ESERCITAZIONE 4:

Esercizio 1

Calcolare in che condizioni l'operatore Hamiltoniano (energia cinetica e potenziale) e l'operatore del momento (quantità di moto) commutano.

$\hat{H}, \hat{P} \longrightarrow [\hat{H}, \hat{P}] = 0$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V$$

$$\hat{P} = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$$

$$[\hat{H},\hat{P}]\Psi = [\hat{H}\hat{P} - \hat{P}\hat{H}]\Psi = \Big[\underbrace{\cancel{+\frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3}}} - V_i\hbar\frac{\partial}{\partial x} - \underbrace{\cancel{\frac{i\hbar^3}{2m}\frac{\partial^3}{\partial x^3}}} + i\hbar\frac{\partial}{\partial x}V\Big]\Psi = -V i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x} + i\hbar\frac{\partial(V\Psi)}{\partial x} = 0$$

quando è uguale a 0?

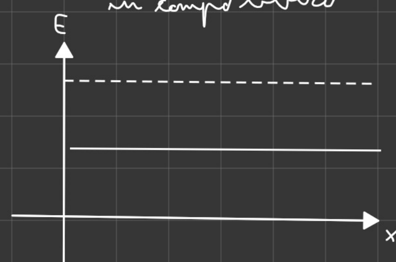
per capire meglio sviluppiamo la derivata nella destra:

$$\cancel{-V i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial x}} + i\hbar\Psi\frac{\partial V}{\partial x} + \cancel{i\hbar V\frac{\partial\Psi}{\partial t}} = 0$$

$$i\hbar\Psi\frac{\partial V}{\partial x} = 0$$

$\rightarrow \Psi = 0$

$\rightarrow \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \rightarrow$ questo succede se ho una particella in campo libero

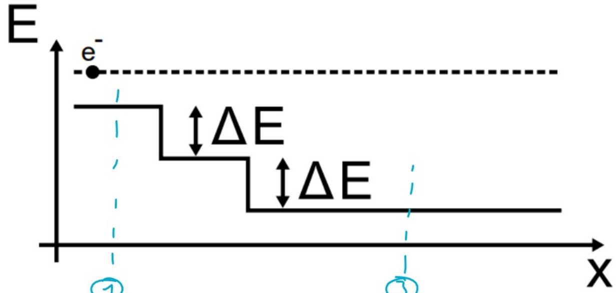


ergo i due operatori commutano solo quando sono con una particella in campo libero

esercizio 2:

Esercizio 2

Si consideri il profilo di potenziale in figura. Trascurando i fenomeni di riflessione e sapendo che $\Delta E = 2\ eV$, $\lambda_1 = 3\lambda_3$, calcolare l'energia dell'elettrone viaggiante da sinistra verso destra.



$\Delta E = 2eV$

$\lambda_1 = 3\lambda_3$

$E_{\bar{e}}$?

$E_{k1} = E_{e^-}$

$E_{k3} = E_{e^-} + 2\Delta E$

$\downarrow$

$E_{k3} = E_{k1} + 2\Delta E$

$$E_{k1} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2}\frac{p^2}{m} = \frac{1}{2}\frac{h^2}{m\lambda_1^2} \rightarrow \lambda_1 = \frac{h}{\sqrt{2mE_{k1}}}$$

$$\lambda_3 = \frac{h}{\sqrt{2m(E_1 + 2\Delta E)}}$$

sapendo che $\lambda_1 = 3\lambda_3$, si ottiene:

$$\lambda_1 = \frac{h}{\sqrt{2mE_1}} = 3\frac{h}{\sqrt{2m(E_1 + 2\Delta E)}} = 3\lambda_3 \longrightarrow \cancel{2m}E_1 = \frac{1}{9}\cdot\cancel{2m}(E_1 + 2\Delta E)$$

$\downarrow$

$$E_1(9-1) = 2\Delta E$$

$$\rightarrow E_1 = \frac{1}{4}\Delta E = 0{,}5\ eV$$

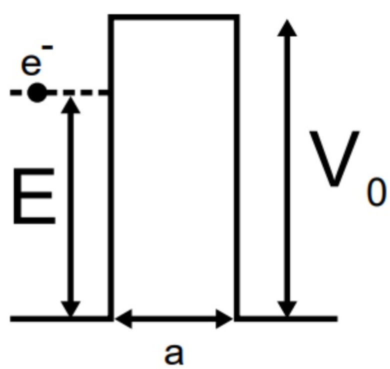
da cui: $E_2 = 0{,}5\ eV + 2\ eV = 2{,}5\ eV$

$E_3 = 0{,}5\ eV + 4\ eV = 4{,}5\ eV$

esercizio 3: (sul tunnelling)

Esercizio 3

Si consideri una barriera di potenziale larga 2 nm e alta $V_0 = 3\ eV$ e un elettrone viaggiante da sinistra a destra con energia $E = 2.5\ eV$ e flusso incidente $J_i = 10^{20}\ cm^{-2}s^{-1}$.



- Quanto vale il flusso trasmesso utilizzando l'approssimazione WKB?
- È applicabile e corretta l'approssimazione?
- A quanto corrisponde l'errore commesso sulla valutazione dello spessore della barriera?
- Per quali valori di energia si ottiene trasmissibilità $|T|^2 = 1$?

1) $$\frac{J_T}{J_i} = |T|^2 \simeq e^{-2\int_{x_0}^{x_1}\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}dx} = e^{-2\underbrace{\frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar}}_{\alpha}\cdot a} = e^{-2\alpha a}$$ ✓

TUTTO convertito in Joule

$$\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_0-E)}}{\hbar} = 3,62 \cdot 10^{9}\ m^{-1} \checkmark \longrightarrow |T|^2 = 5,14 \cdot 10^{-7}$$

$$J_T = |T|^2 J_i = 5,145 \cdot 10^{13}\ m^{-2}\ J^{-1}$$

2) WKB è valido quando l'esponenziale è grande, ovvero:

$$\alpha a \gg 1 \qquad \alpha a = 3,62 \cdot 10^{9} \cdot 2 \cdot 10^{-9} = 7,24 \gg 1 \checkmark$$

3) Qual'è l'errore che abbiamo commesso usando l'approssimazione WKB?

$$|T|^2 = \frac{1}{\cosh^2(\alpha a) + \left(\frac{1-\left(\frac{k}{\alpha}\right)^2}{2\frac{k}{\alpha}}\right)^2 \sinh^2(\alpha a)} = \frac{1}{\cosh^2(\alpha a) + \left(\frac{1-2\left(\frac{k}{\alpha}\right)^2 + (k/\alpha)^4}{4(k/\alpha)^2}\right)\cosh^2(\alpha a)} =$$

qui in mezzo ci sono tanti calcoli (approssimando $\sin^2(\alpha a) \simeq \frac{e^{2\alpha a}}{4}$ e trascurando un 1 al denominatore)

$$= \dots = \left(\frac{4\alpha k}{a^2+k^2}\right)^2 \cdot e^{-2\alpha a}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = 8,1 \cdot 10^{9}\ m^{-1}$$

da cui si ottiene:

$$|T|^2 = 2,2\, e^{-2\alpha a} = 2,2\, |T|^2_{WKB}$$

L'incertezza sulla barriera si ottiene considerando che la nuova trasmissibilità appartenga ad una barriera equivalente, studiata in approssimazione WKB, di larghezza B:

$$|T|^2 = |T|^2_{WKB,b} = e^{-2\alpha b}$$

$$\frac{|T|^2}{|T|^2_{WKB}} = \frac{e^{-2\alpha b}}{e^{-2\alpha a}} = e^{-2\alpha \Delta a}$$

$$|\Delta a| = \frac{1}{2\alpha} \log\left(\frac{|T|^2}{|T|^2_{WKB}}\right) = 0,11\ nm$$

In altre parole, usando l'approssimazione WKB sulla prima barriera, stiamo in realtà compiendo un errore pari a quello di considerare una barriera leggermente più grande, di larghezza $a+\Delta a$ (infatti otteniamo una trasmissibilità inferiore rispetto a quella effettiva).
L'errore relativo sulla larghezza della barriera è quindi dato da:

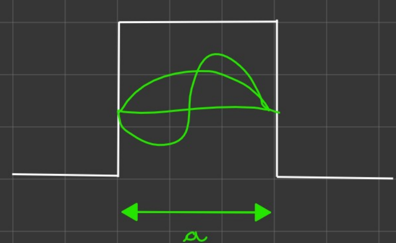
$$\varepsilon\% = \frac{\Delta a}{a}\cdot 100 = \underline{5,5\%} \quad ✓$$

4) per determinare le energie di massima trasmissibilità possiamo procedere in due modi

Un primo approccio è quello analitico: nota la funzione di trasmissibilità rispetto a k, e quindi rispetto ad E, la si può derivare per localizzare i massimi:

$$E = \arg\max\left(|T(E)|^2\right) \qquad \frac{d\left(|T(E)|^2\right)}{dE} = 0$$

In alternativa posso considerare la fisica del problema



per non vedere la barriera di potenziale devo compiere un numero intero di lunghezze d'onda.

↓

per quali λ? $\rightarrow$ $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V_0)}}$

$$\boxed{E = V_0 + \frac{h^2}{8ma}\,n^2}$$

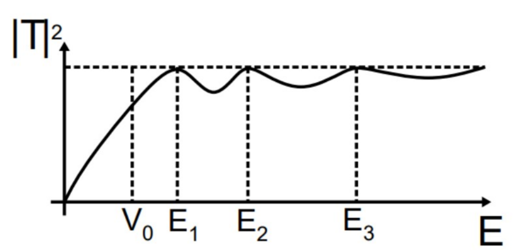
Quindi ad esempio per le energie:

$$E_1 = V_0 + \frac{h^2}{8ma^2} = 3.094\ eV$$

$$E_2 = V_0 + 4\,\frac{h^2}{8ma^2} = 3.377\ eV$$

$$E_3 = V_0 + 9\,\frac{h^2}{8ma^2} = 3.847\ eV$$

La trasmissibilità sarà massima e pari a 1. Possiamo tracciare un grafico (qualitativo) della trasmissibilità:

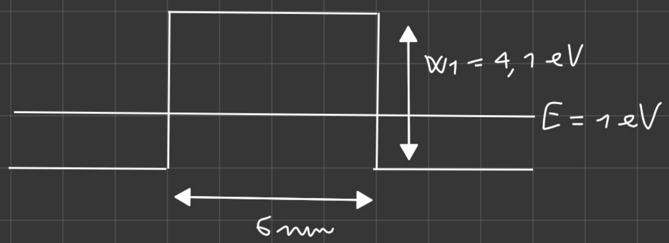


Esercizio 4:

Esercizio 4

Si consideri una barriera di potenziale alta $W_1 = 4.1\ eV$ e larga $a = 6\ nm$, e un elettrone viaggiante da sinistra verso destra con energia $E = 1\ eV$ e massa efficace $m_e^* = 0.33\ m_e$. Calcolare la probabilità di tunneling quando ai capi della barriera è applicato:

- Un potenziale $V_A = 0\ V$
- Un potenziale $V_A = 2\ V$
- Un potenziale $V_A = 12\ V$



$m^* = 0,33\ m_e$

1) $V_A = 0V$

2) $V_A = 2V$

3) $V_A = 12V$

1)

$$P_T = e^{-2\int_a \frac{\sqrt{2m}\sqrt{W-E}}{h} dx} = e^{-2\int_0^a \frac{2m\sqrt{W-E}}{h} dx} = e^{-2\alpha a} = \underline{1,03 \cdot 10^{-27}}$$ ✓

$$\alpha = \frac{2m^*\sqrt{W-E}}{h}$$

$$F = \frac{V_A}{a} = 3,33\ MV/cm$$

2)

$$P_T = e^{-2\int_0^a \frac{2m^*}{h}\sqrt{W-E-qFx}\, dx} =$$

$$y = W - E - qFx$$

$$\frac{dy}{dx} = -qF$$

$$dy = -qF dx$$

$$dx = -\frac{dy}{qF}$$

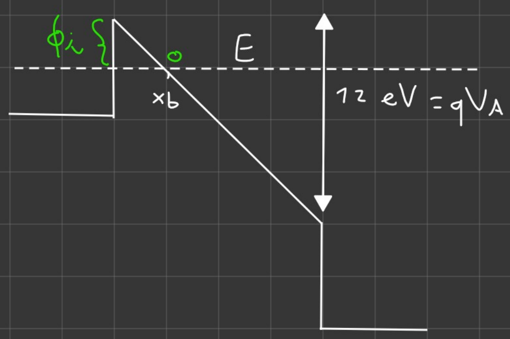
$$y(x=0) = \phi_1$$

$$y(x=a) = W - E - q V_A = \phi_f$$

$$\longrightarrow P_T = e^{-2\int_{\phi_i}^{\phi_f} \frac{\sqrt{2m^*}}{qhF}\sqrt{y}\left(-\frac{dy}{qF}\right)} = e^{\frac{2\sqrt{2m^*}}{qhF}\int_{\phi_i}^{\phi_f}\sqrt{y}\, dy}$$

$$P_T = e^{\frac{4}{3}\frac{\sqrt{2m^*}}{q\hbar F}\left(\phi_f^{3/2} - \phi_i^{3/2}\right)} = 10^{-22} \checkmark$$

3)



$$P_T = e^{-2\int_0^{x_b} \frac{\sqrt{2m^*}}{\hbar}\sqrt{W - E - qFx}\, dx}$$

$$y = W - E - qFx \qquad dy = -qF\,dx$$

$$dx = -\frac{1}{qF}\,dy$$

$$y(x=0) = W - E = \phi_i$$

$$y(x=x_b) = W - E\, qFx_b = 0$$

da cui $|T|^2 = e^{-\frac{4\sqrt{2m^*}}{3qF\hbar}\cdot (W_1 - E)^{3/2}} \simeq 2{,}25 \cdot 10^{-5}$