Lezione 5

Problemi di scattering 1D di un potenziale costante a tratti

5.1 Formule

Equazione di Schrödinger 1D in presenza di potenziale costante

Dato un potenziale costante, scrivo l'hamiltoniana $\hat{H}$:

$$\hat{H} = \hat{K} + \hat{U} \tag{5.1}$$

L'operatore energia cinetica $\hat{K}$ si scrive (in rappresentazione x)

$$\hat{K} = \frac{\hat{p}^2}{2m} \rightarrow \frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \tag{5.2}$$

L'operatore potenziale $\hat{U}$ corrisponde ad una banale moltiplicazione per la costante U. Scrivo l'equazione di S. indipendente dal tempo.

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x) \tag{5.3}$$

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + U\psi(x) = E\psi(x) \tag{5.4}$$

Giungiamo alla equazione differenziale

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{2m\,(E-U)}{\hbar^2}\psi(x) \tag{5.5}$$

che ammmette come generica soluzione una combinazione lineare[1] di due soluzioni:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \tag{5.6}$$

[1] Le combinazioni lineari in MQ sono in generale da intendersi a coefficienti complessi.

dove ho definito

$$k=\sqrt{\frac{2m\left(E-U\right)}{\hbar^2}} \tag{5.7}$$

Da notare é come ciascuna delle due soluzioni che formano la combinazione lineare in (5.6) rappresenta un onda che si propaga verso una ben precisa direzione (sono autostati dell'impulso).
Da notare inoltre é che se $(E-U)<0$ abbiamo un radicando negativo, pertanto

$$k=\sqrt{-1}\sqrt{\frac{2m\left(U-E\right)}{\hbar^2}}=i\kappa \tag{5.8}$$

dove ora κ é reale. In questo ultimo caso le soluzioni dell'equazione differenziale (5.5) sono tutte le possibili combinazioni lineari del tipo:

$$\psi(x)=Ae^{-\kappa x}+Be^{\kappa x} \tag{5.9}$$

Quindi a seconda di $E\lesseqgtr U$ ho una combinazione lineare di esponenziali reali/complessi. Nel primo caso (esponenziali reali) ho onde evanescenti, nel secondo (esponenziali complessi) ho onde che si propagano.

Densitá di corrente di probabilità

Dato che la densità di corrente di probabilità é definita come

$$j_x\left(x\right)=\frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^\star\left(x\right)\frac{d}{dx}\psi\left(x\right)-\psi\left(x\right)\frac{d}{dx}\psi^\star\left(x\right)\right] \tag{5.10}$$

Per una funzione esponenziale immaginaria del tipo Ae^{ikx}

$$j_x\left(x\right)=\frac{\hbar}{2mi}\left[A^\star e^{-ikx}ikAe^{ikx}-Ae^{ikx}\left(-ik\right)A^\star e^{-ikx}\right]=\frac{k\hbar}{m}\left|A\right|^2 \tag{5.11}$$

Per una funzione esponenziale reale del tipo Ae^{kx}

$$j_x\left(x\right)=\frac{\hbar}{2mi}\left[A^\star e^{-kx}ikAe^{kx}-Ae^{kx}\left(k\right)A^\star e^{kx}\right]=0 \tag{5.12}$$

Problemi di scattering 1D con potenziale costante a tratti

Chiamo "interfaccia" il punto in cui il potenziale cambia valore e"blocco" la regione di spazio tra due interfacce o al piú tra un'interfaccia e $\pm\infty$.
Una volta definito il valore dell'energia E, per ogni blocco identifico un vettore d'onda che puó essere reale o complesso a seconda del segno di $(E-U_m)$ (U_m é il valore dell'energia

potenziale nel blocco m-esimo).
In ogni blocco scrivo la funzione d'onda come combinazione lineare (a coefficienti complessi) delle due soluzioni linearmente indipendenti della equazione di Schrödinger indipendente dal tempo.
La funzione d'onda non puó mai divergere. Quindi elimino a priori soluzioni divergenti! Ad esempio se nel blocco piú a destra (quello che ha come ultimo estremo $+\infty$) ho esponenziali reali, setto a zero il coefficiente di un ipotetico esponenziale reale del tipo $e^{\kappa x}$, fonte di divergenza per $x \to +\infty$.
A questo punto posso applicare su ogni punto di interfaccia la continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima. Ottengo delle relazioni tra i coefficienti complessi delle varie combinazioni lineari.
Se faccio attenzione a chiamare A (B) il coefficiente del primo blocco corrispondente ad un esponenziale entrante (uscente) ed anche C (D) il coefficiente dell'ultimo blocco corrispondente ad un esponenziale uscente (entrante) nella regione di scattering, posso definire i seguenti "coefficienti di scattering" per le ampiezze:

- riflettività $r \equiv \frac{B}{A}\Big|_{D=0}$
- trasmittività $t \equiv \frac{C}{A}\Big|_{D=0}$
- antiriflettività $\tilde{r} \equiv \frac{C}{D}\Big|_{A=0}$
- antitrasmittività $\tilde{t} \equiv \frac{B}{D}\Big|_{A=0}$

Si definiscono inoltre i seguenti "coefficienti di scattering" per le correnti:

- Coefficiente di riflessione $R \equiv \frac{|j_{\text{riflessa verso SX}}|}{|j_{\text{incidente da SX}}|}$
- Coefficiente di trasmissione $T \equiv \frac{|j_{\text{trasmessa verso DX}}|}{|j_{\text{incidente da SX}}|}$
- Coefficiente di antiriflessione $\tilde{R} \equiv \frac{|j_{\text{riflessa verso DX}}|}{|j_{\text{incidente da DX}}|}$
- Coefficiente di antitrasmissione $\tilde{T} \equiv \frac{|j_{\text{trasmessa verso SX}}|}{|j_{\text{incidente da DX}}|}$

Ritardo quantistico

Dato un pacchetto d'onda

$$\psi_{incidente}(x,t) = \int dk f(k) e^{ikx - i\omega t} \tag{5.13}$$

dove $f(k)$ é una funzione piccata intorno a k_0.
Per il principio di fase stazionaria abbiamo che il pacchetto é centrato in

$$\frac{d}{dk}(ikx - i\omega t)\bigg|_{k_0} = 0 \Rightarrow x = \frac{d\omega}{dk}\bigg|_{k_0} t = v_g t \tag{5.14}$$

Se a seguito di un processo di scattering ci troviamo un pacchetto riflesso ed uno trasmesso, il pacchetto d'onda riflesso sarà dato da

$$\psi_{riflesso}(x,t) = \int dkrf(k)e^{-ikx-i\omega t} = \int dk|r|e^{i\varphi_r}f(k)e^{-ikx-i\omega t} \tag{5.15}$$

ancora per il principio di fase stazionaria

$$\frac{d}{dk}(-ikx - i\omega t + i\varphi_r)\bigg|_{k_0} = 0 \Rightarrow x = -\frac{d\omega}{dk}\bigg|_{k_0} t + \frac{d\varphi_k}{dk}\bigg|_{k_0} = -v_g t + \frac{d\varphi_r}{dk}\bigg|_{k_0} \tag{5.16}$$

Il pacchetto d'onda trasmesso sarà dato da

$$\psi_{trasmesso}(x,t) = \int dktf(k)e^{ikx-i\omega t} = \int dk|t|e^{i\varphi_t}f(k)e^{ikx-i\omega t} \tag{5.17}$$

ancora per il principio di fase stazionaria

$$\frac{d}{dk}(ikx - i\omega t + i\varphi_t)\bigg|_{k_0} = 0 \Rightarrow x = \frac{d\omega}{dk}\bigg|_{k_0} t - \frac{d\varphi_t}{dk}\bigg|_{k_0} = v_g t - \frac{d\varphi_t}{dk}\bigg|_{k_0} \tag{5.18}$$

Sia il pacchetto riflesso che quello trasmesso si presentano ritardati rispettivamente di una distanza $\frac{d\varphi_r}{dk}\Big|_{k_0}$ e di una distanza $\frac{d\varphi_t}{dk}\Big|_{k_0}$, con $\varphi_r = \arg[r]$, $\varphi_t = \arg[t]$.

5.2 Esercizio # 1: Gradino semplice di potenziale - generalità

Sia dato il potenziale costante a tratti

$$\begin{cases} 0 & \textbf{se } x < 0 \\ U & \textbf{se } x \geq 0 \end{cases} \tag{5.19}$$

Trovare il coefficiente di trasmissione T ed il coefficiente di riflessione R.

SOLUZIONE: Se $E > U$

$$T = \frac{4\frac{k_2}{k_1}}{\left[1 + \frac{k_2}{k_1}\right]^2} \qquad R = 1 - T \tag{5.20}$$

con $\frac{k_2}{k_1} = \sqrt{1 - \frac{U}{E}}$.
Se $E < U$.

$$T = 0 \qquad R = 1 \tag{5.21}$$

5.3 Esercizio # 2: Gradino semplice di potenziale

Un fascio di elettroni di densità $\rho = 10^{15}$ elettroni al metro viene accelerato da un potenziale di $100\,\mathrm{V}$. La corrente risultante sbatte su un gradino di potenziale di $50\,\mathrm{eV}$ di altezza. Trovare: i) la corrente incidente, ii) la corrente riflessa, iii) la corrente trasmessa.

SOLUZIONE:

Gli elettroni che compongono il fascio hanno un'energia $E = 100\,\mathrm{eV}$. Trovo la velocità v

$$v = \sqrt{\frac{2E}{m}} = 5.93 \times 10^6\,\frac{\mathrm{m}}{\mathrm{s}} \tag{5.22}$$

La corrente incidente é

$$i_{inc} = \rho(-e)v = -950\,\mathrm{A} \tag{5.23}$$

Trovo R, T usando le formule del gradino con $E > U$.

$$R = \frac{3 - 2\sqrt{2}}{3 + 2\sqrt{2}} = 3\% \tag{5.24}$$

$$T = \frac{4\sqrt{2}}{3 + 2\sqrt{2}} = 97\% \tag{5.25}$$

Quindi

$$i_{rifl} = -28.5\,\mathrm{A} \tag{5.26}$$

$$i_{tr} = -921.5\,\mathrm{A} \tag{5.27}$$

5.4 Esercizio # 3a: Gradino semplice di potenziale

Un fascio di elettroni di energia E si infrange su un gradino semplice di potenziale di altezza $2E$. In quale punto della zona classicamente vietata (misurata a partire dal gradino) la densità di particelle é metà di quella incidente?

SOLUZIONE:

$$\rho_{inc} = |A|^2 \tag{5.28}$$

$$\rho_{tr} = |C|^2 e^{-2\kappa x} \tag{5.29}$$

Il problema chiede quando $\rho_{tr} = 0.5\rho_{inc}$

$$|C|^2 e^{-2\kappa x} = \frac{1}{2}|A|^2 \tag{5.30}$$

Essendo

$$\frac{|C|^2}{|A|^2} = \left|\frac{2}{1+i\frac{\kappa}{k}}\right|^2 = \frac{4k^2}{k^2+\kappa^2} \tag{5.31}$$

$$x = \frac{1}{2\kappa}\ln\left(\frac{8k^2}{k^2+\kappa^2}\right) \tag{5.32}$$

$$\kappa = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \tag{5.33}$$

$$k = \kappa \tag{5.34}$$

Risultato:

$$x = \frac{1}{2\kappa}\ln(4) \tag{5.35}$$

5.5 Esercizio # 3b: Gradino semplice di potenziale

Un fascio di elettroni di energia E si infrange su un gradino semplice di potenziale di altezza $2E$. In quale punto della zona classicamente vietata (misurata a partire dal gradino) la densità di particelle si é ridotta della metà?

SOLUZIONE:

$$\rho_{tr}(x) = |C|^2 \, e^{-2\kappa x} \tag{5.36}$$

Il problema chiede quando $\rho_{tr}(x) = 0.5\rho_{tr}(0)$

$$|C|^2 \, e^{-2\kappa x} = 0.5 \, |C|^2 \tag{5.37}$$

Il coefficiente C si semplifica

$$x = \frac{1}{2\kappa} \ln(2) \tag{5.38}$$

5.6 Esercizio # 4: Barriera di potenziale - generalità

Sia dato il potenziale costante a tratti

$$\begin{cases} 0 & \textbf{se } x < -a \\ U & \textbf{se } -a \le x < a \\ 0 & \textbf{se } x \ge a \end{cases} \tag{5.39}$$

Trovare il coefficiente di trasmissione T.

SOLUZIONE: Se $E > U$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4}\frac{U^2}{E\,(E-U)}\sin^2(2k_2a) \qquad\qquad R = 1 - T \tag{5.40}$$

con $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E-U)}{\hbar^2}}$.
Se $E < U$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4}\frac{U^2}{E\,(U-E)}\sinh^2(2\kappa_2a) \qquad\qquad R = 1 - T \tag{5.41}$$

con $\kappa_2 = \sqrt{\frac{2m(U-E)}{\hbar^2}}$

5.7 Esercizio # 5: Barriera di potenziale

Un fascio di elettroni é diretto verso una barriera di potenziale ampia $4.5\,$Å. Il coefficiente di trasmissione T mostra un terzo massimo ad una energia del fascio pari a $E = 100\,$eV. Trovare l'altezza della barriera.

SOLUZIONE:

$$2ak_2 = \pi n \tag{5.42}$$

sostiuisco a k_2 la sua espressione

$$E - U = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{(2a)^2 2m} \tag{5.43}$$

$$U = 83.29\,\mathrm{eV} \tag{5.44}$$

5.8 Esercizio # 6: Barriera di potenziale

Un fascio di elettroni incide su una barriera di potenziale di $10\,\mathrm{V}$. Se si utilizza un fascio di energia $E = 10\,\mathrm{eV}$, si misura un coefficiente di trasmissione pari a $T = 3.37 \times 10^{-3}$. Trovare l'ampiezza della barriera.

SOLUZIONE:

Fare il limite

$$\lim_{E \to U^+} T(E) = 3.37 \times 10^{-3} \tag{5.45}$$

Utilizzare per $T(E)$ la relazione valida per $E > U$.
Nel fare il limite utilizzare la formula: $\sin(x) = x$ valida per $x \ll 0$. Da qui trovare $2a$.

5.9 Esercizio # 7: Buca di potenziale a pareti finite- generalità

Sia dato il potenziale costante a tratti

$$\begin{cases} 0 & \textbf{se } x < -a \\ -|U| & \textbf{se } -a \leq x < a \\ 0 & \textbf{se } x \geq a \end{cases} \tag{5.46}$$

Trovare il coefficiente di trasmissione T.

SOLUZIONE: Se $E > 0$

$$\frac{1}{T} = 1 + \frac{1}{4} \frac{U^2}{E\,(E + |U|)} \sin^2(2k_2 a) \tag{5.47}$$

con $k_2 = \sqrt{\frac{2m(E+|U|)}{\hbar^2}}$.
Se $E < 0$ non c'é scattering.

5.10 Esercizio # 8: Buca di potenziale

Parlando di scattering di un fascio di elettroni da una buca di potenziale, uno studente afferma che il coefficiente di trasmissione T corrisponde al prodotto T_1T_2, dove T_1 (T_2) é il coefficiente di trasmissione relativo alla prima (seconda) interfaccia. A supporto di tale congettura lo studente afferma che la corrente trasmessa dalla prima interfaccia corrisponde a T_1j_{inc}, dunque, dopo la seconda interfaccia la corrente trasmessa risulta essere $T_2T_1j_{inc}$. Qual é l'assunzione sbagliata dello studente?

5.11 Esercizio # 9: Ritardo quantistico

Esiste ritardo quantistico nella riflessione di un pacchetto di elettroni che incide su un gradino semplice di potenziale? Motivare la risposta.

SOLUZIONE:

Dipende da E:
Per $E > U$.

$$r = \frac{1 - \frac{k_2}{k_1}}{1 + \frac{k_2}{k_1}} \tag{5.48}$$

$$\varphi_r = \arg(r) = 0 \tag{5.49}$$

non vi é dunque ritardo quantistico in riflessione in quanto

$$\Delta_r = \left. \frac{d\varphi_r}{dk} \right|_{k_0} = 0 \tag{5.50}$$

Per $E < U$.

$$r = \frac{k - i\kappa}{k + i\kappa} \tag{5.51}$$

$$\varphi_r = \arg(r) = -2 \arctan\left(\frac{\kappa}{k}\right) \tag{5.52}$$

$$\Delta_r = \left. \frac{d\varphi_r}{dk} \right|_{k_0} = \frac{d}{dE}\left[-2\arctan\left(\frac{\kappa}{k}\right)\right] \frac{dE}{dk} = \frac{2}{\kappa} \tag{5.53}$$

Il pacchetto risulta ritardato di una distanza Δ_r, o equivalentemente di un tempo τ_r pari a

$$\tau_r = \frac{\Delta_r}{v_g} \tag{5.54}$$

dove la velocità di gruppo è

$$v_g = \sqrt{\frac{2E}{m}} \tag{5.55}$$