Enrico Borghi

Richiami a studi presenti in "fisicarivisitata"

Leggendo "Particella soggetta a potenziale costante a tratti: descrizioni classica e quantistica" si incontrano richiami ai seguenti studi

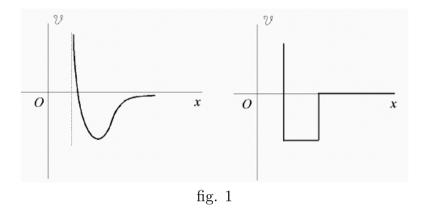
- (a) Reinterpretare l'Elettromagnetismo maxwelliano per spiegare la Meccanica quantistica
- (b) Elettromagnetismo maxwelliano e fenomeni luminosi Prima Parte

che fanno parte di "fisicarivisitata" e che devono essere ben noti a chi si interessa alla descrizione della dinamica di una particella soggetta a potenziale costante a tratti seguendo la presentazione che di questo argomento viene data in questo studio.

L'equazione di Schrödinger, nella quale compare una energia potenziale \mathcal{V} che può assumere una espressione qualsiasi, presenta il più delle volte notevoli problemi di integrazione.

E per questo motivo che fra le possibili forme di \mathcal{V} è conveniente studiare quelle in cui \mathcal{V} è costante a tratti: infatti in questi casi l'equazione diviene relativamente facile da integrare e questo tipo di energia potenziale si presta a rappresentare (approssimativamente) molte situazioni fisiche reali.

Ad esempio l'energia potenziale del sistema composto da due particelle può avere la forma del tipo indicata nella parte sinistra della fig. 1, corrispondente a repulsione quando le particelle sono molto vicine e ad attrazione quando tendono ad allontanarsi.

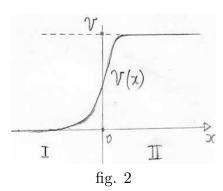


Ebbene una $\mathcal{V}(x)$ costante a tratti che si avvicina a questa è quella indicata nella parte destra della fig. 1 che dà origine a una equazione di Schrödinger relativamente facile da trattare.

In questo studio prenderemo in esame il moto unidimensionale di una particella soggetta a tre tipi diversi di potenziale costante a tratti, il primo detto gradino di potenziale, il secondo barriera di potenziale, il terzo buca di potenziale di altezza infinita.

A) GRADINO DI POTENZIALE

Una particella di massa m_0 ed energia totale \mathcal{E} è in moto rettilineo lungo l'asse x nel verso delle x crescenti, provenendo da $x = -\infty$. La particella si muove di moto uniforme fino a che, in prossimità di x = 0, incontra una rampa di potenziale $\mathcal{V}(x)$ come illustrato in fig. 2:



In corrispondenza della rampa il moto della particella rimane rettilineo ma diviene non più uniforme perché è rallentato dalla forza $-\partial \mathcal{V}/\partial x$ contraria al verso del moto (potenziale $\mathcal{V}(x)$ crescente, derivata positiva).

Secondo la Meccanica classica la particella, in avvicinamento alla rampa da $x=-\infty$ con momento costante

$$p^{I} = \sqrt{2m_0 \mathcal{E}} \tag{1}$$

riesce a superare la rampa e a proseguire verso $x = +\infty$ con momento costante

$$p^{II} = \sqrt{2m_0(\mathcal{E} - \mathcal{V})} \tag{2}$$

se è dotata di energia totale $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 > \mathcal{V}$, mentre non riesce a superarla ed è respinta verso $x = -\infty$ se è dotata di energia totale $\mathcal{E} = \mathcal{E}_2 < \mathcal{V}$. Non esiste, oltre a questi due, alcun altro movimento né sono ipotizzabili altre modalità di comportamento della particella.

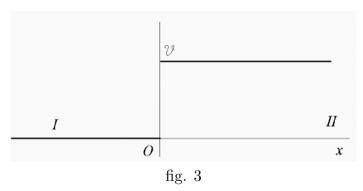
Nella Meccanica di Schrödinger occorre integrare l'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2 \psi(x,t)}{\partial x^2} + \mathcal{V}(x)\psi(x,t) - i\hbar\frac{\partial \psi(x,t)}{\partial t} = 0 \quad ; \quad [\psi] = L^{-\frac{1}{2}}$$
 (3)

con una $\mathcal{V}(x)$ che può essere approssimata (v. fig. 3) da

$$V(x) = 0 \text{ per } x < 0 \text{ (regione I)}$$

$$V(x) = V \text{ per } x > 0 \text{ (regione II)}$$
(4)



Ora dovremmo, in analogia con quanto si è fatto nel cap. 1.3 della Seconda Parte dello studio (a), introdurre un pacchetto d'onde che descriva lo stato quantistico della particella incidente da sinistra contro il gradino di potenziale.

Riesce tuttavia più comodo riferirsi a una sola delle componenti stazionarie in cui il pacchetto d'onde può essere scomposto, e cioè considerare una funzione d'onda del tipo

$$\psi(x,t) = u(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} \tag{5}$$

Questa ψ è associabile a una particella con energia ben definita, e quindi con momento altrettanto ben definito, cosicché per il Principio di Indeterminazione la posizione della particella sull'asse x è del tutto imprecisata. Inoltre la particella, come si è detto, si trova in uno stato stazionario al quale corrisponde una densità di probabilità di posizione $\psi^*\psi=u(x)u^*(x)$ indipendente dal tempo. Ciò significa che la probabilità $\psi^*\psi dx$ che la particella si trovi nell'intervallo compreso fra x e x+dx non varia col tempo, il che è ovviamente in contrasto col fatto che stiamo considerando una particella in moto da $-\infty$ a $+\infty$.

In conclusione, se ci basiamo sulla (5) invece che su un pacchetto d'onde vi potrà essere, durante lo studio di questo sistema meccanico, una qualche difficoltà di interpretazione fisica che è tuttavia largamente compensata dalla semplicità che ne consegue e che non impedisce, comunque, di evidenziare importanti proprietà quantistiche del sistema che stiamo studiando.

Infine, in ogni caso, si può dimostrare che le considerazioni che faremo su un solo elemento del pacchetto d'onde sono in accordo con quelle che si possono fare sull'intero pacchetto.

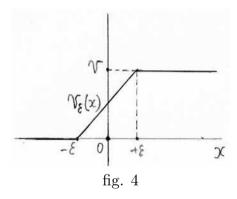
Sostituendo la (5) nella (3) e tenendo conto della (4) si ottiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2 \psi^I}{\partial x^2} - i\hbar \frac{\partial \psi^I}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial^2 u^I}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\mathcal{E}u^I = 0 \quad per \quad x < 0$$
 (6)

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0}\frac{\partial^2 \psi^{II}}{\partial x^2} + \mathcal{V}\psi^{II} - i\hbar\frac{\partial \psi^{II}}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial^2 u^{II}}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2}(\mathcal{E} - \mathcal{V})u^{II} = 0 \quad per \quad x > 0 \tag{7}$$

Si tratta ora di integrare le equazioni in u^I e u^{II} con opportune condizioni al contorno. A questo proposito sappiamo già dal par. 1.2.7 della Seconda Parte dello studio (a) che in qualsiasi sistema meccanico sia la ψ che la $\partial \psi/\partial x$ devono essere continue in tutto il loro dominio di definizione.

Può tuttavia essere interessante ritrovare queste condizioni facendo riferimento esplicito al sistema meccanico che stiamo studiando. A questo fine iniziamo col considerare un'energia potenziale come in fig. 4.



L'equazione di Schrödinger per la particella soggetta a $\mathcal{V}_{\varepsilon}(x)$ è:

$$\frac{\partial^2 u_{\varepsilon}}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} (\mathcal{E} - \mathcal{V}_{\varepsilon}(x)) u_{\varepsilon} = 0$$

Integriamo questa espressione nell'intervallo $-\varepsilon \mapsto +\varepsilon$:

$$\int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} \frac{\partial^2 u_{\varepsilon}}{\partial x^2} dx = \frac{2m_0}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} (\mathcal{V}_{\varepsilon}(x) - \mathcal{E}) u_{\varepsilon} dx = 0$$

da cui

$$\left. \frac{\partial u_{\varepsilon}}{\partial x} \right|_{x=+\varepsilon} - \left. \frac{\partial u_{\varepsilon}}{\partial x} \right|_{x=-\varepsilon} = \frac{2m_0}{\hbar^2} \int_{-\varepsilon}^{+\varepsilon} (\mathcal{V}_{\varepsilon}(x) - \mathcal{E}) u_{\varepsilon} dx \tag{8}$$

Al tendere di ε a zero l'integrale a membro destro, poiché $\mathcal{V}_{\varepsilon}(x)$ rimane limitato, tende anch'esso a zero. Poiché a membro sinistro vi è la differenza fra la derivata sinistra e la derivata destra di u_{ε} in x=0, la (8) mostra che tali derivate sono uguali, perciò la $\partial u_{\varepsilon}/\partial x$ è continua nell'origine. Ne segue che anche la u_{ε} deve essere continua, perciò le condizioni al contorno per la u sono

$$u^{I}(0) = u^{II}(0) \tag{9}$$

$$\left. \frac{\partial u^I}{\partial x} \right|_{x=0} = \left. \frac{\partial u^{II}}{\partial x} \right|_{x=0} \tag{10}$$

in accordo con quanto si è detto nel par. 1.2.7 della Seconda Parte dello studio (a).

Effettuiamo ora l'integrazione delle (6) e (7) distinguendo due casi, a seconda che l'energia totale della particella sia maggiore o minore di \mathcal{V} .

 $\underline{1^{\circ} \text{caso}}$ $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 > \mathcal{V}$; $p^I = p_1^I$; $p^{II} = p_1^{II}$ Le due equazioni (6) e (7) si integrano facilmente e si trova

$$u^{I} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}_1}x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}_1}x} \tag{11}$$

$$u^{II} = Ce^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0(\mathcal{E}_1 - \mathcal{V})}x} + De^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0(\mathcal{E}_1 - \mathcal{V})}x}$$
(12)

dove A, B, C, D sono costanti arbitrarie da determinare. Tenendo conto delle (1) e (2) e imponendo le condizioni (9) e (10) sulle (11) e (12) si ricava:

$$A + B = C + D \tag{13}$$

$$p_1^I(A - B) = p_1^{II}(C - D)$$
(14)

Si tratta di due equazioni nelle quattro incognite A, B, C, D. Due di queste sono tuttavia determinabili sulla base di alcune considerazioni, come ora vedremo. Sostituendo le (11) e (12) nella (5) si ottiene:

$$\psi^{I}(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{1}t - p_{1}^{I}x)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{1}t + p_{1}^{I}x)}$$
(15)

$$\psi^{II}(x,t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_1 t - p_1^{II} x)} + De^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_1 t + p_1^{II} x)}$$
(16)

La funzione d'onda (15), definita nella regione I, è la somma di una componente

$$Ae^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_1t+p_1^Ix}$$

associata a una particella avente momento $+p_1^I$ e di una componente

$$Be^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_1t-p_1^Ix}$$

associata a una particella avente momento $-p_1^I$.

Ciò significa che nella regione I esiste una ampiezza di probabilità che vi sia, oltre a una particella in movimento verso il gradino di potenziale, anche una particella in movimento dal gradino verso $x \to -\infty$, cioè una particella "riflessa" dal gradino, riflessa anche se l'energia \mathcal{E}_1 della particella incidente è maggiore di \mathcal{V} , un fatto, questo, che classicamente è impensabile e che pure la procedura generatrice dell'integrale generale soluzione dell'equazione di Schrödinger ci obbliga ad accettare. L'esistenza di una particella riflessa è dovuta al fatto che in corrispondenza del gradino la particella acquista energia potenziale $\mathcal{V}(x)$ che va a sommarsi a quella cinetica $\mathcal{T}(p)$, che diminuisce, in modo che la loro somma rimane invariata e uguale a \mathcal{E} . Ma gli addendi $\mathcal{T}(p)$ e $\mathcal{V}(x)$ di \mathcal{E} non possono essere definiti contemporaneamente con precisione (perché p e x non possono essere definiti contemporaneamente con precisione) ed è per questo che vi è una certa probabilità sia che \mathcal{T} superi \mathcal{V} , nel qual caso si ha trasmissione, sia che \mathcal{V} superi \mathcal{T} , e allora si ha riflessione.

Per ciò che riguarda la funzione d'onda definita nella regione II (eq. (16)), osserviamo che da $+\infty$ non proviene alcuna particella, perciò occorre porre D=0. Nella regione II esiste dunque solo una ampiezza di probabilità che sia presente una particella in movimento verso $+\infty$, che possiamo chiamare particella "trasmessa".

Fissata l'ampiezza A dell'onda associata alla particella incidente (il cui stato quantistico assumiamo che sia completamente noto) e posto D=0, le ampiezze B e C risultano essere univocamente determinate dalle (13) e (14):

$$B = \frac{p_1^I - p_1^{II}}{p_1^I + p_1^{II}} A \quad ; \quad C = \frac{2p_1^I}{p_1^I + p_1^{II}} A \tag{17}$$

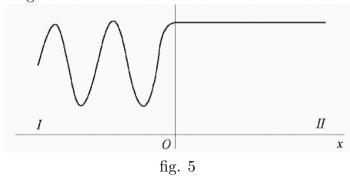
Calcoliamo la densità di probabilità. Nella regione I si trova (v. eq. (15))

$$\psi^{I}\psi^{I}(x)^{*} = AA^{*} + BB^{*} + AB^{*}e^{\frac{i}{\hbar}2p_{1}^{I}x} + BA^{*}e^{-\frac{i}{\hbar}2p_{1}^{I}x}
= AA^{*} + BB^{*} + AB^{*}e^{\frac{i}{\hbar}2p_{1}^{I}x} + \left(AB^{*}e^{\frac{i}{\hbar}2p_{1}^{I}x}\right)^{*}
= AA^{*} + BB^{*} + 2\Re\left\{AB^{*}e^{\frac{i}{\hbar}2p_{1}^{I}x}\right\}
= AA^{*} + BB^{*} + 2\Re\left\{AB^{*}\left(\cos\frac{2p_{1}^{I}x}{\hbar} + i\sin\frac{2p_{1}^{I}x}{\hbar}\right)\right\}$$
(18)

mentre nella regione II si ha (v. eq. (16))

$$\psi^{II}\psi^{II*}(x) = CC^* \tag{20}$$

come è indicato nella fig. 5:



Ci aspettiamo che in x = 0 sia

$$\psi^{I}\psi^{I^{*}}(0) = \psi^{II}\psi^{II^{*}}(0)$$

e infatti tenendo conto della (17) dalla quale si ricava

$$BB^* = \frac{(p_1^I - p_1^{II})^2}{(p_1^I + p_1^{II})^2} AA^* \quad ; \quad AB^* = \frac{p_1^I - p_1^{II}}{p_1^I + p_1^{II}} AA^* \quad ; \quad CC^* = \frac{4p^{I^2}}{(p^I + p^{II})^2} AA^*$$

è facile verificare che

$$\psi^{I}\psi^{I^{*}}(0) = AA^{*} + BB^{*} + 2AB^{*} = CC^{*} = \psi^{II}\psi^{II^{*}}(0)$$

Notiamo nella regione I l'effetto dell'interferenza della funzione d'onda associata alla particella avente momento $+p^I$ con la funzione d'onda associata alla particella avente momento $-p^I$; nella regione II la densità di probabilità è invece costante. Ciò significa che se effettuiamo numerose misure di posizione nella regione II inviando via via particelle da $-\infty$ e ripetendo così più volte l'esperimento, otteniamo una distribuzione di probabilità di posizione che è indipendente da x; se invece ripetiamo questo esperimento nella regione I, la distribuzione di probabilità di posizione della particella dipende cosinusoidalmente da x. In ogni caso, cioè quale che sia la regione in cui si effettua la misura, si osserva sempre una particella intera; non si osservano mai frazioni di particella riflessa e frazioni di particella trasmessa; ciò che il gradino di potenziale separa in parti trasmessa e riflessa non è la particella, ma è l'ampiezza di probabilità che la particella possa essere trovata nell'intorno di un punto dell'asse x dopo essere stata trasmessa o riflessa.

Per ciò che riguarda la densità di flusso (o densità di corrente) della probabilità di posizione espressa (v. par. 1.1 (sezione H) e par. 1.2.7 della Seconda Parte dello studio (a)) dalla quantità reale

$$j_x = \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} - \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \right)$$

che indichiamo più semplicemente con j, si ha

 $[j] = \frac{1}{L} \cdot LT^{-1} = densità \ di \ probabilità \cdot velocità = densità \ di \ flusso \ di \ probabilità$

e si può scrivere

$$j^{I} = \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\psi^{I} \frac{\partial \psi^{I^*}}{\partial x} - \psi^{I^*} \frac{\partial \psi^{I}}{\partial x} \right) = (AA^* - BB^*) \frac{p_1^{I}}{m_0}$$
 (21)

$$j_t^{II} = \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\psi^{II} \frac{\partial \psi^{II*}}{\partial x} - \psi^{II*} \frac{\partial \psi^{II}}{\partial x} \right) = CC^* \frac{p_1^{II}}{m_0}$$
 (22)

La quantità j^I è costituita di due parti:

$$j_i^I = AA^* \frac{p_1^I}{m_0} \tag{23}$$

e

$$j_r^I = -BB^* \frac{p_1^I}{m_0} \tag{24}$$

La (23) è la densità di flusso della probabilità di posizione incidente, mentre la (24) è la densità di flusso della probabilità di posizione riflessa. La (22) è la densità di flusso della probabilità di posizione trasmessa. Il rapporto

$$\left| \frac{j_r^I}{j_i^I} \right| = \frac{BB^*}{AA^*} \tag{25}$$

è detto coefficiente di probabilità di riflessione. Tenendo conto della (17) si può scrivere

$$\left| \frac{j_r^I}{j_i^I} \right| = \left(\frac{p_1^I - p_1^{II}}{p_1^I + p_1^{II}} \right)^2 = \frac{p^{I^2} + p^{II^2} - 2p^I p^{II} + 4p^{II} p^I - 4p^{II} p^I}{(p^I + p^{II})^2} = 1 - \frac{4p_1^I p_1^{II}}{(p_1^I + p_1^{II})^2}$$
(26)

Il rapporto

$$\left| \frac{j_t^{II}}{j_i^I} \right| = \frac{CC^*}{AA^*} \frac{p_1^{II}}{p_1^I} \tag{27}$$

è detto coefficiente di probabilità di trasmissione. Tenendo conto della (17) si può scrivere:

$$\left| \frac{j_t^{II}}{j_i^I} \right| = \frac{4p_1^I p_1^{II}}{(p_1^I + p_1^{II})^2} \tag{28}$$

La descrizione che la meccanica di Schrödinger dà di una particella che incontra un gradino di potenziale è analoga a quella che l'Elettromagnetismo dà di un'onda piana che incontra una discontinuità del dielettrico che sta attraversando.

 $\underline{2^{\circ} \text{caso}}$ $\mathcal{E} = \mathcal{E}_2 < \mathcal{V}$; $p^I = p_2^I$; $p^{II} = p_2^{II}$

La (6) rimane invariata così come la sua soluzione (11) salvo le sostituzioni $\mathcal{E}_2 \to \mathcal{E}_1$ e $p_2 \to p_1$.

In luogo della (7) occorre considerare

$$\frac{\partial^2 u^{II}}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} i^2 (\mathcal{E}_2 - \mathcal{V}) u^{II} = \frac{\partial^2 u^{II}}{\partial x^2} + \frac{i^2 p_2^{II^2}}{\hbar^2} u^{II} = 0 \quad per \quad x > 0$$
 (29)

dove notiamo che il momento ip_2^{II} della particella nella regione II è un numero immaginario.

Questa equazione ha soluzione

$$u^{II}(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x} + De^{-\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x}$$

Infatti

$$\begin{split} \frac{\partial u^{II}}{\partial x} &= C\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}e^{\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x} - D\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}e^{-\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x} \\ \frac{\partial^2 u^{II}}{\partial x^2} &= C\frac{i^2}{\hbar^2}i^2p_2^{II^2}e^{\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x} + D\frac{i^2}{\hbar^2}i^2p_2^{II^2}e^{-\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x} = C\frac{p_2^{II^2}}{\hbar^2}e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} + D\frac{p_2^{II^2}}{\hbar^2}e^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} \end{split}$$

cosicché la (29) viene soddisfatta

$$C\frac{p_2^{II^2}}{\hbar^2}e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}+D\frac{p_2^{II^2}}{\hbar^2}e^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}+\frac{i^2p_2^{II^2}}{\hbar^2}\Big(Ce^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}+De^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}\Big)=0$$

e quindi, in definitiva

$$u^{I} = Ae^{\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x} \tag{30}$$

$$u^{II} = Ce^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} + De^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$
 (31)

Valgono ancora le (9) e (10) cosicché:

$$A + B = C + D \tag{32}$$

$$ip_2^I(A-B) = -p_2^{II}C + p_2^{II}D$$
 (33)

Sono due equazioni nelle quattro incognite A, B, C, D. Due di queste sono tuttavia determinabili sulla base di alcune considerazioni, come ora vedremo. Sostituendo le (30) e (31) nella (5) si ottiene

$$\psi^{I} = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{2}t - p_{2}^{I}x)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{2}t + p_{2}^{I}x)}$$

$$\tag{34}$$

$$\psi^{II} = Ce^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_2 t} e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} + De^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_2 t} e^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$
(35)

Sulla ψ^I possono essere fatte considerazioni analoghe a quelle fatte per la ψ^I del 1° caso. Invece, per ciò che riguarda la ψ^{II} , i due termini di cui essa è composta non sono associabili a una particella in movimento nella regione II. Infatti, se riscriviamo la (35) in modo da farle assumere la usuale forma dell'ampiezza di probabilità associata a una particella in movimento nella regione II, otteniamo

$$\psi^{II} = Ce^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_2 t - ip_2^{II}x)} + De^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_2 t + ip_2^{II}x)}$$

nella quale compare il momento ip_2^{II} immaginario.

Inoltre il termine

$$De^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}_2 t} e^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$

tende all'infinito per $x \to +\infty$ e perciò occorre porre D=0.

Fissata nelle (32) e (33) l'ampiezza A dell'onda incidente e posto D=0, le ampiezze B e C risultano essere univocamente determinate:

$$B = \frac{p_2^I - ip_2^{II}}{p_2^I + ip_2^{II}} A \quad ; \quad C = \frac{2p_2^I}{p_2^I + ip_2^{II}} A \tag{36}$$

Esaminiamo ora il flusso della probabilità. La sua densità si ottiene osservando che per la regione I possiamo servirci della (21) sostituendo p_1^I con p_2^I mentre per la regione II, essendo

$$\psi^{II^*} = C^* e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$

$$\frac{\partial \psi^{II}}{\partial x} = -C \frac{p_2^{II}}{\hbar} e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$

e

$$\begin{split} \psi^{II} &= C e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} \\ \frac{\partial \psi^{II*}}{\partial x} &= -C^* \frac{p_2^{II}}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{E}t} e^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} \end{split}$$

risulta

$$\psi^{II} \frac{\partial \psi^{II*}}{\partial x} = \psi^{II*} \frac{\partial \psi^{II}}{\partial x}$$

perciò la densità del flusso della probabilità nelle due regioni è espressa da

$$j^{I} = \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\psi^{I} \frac{\partial \psi^{I^*}}{\partial x} - \psi^{I^*} \frac{\partial \psi^{I}}{\partial x} \right) = (AA^* - BB^*) \frac{p_2^{I}}{m_0}$$
 (37)

$$j^{II} = \frac{i\hbar}{2m_0} \left(\psi^{II} \frac{\partial \psi^{II^*}}{\partial x} - \psi^{II^*} \frac{\partial \psi^{II}}{\partial x} \right) = 0$$
 (38)

La quantità j^I è costituita di due parti:

$$j_i^I = AA^* \frac{p_2^I}{m_0} \quad ; \quad j_r^I = BB^* \frac{p_2^I}{m_0}$$
 (39)

identificabili, in accordo con quanto si è visto nel caso precedente, come densità di flusso di probabilità incidente e densità di flusso di probabilità riflessa.

Il coefficiente di probabilità di riflessione

$$\left| \frac{j_r^I}{j_i^I} \right| = \frac{BB^*}{AA^*}$$

diviene, tenendo conto della prima delle (36)

$$\left| \frac{j_r^I}{j_i^I} \right| = \frac{\frac{p_2^I - ip_2^{II}}{p_2^I + ip_2^{II}} A \frac{p_2^I + ip_2^{II}}{p_2^I - ip_2^{II}} A^*}{AA^*} = 1$$
(40)

Ciò significa che, in accordo con la (38), non vi è trasmissione di flusso di probabilità: il gradino riflette completamente il flusso incidente.

Calcoliamo la densità di probabilità. Si trova:

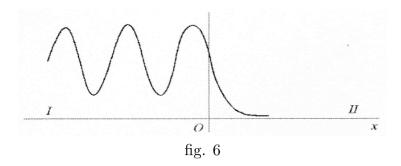
$$\psi^{I}\psi^{I^{*}}(x) = AA^{*} + BB^{*} + AB^{*}e^{2\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x} + BA^{*}e^{-2\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x}$$

$$= AA^{*} + BB^{*} + AB^{*}e^{2\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x} + \left(AB^{*}e^{2\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x}\right)^{*}$$

$$= AA^{*} + BB^{*} + 2\Re\left\{AB^{*}\left(\cos\frac{2p_{2}^{I}x}{\hbar} + i\sin\frac{2p_{2}^{I}x}{\hbar}\right)\right\}$$

$$\psi^{II}\psi^{II^{*}}(x) = CC^{*}e^{-\frac{2p_{2}^{II}}{\hbar}x}$$
(41)

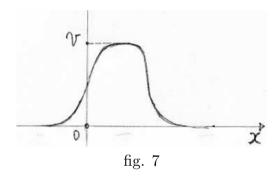
Si vede così che vi è una densità di probabilità non nulla di trovare la particella nella regione II, in cui il flusso di probabilità è nullo (v. fig. 6).



Questo fatto può sembrarci, in qualche misura, comprensibile se lo colleghiamo con un fenomeno elettromagnetico analogo descritto nella sezione F dello studio (b) dove viene introdotto il concetto di "onda evanescente", ma, se ragioniamo tenendo presenti le proprietà di un corpuscolo materiale classico, la sua possibile presenza nella regione II è inspiegabile.

B) BARRIERA DI POTENZIALE

Una particella di massa m_0 ed energia totale \mathcal{E} è in moto rettilineo lungo l'asse x nel verso delle x crescenti, provenendo da $x = -\infty$. La particella si muove di moto uniforme fino a che, in prossimità di x = 0, incontra una rampa di potenziale in salita seguita da una rampa in discesa come illustrato in fig. 7.



In corrispondenza della rampa in salita il moto della particella rimane rettilineo ma diviene non più uniforme perché la particella è rallentata dalla forza $-\partial \mathcal{V}/\partial x$ contraria al verso del moto $(\mathcal{V}(x))$ crescente, derivata positiva), mentre sulla rampa in discesa la particella è accelerata dalla forza $-\partial \mathcal{V}/\partial x$ nel verso del moto $(\mathcal{V}(x))$ decrescente, derivata negativa).

Secondo la Meccanica classica la particella, in avvicinamento alla barriera di potenziale da $x=-\infty$ con momento costante

$$p^I = \sqrt{2m_0 \mathcal{E}} \tag{43}$$

riesce a penetrare nella barriera, dove assume un momento costante

$$p^{II} = \sqrt{2m_0(\mathcal{E} - \mathcal{V})} \tag{44}$$

e ad attraversarla uscendo con momento costante uguale a quello di ingresso

$$p^{III} = p^I \tag{45}$$

se è dotata di energia $\mathcal{E}_1 > \mathcal{V}$, mentre non riesce a penetrare nella barriera e viene respinta verso $x = -\infty$ se è dotata di energia $\mathcal{E}_2 < \mathcal{V}$.

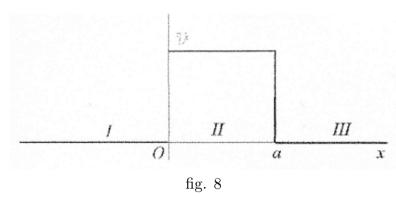
Nella Meccanica di Schrödinger occorre integrare la (3) con una $\mathcal{V}(x)$ che può essere approssimata (v. fig. 8) dalla

$$\mathcal{V}(x) = 0 \quad per \ x < 0 \ (regione \ I)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2 \psi^{II}}{\partial x^2} + \mathcal{V}(x)\psi^{II} - i\hbar \frac{\partial \psi^{II}}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \mathcal{V}(x) = \mathcal{V} \quad per \ 0 \le x \le a \ (regione \ II)$$

$$\mathcal{V}(x) = 0 \quad per \ x > a \ (regione \ III)$$

$$(46)$$



L'integrale è ancora del tipo (5), e valgono ancora le condizioni di continuità introdotte nel caso precedente. Sostituendo la (5) nella (3) e tenendo conto della (46) si ottiene:

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\frac{\partial^{2}\psi^{I}}{\partial x^{2}} - i\hbar\frac{\partial\psi^{I}}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial^{2}u^{I}}{\partial x^{2}} + \frac{2m_{0}}{\hbar^{2}}\mathcal{E}u^{I} = 0$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\frac{\partial^{2}\psi^{II}}{\partial x^{2}} + \mathcal{V}\psi^{II} - i\hbar\frac{\partial\psi^{II}}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial^{2}u^{II}}{\partial x^{2}} + \frac{2m_{0}}{\hbar^{2}}(\mathcal{E} - \mathcal{V})u^{II} = 0 \qquad (47)$$

$$-\frac{\hbar^{2}}{2m_{0}}\frac{\partial^{2}\psi^{III}}{\partial x^{2}} - i\hbar\frac{\partial\psi^{III}}{\partial t} = 0 \quad ; \quad \frac{\partial^{2}u^{III}}{\partial x^{2}} + \frac{2m_{0}}{\hbar^{2}}\mathcal{E}u^{III} = 0$$

Distinguiamo due casi, a seconda che l'energia \mathcal{E} sia maggiore o minore di \mathcal{V} .

$$\underline{1^{\circ} \text{caso}}$$
 $\mathcal{E} = \mathcal{E}_1 > \mathcal{V}$; $p^I = p_1^I$; $p^{II} = p_1^{II}$ Le soluzioni delle (47) sono:

$$u^{I} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}$$
$$u^{II} = Ce^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0(\mathcal{E}-\mathcal{V})}x} + De^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0(\mathcal{E}-\mathcal{V})}x}$$

$$u^{III} = Ee^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} + Fe^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}$$

Ora si tratta di determinare le costanti A, B, C, D, E, F.

Come nel par
. A, non vi sono particelle provenienti da $+\infty$ perciò
 F=0. Inoltre occorre che

$$u^{I}(0) = u^{II}(0)$$

$$\frac{\partial u^{I}}{\partial x}\Big|_{x=0} = \frac{\partial u^{II}}{\partial x}\Big|_{x=0}$$

$$u^{II}(a) = u^{III}(a)$$

$$\frac{\partial u^{II}}{\partial x}\Big|_{x=a} = \frac{\partial u^{III}}{\partial x}\Big|_{x=a}$$

$$(49)$$

(48)

Si ottiene così dalle (48), tenendo presenti le (43), (44) e (45) e ponendo F = 0,

$$A + B = C + D$$

$$p_{1}^{I}(A - B) = p_{1}^{II}(C - D)$$

$$Ce^{\frac{i}{\hbar}p_{1}^{II}a} + De^{-\frac{i}{\hbar}p_{1}^{II}a} = Ee^{\frac{i}{\hbar}p_{1}^{I}a}$$

$$p_{1}^{II}\left(Ce^{\frac{i}{\hbar}p_{1}^{II}a} - De^{-\frac{i}{\hbar}p_{1}^{II}a}\right) = p_{1}^{I}Ee^{\frac{i}{\hbar}p_{1}^{I}a}$$
(50)

Si tratta di quattro equazioni in cinque incognite. Una volta fissata l'ampiezza A della funzione d'onda associata alla particella incidente, le quattro costanti B, C, D, E risultano essere completamente determinate. Inserendo le (48) nella (5) si ottengono le seguenti ampiezze di probabilità

$$\psi^{I}(x,t) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{1}t - p_{1}^{I}x)} + Be^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_{1}t + p_{1}^{I}x)}$$

$$\tag{51}$$

$$\psi^{II}(x,t) = Ce^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_1 t - p_1^{II} x)} + De^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_1 t + p_1^{II} x)}$$
(52)

$$\psi^{III}(x,t) = Ee^{-\frac{i}{\hbar}(\mathcal{E}_1 t - p_1^I x)} \tag{53}$$

in funzione delle quali si può ottenere la densità di flusso della probabilità di posizione nelle regioni I e III:

$$j^{I} = \frac{i\hbar}{2m_{0}} \left(\psi^{I} \frac{\partial \psi^{I}}{\partial x}^{*} - \psi^{I*} \frac{\partial \psi^{I}}{\partial x} \right)$$
$$j_{t}^{III} = \frac{i\hbar}{2m_{0}} \left(\psi^{III} \frac{\partial \psi^{III}}{\partial x}^{*} - \psi^{III*} \frac{\partial \psi^{III}}{\partial x} \right)$$

Si può così calcolare il coefficiente di probabilità di trasmissione (v., ad esempio, R. Becker, "Electromagnetic fields and interactions" - vol. II, Chapter B1, par. 16):

$$\left| \frac{j_t^{III}}{j_i^I} \right| = \frac{EE^*}{AA^*} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{\mathcal{V}^2}{\mathcal{E}_1(\mathcal{E}_1 - \mathcal{V})} \sin^2 \frac{\sqrt{2m_0(\mathcal{E}_1 - \mathcal{V})}}{\hbar} a}$$
 (54)

 $\underline{2^{\circ} \text{caso}} \; \mathcal{E} = \mathcal{E}_2 < \mathcal{V} \quad ; \quad p^I = p_2^I \quad ; \quad p^{II} = p_2^{II}$

La prima delle (48) rimane invariata salvo le sostituzioni $\mathcal{E}_2 \to \mathcal{E}_1$ e $p_2 \to p_1$. La seconda diviene:

$$u^{II}(x) = Ce^{\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x} + De^{-\frac{i}{\hbar}ip_2^{II}x}$$

ovvero

$$u^{II}(x) = Ce^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} + De^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$

Nella terza occorre porre F=0. Si ottiene così in definitiva:

$$u^{I}(x) = Ae^{\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}x}$$
 (55)

$$u^{II}(x) = Ce^{-\frac{p_2^{II}}{\hbar}x} + De^{\frac{p_2^{II}}{\hbar}x}$$
 (56)

$$u^{III}(x) = Ee^{\frac{i}{\hbar}p_2^I x} \tag{57}$$

Le (49) diventano

$$A + B = C + D$$

$$ip_{2}^{I}(A - B) = p_{2}^{II}(C - D)$$

$$Ce^{-\frac{p_{2}^{II}}{\hbar}a} + De^{\frac{p_{2}^{II}}{\hbar}a} = Ee^{\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}a}$$

$$-p_{2}^{II}\left(Ce^{-\frac{i}{\hbar}p_{2}^{II}a} - De^{\frac{i}{\hbar}p_{2}^{II}a}\right) = ip_{2}^{I}e^{\frac{i}{\hbar}p_{2}^{I}a}$$
(58)

Anche in questo caso, una volta fissata l'ampiezza A della funzione d'onda incidente, risultano determinate tutte le altre ampiezze.

Si può così calcolare il coefficiente di probabilità di trasmissione

$$\left| \frac{j_t^{III}}{j_i^I} \right| = \frac{EE^*}{AA^*} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \frac{\mathcal{V}^2}{\mathcal{E}_2(\mathcal{V} - \mathcal{E}_2)} \sinh^2 \frac{\sqrt{2m_0(\mathcal{V} - \mathcal{E}_2)}}{\hbar} a}$$
 (59)

e si può constatare che vi è una trasmissione di flusso di probabilità che diminuisce all'aumentare della spessore a della barriera, oltre che all'aumentare della energia \mathcal{V} .

Dunque vi è una probabilità non nulla che la particella incidente riesca a superare la barriera e a proseguire nel suo movimento verso $+\infty$ anche se la sua energia $\mathcal E$ è inferiore all'energia potenziale $\mathcal V$ della barriera, diversamente da ciò che succede nel caso del gradino di potenziale nel quale la particella dotata di energia $\mathcal E$ inferiore all'energia potenziale del gradino, pur avendo una probabilità non nulla di superare il gradino, non può proseguire nel suo movimento verso $+\infty$ perché non vi è trasmissione di flusso di probabilità (v. eq. (40)) cosicché si mantiene confinata in una ristretta zona a valle del gradino.

La descrizione che la Meccanica quantistica dà di una particella che incontra una barriera di potenziale si adatta bene a descrivere il fenomeno del decadimento radioattivo dei nuclei atomici instabili.

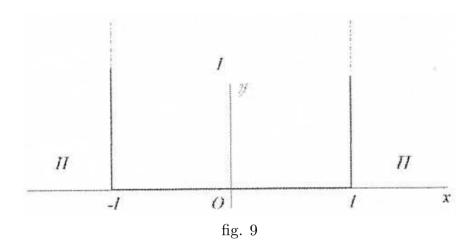
Questi nuclei, come è noto, emettono particelle α , atomi di elio doppiamente ionizzati, un fatto inspiegabile nell'ambito della Meccanica classica, perché l'energia che una particella α possiede è molto minore della altezza della barriera di potenziale che la lega al nucleo, cosicché la particella non potrebbe mai allontanarsi da esso.

In Meccanica quantistica, invece, basta tener conto del fatto che il rapporto espresso dalla (59) è diverso da zero, il che significa che esiste una probabilità non nulla che una particella α attraversi la barriera e si allontani dal nucleo.

Questo fenomeno è noto col nome di effetto tunnel.

C) BUCA DI POTENZIALE SIMMETRICA DI ALTEZZA INFINITA

Una particella di massa m_0 ed energia \mathcal{E} è vincolata da due barriere di potenziale di altezza infinita (v. fig. 9) a rimanere sull'asse x in un intorno dell'origine compreso fra -l e +l.



Si ha quindi

$$V(x) = 0 \ per \ |x| < l \ (regione \ I)$$

$$V(x) \to \infty \ per \ |x| > l \ (regione \ II)$$
 (60)

Secondo la Meccanica classica la particella è costretta a rimanere entro la buca. In Meccanica di Schrödinger occorre integrare la (3) con V(x) espresso dalla (60). Assumiamo un integrale del tipo (5). Sostituendolo nella (3) si ottiene

$$\frac{\partial^2 u^I}{\partial x^2} + \frac{2m_0}{\hbar^2} \mathcal{E} u^I = 0$$

La soluzione per la regione I è

$$u^{I} = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} + Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}$$

$$\tag{61}$$

mentre per la regione II, se si assume che la descrizione che la Meccanica di Schrödinger dà di una particella in una buca di potenziale con barriere di altezza infinita sia analoga a quella che l'Elettromagnetismo dà del campo elettromagnetico contenuto in una cavità con pareti non attraversabili dalla radiazione, si ha:

$$u^{II} = 0 (62)$$

perciò la particella è costretta a rimanere nella buca anche secondo la Meccanica quantistica.

Per determinare A e B occorre imporre che la u^I si annulli in corrispondenza di x=+l e x=-l:

$$\begin{cases} u^{I}(l) = Ae^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}l} + Be^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}l} = 0\\ u^{I}(-l) = Ae^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}l} + Be^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}l} = 0 \end{cases}$$

Sommando e sottraendo a membro a membro si ottiene

$$\begin{cases}
(A+B)\cos\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}}{\hbar}l = 0\\
(A-B)\sin\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}}{\hbar}l = 0
\end{cases}$$
(63)

Il sistema (63) è soddisfatto da

$$A = B \quad ; \quad \cos\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}}{\hbar}l = 0 \tag{64}$$

oppure da

$$A = -B \quad ; \quad \sin\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}}{\hbar}l = 0 \tag{65}$$

Si ottiene nel primo caso

$$\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}}{\hbar}l = (n + \frac{1}{2})\pi \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$
 (66)

mentre la (61) diviene

$$u_S^I(x) = A\left(e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} + e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}\right) = 2A\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} + e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}}{2} = 2A\cos\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}{\hbar}x$$

e infine, tenendo conto della (66)

$$u_S^I(x) = 2A\cos\frac{(2n+1)\pi}{2I}x$$
 (67)

Nel secondo caso si ha

$$\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}}{\hbar}l = n\pi \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$
 (68)

mentre la (61) diviene

$$u_A^I(x) = A\left(e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} - e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}\right) = 2A\frac{e^{\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x} - e^{-\frac{i}{\hbar}\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}}{2} = 2A\sin\frac{\sqrt{2m_0\mathcal{E}}x}{\hbar}x$$

e infine, tenendo conto della (68)

$$u_A^I(x) = 2A\sin\frac{n\pi}{l}x\tag{69}$$

L'indice S sta a significare "simmetrico" cioè $u_S^I(x)=u_S^I(-x)$, mentre l'indice A indica "antisimmetrico" cioè $u_A^I(x)=-u_A^I(-x)$. Ora osserviamo che dalla (66) si ottiene

$$\mathcal{E}_S = \frac{(n + \frac{1}{2})^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2} = \frac{(2n + 1)^2 \pi^2 \hbar^2}{8m_0 l^2} \quad ; \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

e dalla (68)

$$\mathcal{E}_A = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m_0 l^2} = \frac{(2n)^2 \pi^2 \hbar^2}{8m_0 l^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

perciò si può esprimere l'energia con una unica formula

$$\mathcal{E} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{8m_0 l^2} \quad ; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Suddividendo i numeri interi n nei numeri dispari n_d e nei numeri pari n_p si può anche scrivere

$$u^{I}(x) = \begin{cases} 2A\cos\frac{n\pi}{2l}x & ; & n = n_d = 1, 3, 5, \dots \\ 2A\sin\frac{n\pi}{2l}x & ; & n = n_p = 2, 4, 6, \dots \end{cases}$$
(70)

Per determinare la costante A si fa uso della condizione di normalizzazione

$$4A^2 \int_{-l}^{+l} \sin^2 \frac{n\pi}{l} x dx = 1$$

da cui

$$4A^{2} \left[\frac{1}{2}x - \frac{\sin 2n\pi x/l}{4n\pi/l} \right]_{-l}^{+l} = 4A^{2} \left(l - \frac{\sin 2n\pi}{2n\pi/l} \right) = 4A^{2}l = 1$$

e quindi

$$A = \frac{1}{2\sqrt{l}}$$