioni classicamente proibite (e.g. l'ossido di gate in un transistor MOS)

Caso $E > V_0$



- Ora l'equazione di Schrödinger è formalmente la stessa per $x > 0$ e $x < 0$:
 - $x < 0 \rightarrow \frac{d^2\psi(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi(\mathbf{x}) = \mathbf{A}e^{ikx} + \mathbf{B}e^{-ikx}$
 - $x > 0 \rightarrow \frac{d^2\psi(\mathbf{x})}{d\mathbf{x}^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} (E - V_0) \psi(\mathbf{x}) \rightarrow \psi(\mathbf{x}) = \mathbf{C}e^{ik'x} + \mathbf{D}e^{-ik'x}$
- $$\mathbf{k} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \mathbf{k}' = \frac{\sqrt{2m(E - V_0)}}{\hbar}$$

Incidente, riflessa e trasmessa



- Le funzioni sono finite (armoniche)
- Fisicamente, possiamo immaginarci una particella proveniente da $x < 0$ che incide sul gradino, con probabilità finita di riflessione e di trasmissione a $x > 0$
- Tuttavia non c'è modo di avere componente viaggiante verso sinistra da $x > 0 \rightarrow D=0$

Condizioni al contorno

- Continuità della ψ e della sua derivata:

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(0^-) = \psi(0^+) \\ \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^-} = \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^+} \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{Ae^{ik^*0} + Be^{-ik^*0} = Ce^{ik'^*0} \rightarrow A + B = C} \\ \mathbf{ikAe^{ik^*0} - ikBe^{-ik^*0} = ik'Ce^{ik'^*0} \rightarrow ikA - ikB = ik'C} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{A + B = C} \\ \mathbf{A - B = \frac{k'}{k} C} \end{array} \right.$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{C = \frac{2k}{k + k'} A} \\ \mathbf{B = \frac{k - k'}{k + k'} A} \end{array} \right.$$

Funzione d'onda

- $x < 0 \rightarrow \psi(\mathbf{x}) = A e^{i(kx - \omega t)} + \frac{k - k'}{k + k'} A e^{-i(kx + \omega t)}$
- $x > 0 \rightarrow \psi(\mathbf{x}) = \frac{2k}{k + k'} A e^{i(k'x - \omega t)}$
- Componente riflessa? $r = \left(\frac{B}{A} \right)^2 = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2$
- Le informazioni rilevanti sono sempre indipendenti dalla costante d'integrazione A
- Nota: classicamente, la particella non verrebbe riflessa, la riflessione è un risultato puramente quantistico

Componente trasmessa

- Componente trasmessa? Il flusso normalmente è proporzionale sia al modulo quadro della funzione, sia alla velocità di propagazione, proporzionale a k ($x < 0$) o k' ($x > 0$) $\rightarrow$

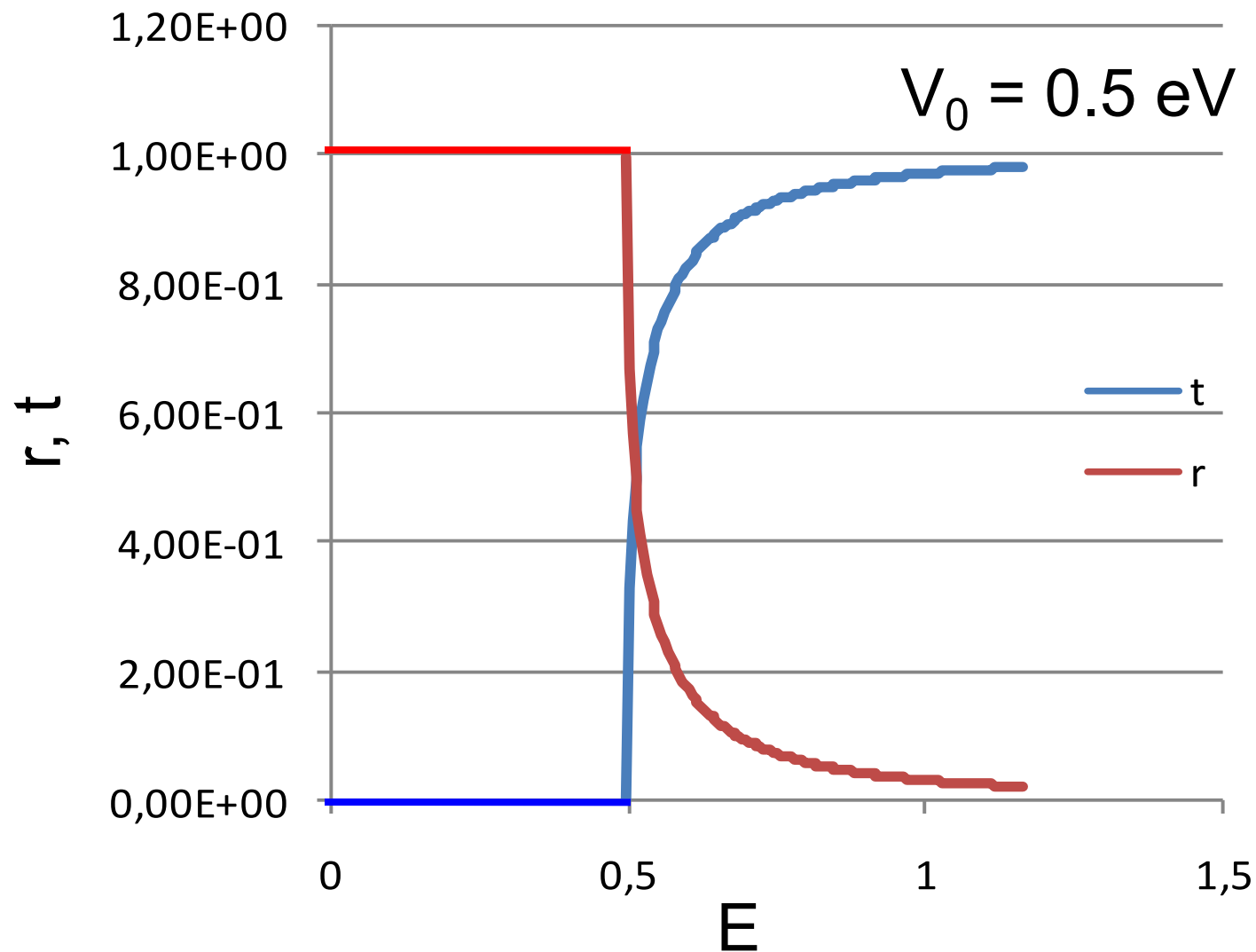
$$t = \frac{k'}{k} \left(\frac{C}{A} \right)^2 = \frac{k'}{k} \left(\frac{2k}{k + k'} \right)^2$$

- Nota: la conservazione delle particelle richiederebbe che $r + t$ (frazione riflessa + trasmessa) = 1

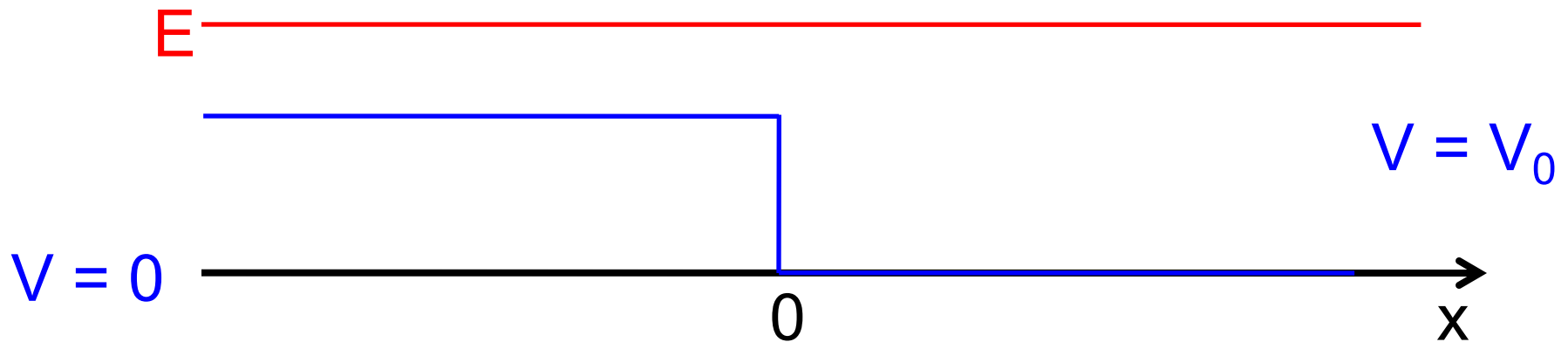
- Infatti:

$$r + t = \left(\frac{k - k'}{k + k'} \right)^2 + \frac{k'}{k} \left(\frac{2k}{k + k'} \right)^2 = \frac{k^2 + k'^2 - 2kk' + 4kk'}{(k + k')^2} = 1$$

Trasmissione e riflessione



Caso $E > V_0$



- Si verifichi che la soluzione è la stessa del gradino precedente

Funzione d'onda

- Funzione d'onda su gradino ($E=25$ meV, $V_0=35$ meV)

$$\psi(\mathbf{x} < 0) = \frac{\mathbf{k} + i\alpha}{2\mathbf{k}} D e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} + \frac{\mathbf{k} - i\alpha}{2\mathbf{k}} D e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega t)}$$

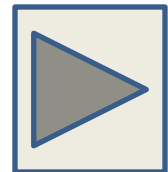
$$\psi(\mathbf{x} > 0) = D e^{-\alpha \mathbf{x}} e^{-i\omega t}$$



- Funzione d'onda su gradino ($E=45$ meV, $V_0=35$ meV)

$$\psi(\mathbf{x} < 0) = A e^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} + \frac{\mathbf{k} - \mathbf{k}'}{\mathbf{k} + \mathbf{k}'} A e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{x} + \omega t)}$$

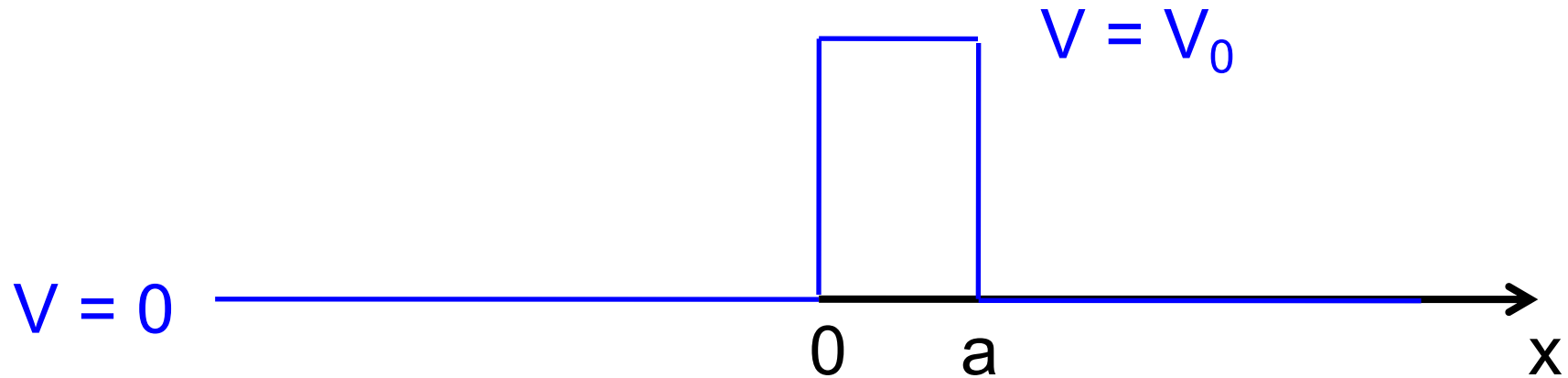
$$\psi(\mathbf{x} > 0) = \frac{2\mathbf{k}}{\mathbf{k} + \mathbf{k}'} A e^{i(\mathbf{k}'\mathbf{x} - \omega t)}$$



- Idem, ma con gradino negativo



Barriera di potenziale



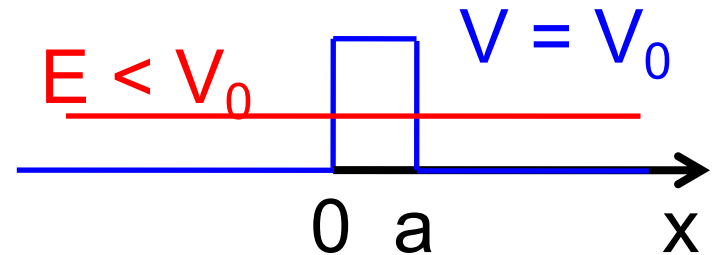
- $V = 0$ per $x < 0$ e $x > a$
- $V = V_0$ per $0 < x < a$
- $x < 0$ e $x > a \rightarrow \psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$
- $0 < x < a \rightarrow$ dipende dal segno di $E - V_0$

Caso $E < V_0$

$$\psi(\mathbf{x} < 0) = \mathbf{A}e^{ikx} + \mathbf{B}e^{-ikx}$$

$$\psi(0 < \mathbf{x} < \mathbf{a}) = \mathbf{C}e^{-\alpha x} + \mathbf{D}e^{\alpha x}$$

$$\psi(\mathbf{x} > \mathbf{a}) = \mathbf{E}e^{ikx} + \mathbf{F}e^{-ikx}$$



- $F=0$ perché escludiamo componente incidente da destra
- Non possiamo più annullare l'esponenziale crescente $\rightarrow D \neq 0$
- 4 condizioni al contorno per 5 costanti di integrazione

Condizioni al contorno

- L'autofunzione e la sua derivata devono essere continue in $x=0$ and $x=a$

$$\left\{ \begin{array}{l} \psi(0^-) = \psi(0^+) \\ \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^-} = \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{0^+} \\ \psi(a^-) = \psi(a^+) \\ \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a^-} = \left. \frac{d\psi}{dx} \right|_{a^+} \end{array} \right. \quad \left\{ \begin{array}{l} \mathbf{A}e^{ik^*0} + \mathbf{B}e^{-ik^*0} = \mathbf{C}e^{-\alpha^*0} + \mathbf{D}e^{\alpha^*0} \\ ik\mathbf{A}e^{ik^*0} - ik\mathbf{B}e^{-ik^*0} = -\alpha\mathbf{C}e^{-\alpha^*0} + \alpha\mathbf{D}e^{\alpha^*0} \\ \mathbf{C}e^{-\alpha^*a} + \mathbf{D}e^{\alpha^*a} = \mathbf{E}e^{ik^*a} \\ -\alpha\mathbf{C}e^{-\alpha^*a} + \alpha\mathbf{D}e^{\alpha^*a} = ik\mathbf{E}e^{ik^*a} \end{array} \right.$$

Costanti di integrazione

$$\left\{ \begin{array}{l} \mathbf{B} = -i \frac{\mathbf{k}^2 + \alpha^2}{\alpha \mathbf{k}} \mathbf{A} \frac{\sinh \alpha \mathbf{a}}{2 \cosh \alpha \mathbf{a} + i \frac{\alpha^2 - \mathbf{k}^2}{\alpha \mathbf{k}} \sinh \alpha \mathbf{a}} \\ \mathbf{C} = \mathbf{E} \frac{e^{\alpha \mathbf{a}} e^{i \mathbf{k} \mathbf{a}}}{2} \left(1 - \frac{i \mathbf{k}}{\alpha} \right) \\ \mathbf{D} = \mathbf{E} \frac{e^{-\alpha \mathbf{a}} e^{i \mathbf{k} \mathbf{a}}}{2} \left(1 + \frac{i \mathbf{k}}{\alpha} \right) \\ \mathbf{E} = 2 \mathbf{A} \frac{e^{-i \mathbf{k} \mathbf{a}}}{2 \cosh \alpha \mathbf{a} + i \frac{\alpha^2 - \mathbf{k}^2}{\alpha \mathbf{k}} \sinh \alpha \mathbf{a}} \end{array} \right.$$

Frazioni riflesse e trasmesse

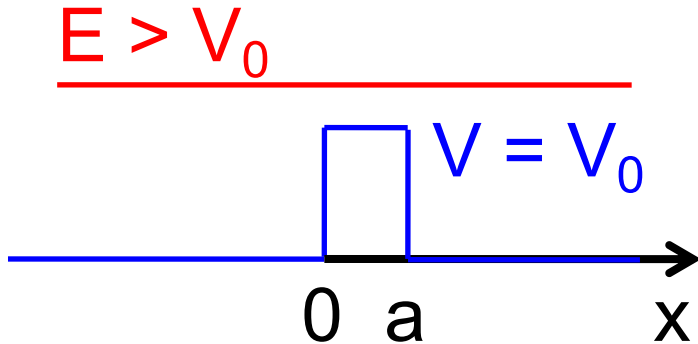
$$r = \left| \frac{\mathbf{B}}{\mathbf{A}} \right|^2 = \frac{\left(\frac{\mathbf{k}^2 + \alpha^2}{\alpha \mathbf{k}} \right)^2}{4 \cosh^2 \alpha \mathbf{a} + \left(\frac{\alpha^2 - \mathbf{k}^2}{\alpha \mathbf{k}} \right)^2 \sinh^2 \alpha \mathbf{a}}$$

$$t = \left| \frac{\mathbf{E}}{\mathbf{A}} \right|^2 = \frac{4}{4 \cosh^2 \alpha \mathbf{a} + \left(\frac{\alpha^2 - \mathbf{k}^2}{\alpha \mathbf{k}} \right)^2 \sinh^2 \alpha \mathbf{a}} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha^2 + \mathbf{k}^2}{2\alpha \mathbf{k}} \right)^2 \sinh^2 \alpha \mathbf{a}}$$

$$t \approx \left(\frac{4\alpha \mathbf{k}}{\alpha^2 + \mathbf{k}^2} \right)^2 e^{-2\alpha \mathbf{a}} \approx e^{-2\alpha \mathbf{a}} \quad \text{per } \alpha \mathbf{a} \gg 1$$

- Quest'ultima è alla base dell'approssimazione WKB per la probabilità di tunneling

Caso $E > V_0$



$$\psi(x < 0) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$$

$$\psi(0 < x < a) = Ce^{ik'x} + De^{-ik'x}$$

$$\psi(x > a) = Ee^{ikx} + Fe^{-ikx}$$

$$B = E \frac{e^{ik'a}}{k'} (k' \cos k'a - ik \sin k'a) - A$$

$$C = E \frac{e^{-ik'a} e^{ika}}{2} \left(\frac{k}{k'} + 1 \right)$$

$$D = E \frac{e^{ik'a} e^{ika}}{2} \left(1 - \frac{k}{k'} \right)$$

$$E = 2A \frac{e^{-ika}}{2 \cos k'a - i \left(\frac{k^2 + k'^2}{kk'} \right) \sin k'a}$$

$$F = 0$$

Probabilità di trasmissione

$$t = \frac{|E|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1 + \left(\frac{\alpha^2 + k^2}{2\alpha k}\right)^2 \sinh^2 \alpha a}$$

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V - E)}}{\hbar} = ik'$$

$$\sinh ix = i \sin x$$

$$t = \frac{1}{1 - \left(\frac{k^2 - k'^2}{2kk'}\right)^2 \sinh^2 ik'a} = \frac{1}{1 + \left(\frac{k^2 - k'^2}{2kk'}\right)^2 \sin^2 k'a}$$

- $k' = 0 \rightarrow t = \frac{1}{1 + \frac{k^2 a^2}{4}}$
- $t = 1$ per ogni $k'a = \pi n$ ($n = 1, 2, \dots$), cioè $a = n\lambda/2$ dove $\lambda =$ lunghezza d'onda nella barriera

Funzione d'onda

- Funzione d'onda su barriera ($E=25$ meV, $V_0=35$ meV)



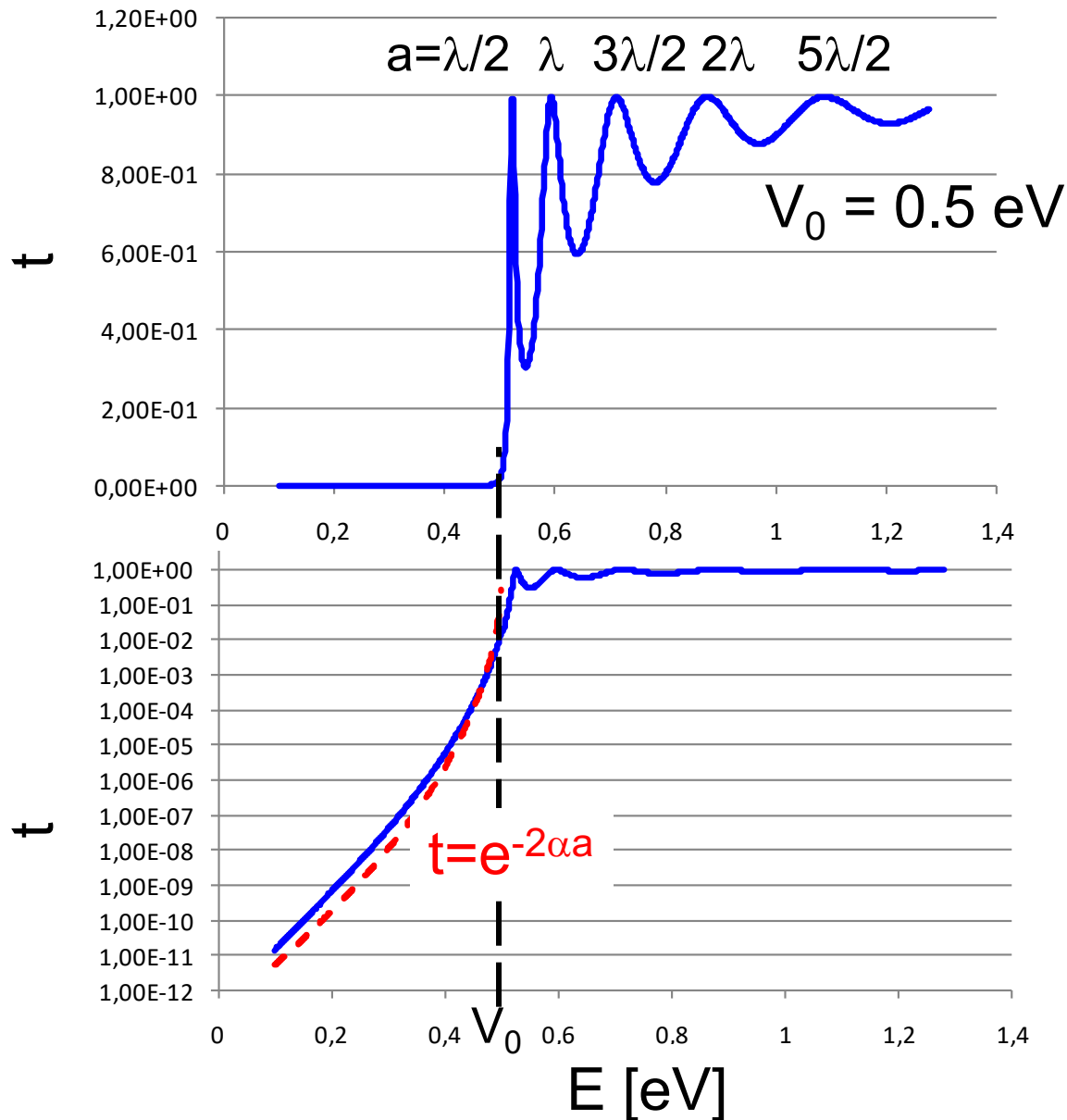
- Funzione d'onda su barriera ($E=35$ meV, $V_0=35$ meV)



- Funzione d'onda su barriera ($E=45$ meV, $V_0=35$ meV)



Frazioni trasmesse



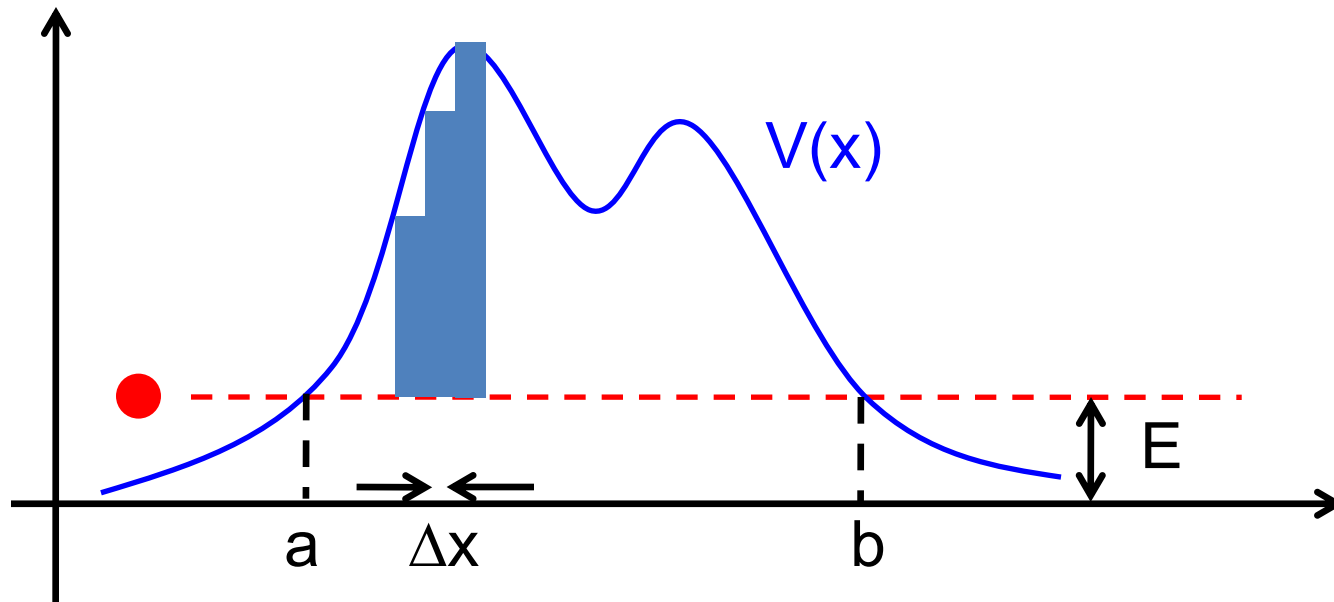
Outline

- La particella libera
- Gradino di potenziale
- Barriera di potenziale
- Tunneling
- Stati non stazionari
- Conclusioni

Tunneling

- L'attraversamento di barriere di potenziale classicamente proibite è un risultato prevedibile solo con la meccanica quantistica
- Esistono diversi casi 'macroscopici' di tunneling:
 - Decadimento alpha in alcuni nuclei
 - Vibrazioni nella molecola di ammoniaca
 - Vari effetti nella fisica dei dispositivi (correnti di gate nei MOSFET, programmazione e perdita di memoria in dispositivi Flash, breakdown Zener in diodi, caratteristiche a resistenza negativa in diodi tunnel)

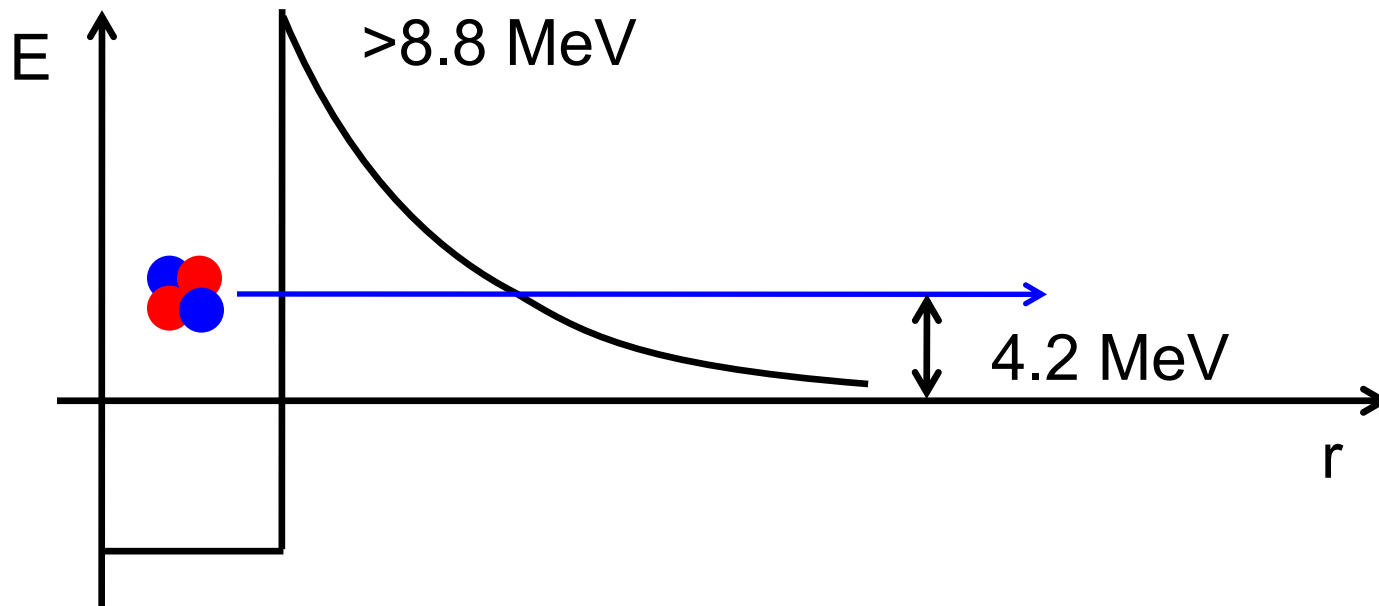
Approssimazione WKB



$$P = \prod_n e^{-2\alpha_n \Delta x} = e^{-2 \sum_n \alpha_n \Delta x} \rightarrow e^{-\int_a^b 2\alpha(x) dx} = e^{-\int_a^b 2 \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} dx}$$

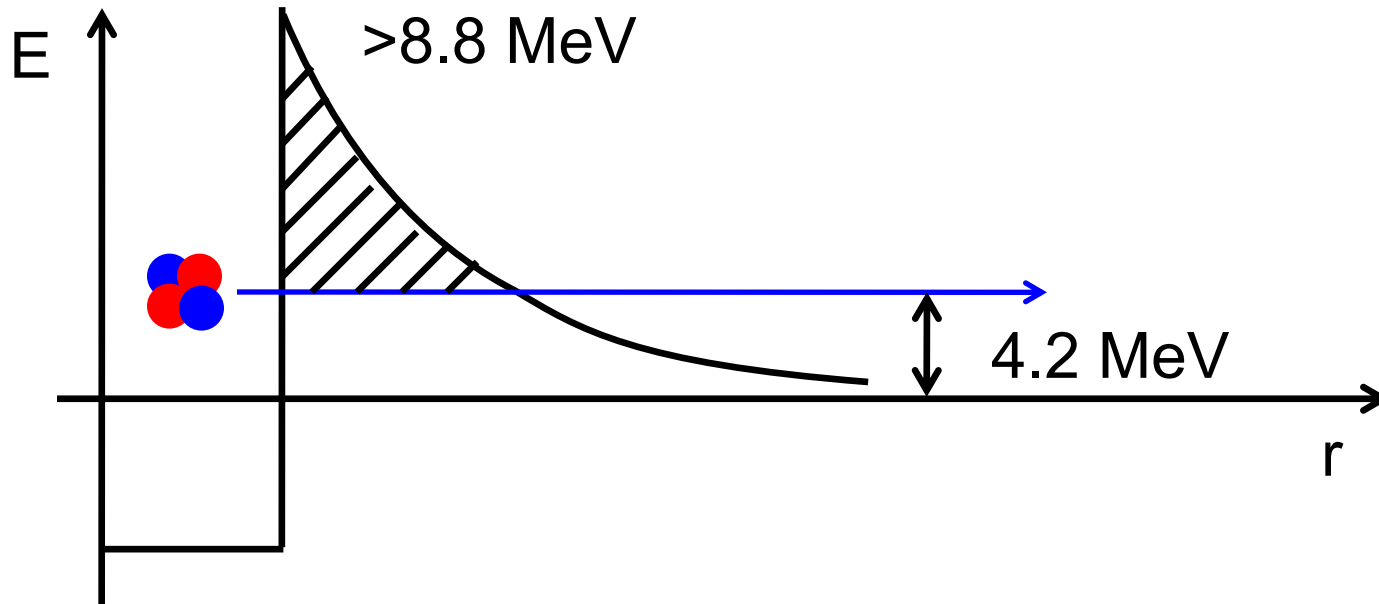
- Applicazioni varie, dalla fisica nucleare ai dispositivi allo stato solido

Decadimento alpha



- Da esperimenti di scattering ad alta energia era noto che l'energia potenziale era almeno 8.8 MeV, mentre l'energia cinetica delle particelle α era 4.2 MeV $\rightarrow$ paradosso

Stima del tempo di decadimento α



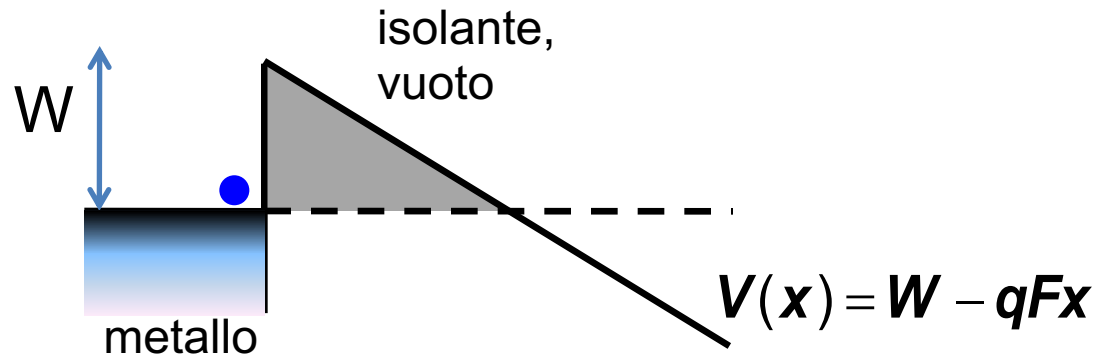
- Tempo medio di tentativo di tunneling $\tau_0 = 2R/v$
- Probabilità di tunneling mediante approssimazione WKB

$$P = e^{-\int_R^{R_{out}} 2\alpha(r) dr} = e^{-\int_R^{R_{out}} 2\sqrt{\frac{2m(V(r)-E)}{\hbar}} dr}$$

$$V(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2Zq^2}{r}, E = 4.2 \text{ MeV}$$

- Tempo medio di decadimento $\tau = \tau_0/P$

Altri esempi



- Probabilità di tunneling attraverso la barriera triangolare:

$$P = e^{-\int_a^b 2 \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar} dx} = e^{-2 \frac{\sqrt{2m}}{\hbar qF} \int_0^W \sqrt{y} dy} = e^{-\frac{4\sqrt{2m}}{3\hbar qF} W^{\frac{3}{2}}}$$

- Questa è nota come formula di Fowler-Nordheim
- Applicazioni (con eventuali modifiche):
programmazione e cancellazione in memorie Flash,
correnti di gate in transistori MOS, corrente di
emissione di campo da catodi nel vuoto

Outline

- La particella libera
- Gradino di potenziale
- Barriera di potenziale
- Tunneling
- Stati non stazionari
- Conclusioni

Stati non stazionari

- Una funzione d'onda costruita con una sola autofunzione è stazionaria, cioè la $|\Psi(\mathbf{x},t)|^2$ non varia nel tempo. Infatti:

$$|\Psi(\mathbf{x},\mathbf{t})|^2 = |\psi(\mathbf{x})\mathbf{e}^{-i\omega t}|^2 = |\psi(\mathbf{x})|^2$$

- Ma in generale la funzione d'onda non è stazionaria:

$$\Psi(\mathbf{x},\mathbf{t}) = \sum_n \mathbf{a}_n \psi_n(\mathbf{x}) \mathbf{e}^{-i\frac{E_n}{\hbar}t}$$

- Studiamo la forma e la proprietà di funzioni d'onda non stazionarie

Pacchetto d'onda

- Combinando linearmente funzioni d'onda di particella libera (onde viaggianti) si ottengono pacchetti d'onda

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{g}(\mathbf{k}) \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{x} - \omega t)} d\mathbf{k}$$

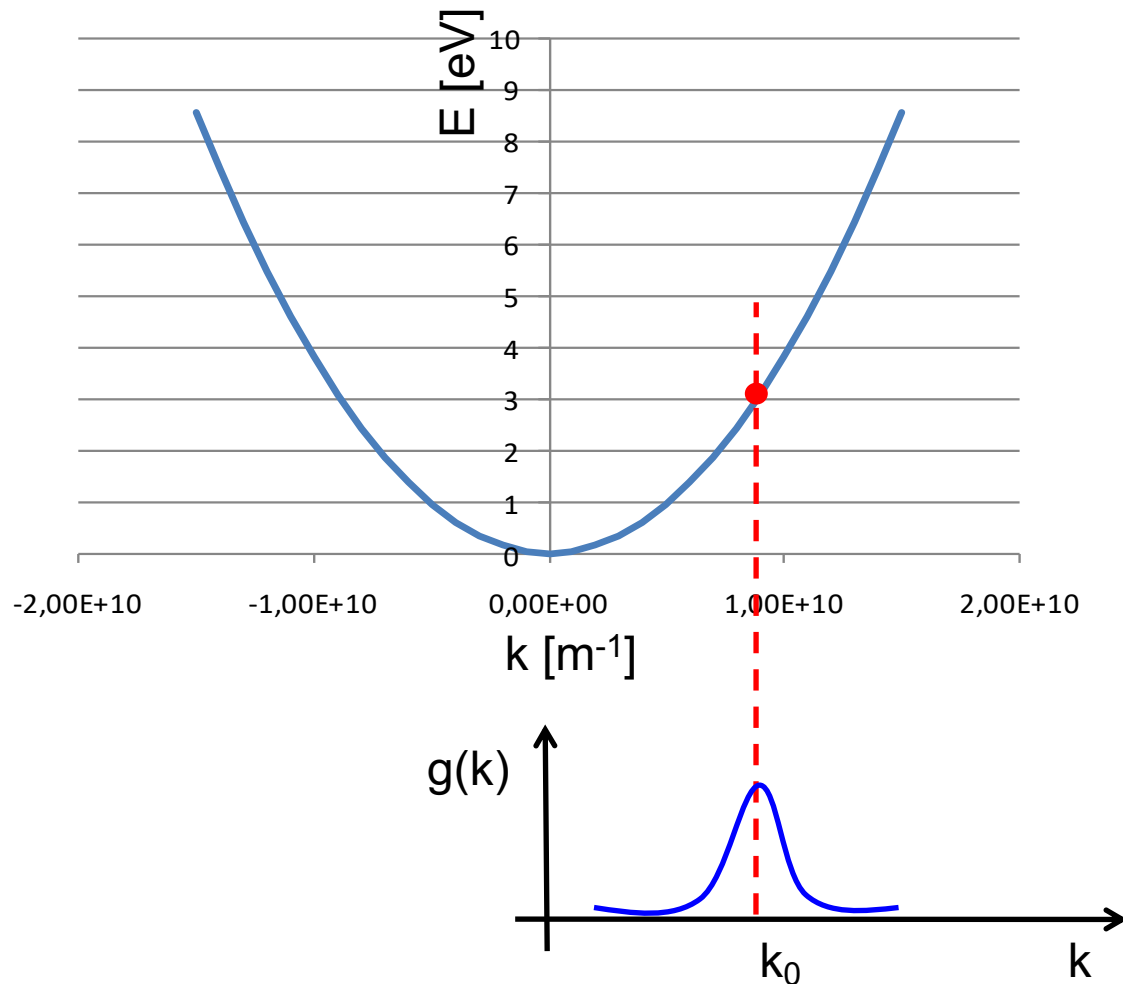
- Partiamo con il pacchetto costruito solo con le parti spaziali

$$\mathbf{f}(\mathbf{x}) = \int \mathbf{g}(\mathbf{k}) \mathbf{e}^{i\mathbf{k}\mathbf{x}} d\mathbf{k}$$

- Nota: il pacchetto (funzione spaziale) è la trasformata di Fourier della funzione peso $g(k)$

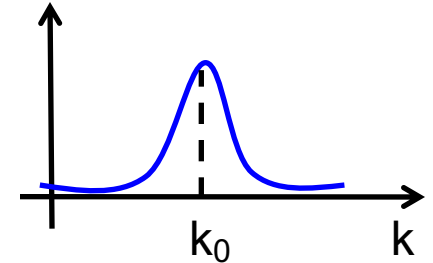
Costruzione del pacchetto

- Combinazione lineare di stati di particella libera centrati attorno ad uno stato k_0



Peso gaussiano

- Assumiamo per la funzione peso una forma gaussiana $g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$ e sviluppiamo l'integrale:



$$f(x) = \int e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} dk = e^{ik_0x} \int e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{i(k-k_0)x} dk =$$

$$= e^{ik_0x} \int e^{-\alpha k'^2} e^{ik'x} dk' = e^{ik_0x} e^{\alpha \left(\frac{ix}{2\alpha} \right)^2} \int e^{-\alpha \left(k'^2 - \frac{ix}{\alpha} k' + \left(\frac{ix}{2\alpha} \right)^2 \right)} dk' =$$

$$q = k' - \frac{ix}{2\alpha} \rightarrow = e^{ik_0x} e^{\alpha \left(\frac{ix}{2\alpha} \right)^2} \int e^{-\alpha q^2} dq = e^{ik_0x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

- Nota: $\Delta k \Delta x = (\alpha^{-1} * 4\alpha)^{1/2} = 2 \rightarrow \Delta p \Delta x = 2\hbar$
(principio di indeterminazione)

Pacchetto viaggiante

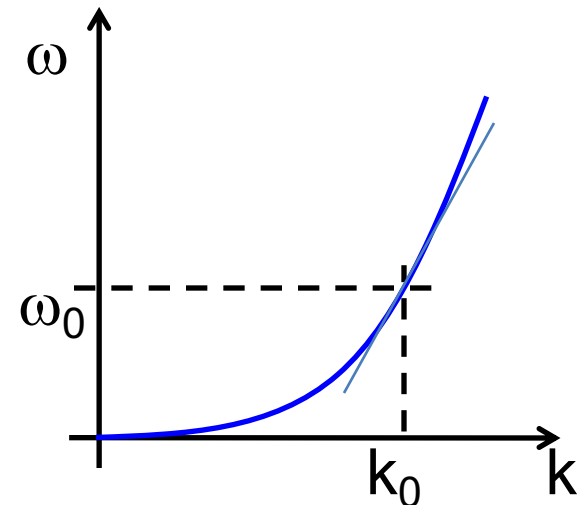
- Ora consideriamo un pacchetto costruito con onde viaggianti:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = \int \mathbf{e}^{-\alpha(\mathbf{k}-\mathbf{k}_0)^2} \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}\mathbf{x}-\omega t)} d\mathbf{k} =$$

- Dove la pulsazione ω è legata a k da una relazione di dispersione, localmente espressa dallo sviluppo:

$$\omega = \omega_0 + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0} (k - k_0)^2$$

$$v_g = \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_{k_0} \quad \beta = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_{k_0}$$



Risultato

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(k_0 \mathbf{x} - \omega_0 t)} \int e^{-\alpha k'^2} e^{ik' \mathbf{x}} e^{-ik' \mathbf{v}_g t} e^{-i\beta k'^2 t} d\mathbf{k}' =$$

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(k_0 \mathbf{x} - \omega_0 t)} \int e^{-(\alpha + i\beta t) k'^2} e^{ik'(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g t)} d\mathbf{k}' =$$

- Nel caso precedente avevamo:

$$f(\mathbf{x}) = e^{ik_0 \mathbf{x}} \int e^{-\alpha k'^2} e^{ik' \mathbf{x}} d\mathbf{k}' = e^{ik_0 \mathbf{x}} e^{-\frac{\mathbf{x}^2}{4\alpha}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

- Quindi ora:

$$\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{i(k_0 \mathbf{x} - \omega_0 t)} \int e^{-(\alpha + i\beta t) k'^2} e^{ik'(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g t)} d\mathbf{k}' = e^{i(k_0 \mathbf{x} - \omega_0 t)} e^{-\frac{(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g t)^2}{4(\alpha + i\beta t)}} \sqrt{\frac{\pi}{\alpha + i\beta t}}$$

Modulo quadro

- La grandezza fisicamente interessante è:

$$|\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{t})|^2 = e^{-\frac{\alpha(\mathbf{x} - \mathbf{v}_g \mathbf{t})^2}{2(\alpha^2 + \beta^2 \mathbf{t}^2)}} \frac{\pi}{\sqrt{\alpha^2 + \beta^2 \mathbf{t}^2}}$$

- Il pacchetto si sposta con velocità v_g
- Il pacchetto si disperde, la sua varianza aumenta con il tempo secondo $\alpha + \beta^2 t^2 / \alpha$
- Nel caso della particella libera, $v_g = \hbar k / m$ e $\beta = \hbar / 2m$

Funzioni d'onda

- Pacchetto di onde viaggianti verso x crescenti ($E = 30$ meV)
- Pacchetto d'onde che incide su un gradino di potenziale ($E = 55$ meV, $V = 45$ meV)
- Pacchetto d'onde che incide su una barriera di potenziale ($E = 55$ meV, $V = 60$ meV)



Conclusioni

- Analizzati potenziali monodimensionali costanti a tratti (particella libera, gradino di potenziale, barriera di potenziale) non confinati
- Abbiamo riscontrato nuovi effetti puramente quantistici (risonanza nella trasmissione, tunneling)
- Gli stati non stazionari (e.g. il pacchetto d'onde) forniscono una visione più realistica della particella