

Elettronica dello Stato Solido
Casi risolutivi dell'equazione di Schrödinger

<https://valerionew.github.io/triennale-elettronica-polimi/>

Valerio Nappi

AA 2019/20

Indice

1	Equazione di Schrödinger	2
1.1	Valore atteso	2
1.2	Operatori	3
1.3	Soluzione a variabili separate	4
1.4	Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo	5
2	Particella libera nel vuoto: onda viaggiante	5
3	Particella incidente su gradino di potenziale: onda stazionaria	6
3.1	Caso $E < V_0$	6
3.2	Caso $E > V_0$	7
4	Particella incidente su barriera di potenziale, interferenza, risonanza	8
4.1	Caso $E < V_0$	8
4.2	Caso $E > V_0$	9
5	Particella confinata in buca di potenziale infinita, autovalori	9
6	Particella confinata in buca di potenziale finita, soluzione grafica	9
7	Particella confinata in buca di potenziale infinita 2D	9
8	Doppia buca accoppiata	9

1 Equazione di Schrödinger

L'equazione di Schrödinger nella sua forma più generale si scrive:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t)$$

Dove $[\hat{H}]$ rappresenta l'operatore *Hamiltoniano* applicato alla funzione d'onda $\Psi(\vec{r}, t)$, l'*Hamiltoniano* è somma degli operatori energia cinetica $[\hat{T}]$ ed energia potenziale $[\hat{V}]$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$

Per una particella di massa

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}}{2m} + V(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t)$$

Si può quindi scrivere, nel caso più generale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(\vec{r}, t)$$

Si noti che in generale gli operatori non commutano con la funzione a cui sono applicati (cfr. 1.2).

In questo corso si trattano prevalentemente casi unidimensionali. Allora, l'equazione di Schrödinger si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) + V(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}(x, t)$$

1.1 Valore atteso

Definiamo il valore atteso di una $f(x)$ come:

$$\langle f(x) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) f(x) \Psi(x, t) dx$$

Ad esempio definiamo il valore atteso della posizione x :

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\Psi(x, t)|^2 dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx$$

È possibile utilizzare il valore atteso anche per operatori applicati ad x . Ad esempio la quantità di moto p_x **per una funzione d'onda di particella libera** ha operatore $\hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Si potrà allora scrivere:

$$\langle p_x \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) \hat{p}_x \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) dx \quad (p. \text{ libera})$$

1.2 Operatori

Come si è visto nella Sezione 1, esistono alcuni operatori applicabili alle funzioni d'onda per ottenere delle grandezze fisiche. Si scriva ad esempio l'equazione di una funzione d'onda che si propaga lungo x :

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

Considerando la derivata della $\Psi(x, t)$ lungo x , risulta:

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = ikAe^{i(kx - \omega t)} = i \frac{p_x}{\hbar} \Psi(x, t)$$

Si può quindi scrivere:

$$p_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t) = i\hat{p}_x \Psi(x, t) \quad \text{con} \quad \hat{p}_x = i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$$

1.2.1 Operatori utili

Operatore quantità di moto:

$$[\hat{p}_x] = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right] \quad (1)$$

Operatore energia totale:

$$[\hat{E}_{tot}] = \left[i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right] \quad (2)$$

Operatore energia cinetica:

$$[\hat{E}_k] = \left[-i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \quad (3)$$

Operatore energia potenziale:

$$[\hat{V}] = [V(x, t)] \quad (4)$$

Ricordando poi che $E_{tot} = E_k + V$ si può scrivere l'equazione di Schrödinger in formato operatoriale:

$$\hat{E}_{tot} = \hat{E}_k + \hat{V} \quad \implies \quad i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -i \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + V(x, t)$$

1.2.2 Commutazione di operatori

In generale non vale la proprietà commutativa tra due operatori. Si introduce allora l'operatore *Commutazione di operatori* che vale, per due operatori \hat{O} e \hat{P} :

$$[\hat{O}, \hat{P}] \Psi(x, t) = [\hat{O}\hat{P} - \hat{P}\hat{O}] \Psi(x, t) \stackrel{?}{=} 0$$

Se vale l'ultima relazione, si dice che gli operatori commutano. Si ricordi che **un operatore in generale non commuta** con la funzione $\Psi(x, t)$. Inoltre, se vale:

$$[\hat{O}\hat{P} - \hat{P}\hat{O}] = [\hat{R}]$$

Si dice che $[\hat{R}]$ è il commutatore degli operatori \hat{O} e \hat{P} .

1.2.3 Autofunzioni degli operatori

Detto \hat{O} un operatore, si chiama autofunzione, se esiste, la funzione ψ per cui vale:

$$\hat{O}\psi = \lambda\psi$$

con λ uno scalare, che prende il nome di *autovalore*.

Se due operatori commutano, hanno alcune autofunzioni in comune. Avere perfetta determinazione di una grandezza individuata da un operatore, significa avere perfettamente determinata anche un'altra grandezza il cui operatore commuta col primo.

Se il commutatore tra due operatori è **non nullo**, l'indeterminazione conseguente rappresenta il *Principio di indeterminazione di Heisenberg*

1.3 Soluzione a variabili separate

Si vuole risolvere l'equazione di Schrödinger. Si decide di cercare soluzioni a variabili separate, cioè nella forma:

$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \varphi(t)$$

Se $V(x, t) = V(x)$, allora è sempre possibile trovare le $\psi(x) \cdot \varphi(t)$. Infatti si può scrivere:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} \varphi(t) + V(x) \psi(x) \varphi(t) = i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \psi(x)$$

Dividendo ambo i membri per $\psi(x) \cdot \varphi(t)$ si ottiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) = i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = E$$

Dove il lato sinistro dipende solo dalla x e il lato destro solo dalla t , e sono di conseguenza entrambi uguali ad una costante E . Si scrive quindi:

$$\begin{cases} E \psi(x) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) \\ E \varphi(t) &= i\hbar \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} \end{cases}$$

Risolviendo per $\varphi(t)$ si ottiene:

$$\varphi(t) = \varphi(0)e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

Che costituisce quindi solo un termine di fase.

L'equazione per $\psi(x)$ prende invece il nome di *Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo*, e si presenta nella forma:

$$E\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + V(x)\psi(x) \quad (5)$$

1.4 Equazione di Schrödinger indipendente dal tempo

Si consideri ora la (5). Chiedersi quali funzioni risolvano l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo è equivalente a chiedersi quali siano le autofunzioni dell'operatore *Hamiltoniano* relative all'autovalore E :

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

Ci si riferirà spesso, allora, alla $\psi(x)$ semplicemente come all'*autofunzione*.

2 Particella libera nel vuoto: onda viaggiante

Si vuole risolvere l'equazione di Schrödinger per la funzione d'onda di una particella viaggiante liberamente nello spazio con $V(x)$ costante. Si disaccoppiano allora le componenti dipendente dal tempo e dipendente dallo spazio, scrivendo: $\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \varphi(t)$. Si ricorda che la soluzione nel tempo risulta:

$$\varphi(t) = \varphi(0)e^{-i\frac{E}{\hbar}t} = \varphi(0)e^{-i\omega t} \quad (6)$$

Si cercano allora le autofunzioni di $\hat{H}\psi(x) = E\psi(x)$. Il potenziale è costante, ed essendo significativo a meno di una costante, può essere assunto nullo. Si ottiene quindi :

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x)$$

Riscritta nella forma $\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) = (ik)^2\psi(x)$ con $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ha soluzione:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (7)$$

Si tratta di due componenti viaggianti, Ae^{ikx} viaggiante verso le x positive e Be^{-ikx} viaggiante verso le x negative. Volendo porci in una situazione in cui l'onda è generata e nota, viaggiante verso le x positive, possiamo concludere che non ci può essere una componente proveniente da $+\infty$, e quindi $B = 0$. Combinando la (6) e la (7), si ottiene l'*onda viaggiante*:

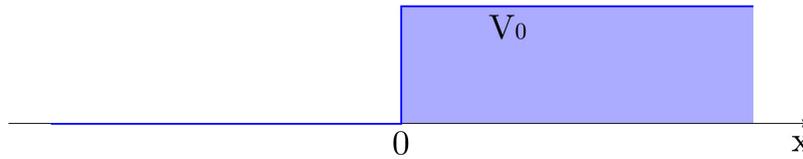
$$\Psi(x, t) = \psi(x) \cdot \varphi(t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (8)$$

3 Particella incidente su gradino di potenziale: onda stazionaria

Si immagini ora di voler studiare un gradino di potenziale con espressione:

$$\begin{cases} V = 0 & \text{per } x < 0 \\ V = V_0 & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Tale che un'onda viaggiante del tipo Ae^{ikx} incida su di esso. Si studiano ora i due casi $E < V_0$ ed $E > V_0$.



3.1 Caso $E < V_0$

Per $x < 0$ si hanno le due onde piane del tipo $\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}$ come già visto nella Sezione 2.

Per $x > 0$ l'equazione di Schrödinger tempo indipendente assume la forma:

$$\frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m(E - V_0)}{\hbar^2} \psi(x) = \alpha^2 \psi(x)$$

Essendo $E < V_0$ risulta $\alpha^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} > 0$. La soluzione è quindi costituita da due esponenziali **reali**, e sarà del tipo: $\psi(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x}$. È evidente che se fosse $C \neq 0$ la soluzione divergerebbe per $x \rightarrow \infty$. Allora $C = 0$ e la soluzione per $x > 0$ risulta:

$$\psi(x) = De^{-\alpha x}$$

Si impongono allora le condizioni di raccordo, per stabilire il rapporto tra i coefficienti degli esponenziali:

$$\psi(0^-) = \psi(0^+) \quad (9)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{0^-} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{0^+} \quad (10)$$

Risulta quindi:

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

In definitiva avremo una funzione d'onda

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{k+i\alpha}{2k} D e^{i(kx-\omega t)} + \frac{k-i\alpha}{2k} D e^{-i(kx-\omega t)} & \text{per } x < 0 \\ D e^{-\alpha x} e^{-i\omega t} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Si osserva che nel caso classico non esiste la particella per $x > 0$. Inoltre, per $x < 0$, si ha espressione:

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

Che è l'espressione di un'onda stazionaria, infatti, indipendentemente dal tempo, si avranno nodi:

$$\cos kx = \frac{\alpha}{k} \sin kx$$

3.2 Caso $E > V_0$

Ora per tutte le x si hanno delle onde piane. Nel dettaglio:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ikx} + B e^{-ikx} & \text{per } x < 0 \\ C e^{ik'x} + D e^{-ik'x} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Si noti che l'energia della particella è diversa nelle due regioni di spazio, di conseguenza esistono due vettori d'onda, $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ e $k' = \frac{\sqrt{2m(E-V_0)}}{\hbar}$. Si noti inoltre che possiamo escludere componenti di onda viaggiante provenienti da $+\infty$, allora $D = 0$. Applichiamo nuovamente le condizioni (9) e (10) e otteniamo:

$$\begin{cases} A + B = C & \rightarrow C = \frac{2k}{k+k'} A \\ ikA - ikB = -ik'C & \rightarrow B = \frac{k-k'}{k+k'} A \end{cases}$$

Definiamo allora i coefficienti di trasmissione \mathbf{T} e di riflessione \mathbf{R}

$$\mathbf{R} = \left(\frac{B}{A} \right)^2 = \left(\frac{k-k'}{k+k'} \right)^2$$

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

Si noti infine che $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$.

4 Particella incidente su barriera di potenziale, interferenza, risonanza

Si vuole ora studiare la funzione d'onda di una particella incidente su una barriera di potenziale rettangolare e larga a , così descritta:

$$V = \begin{cases} 0 & \text{per } x < 0 \\ V_0 & \text{per } 0 < x < a \\ 0 & \text{per } x > a \end{cases}$$

Si tratta della somma di un gradino positivo in $x = 0$ e un gradino negativo in $x = a$. Varranno quindi la (9) e la (10). Inoltre, le stesse condizioni di raccordo varranno p in $x = a$. Si scrive allora, ricordando la (9) e la (10):

$$\psi(0^-) = \psi(0^+) \quad (9)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{0^-} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{0^+} \quad (10)$$

$$\psi(a^-) = \psi(a^+) \quad (11)$$

$$\left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{a^-} = \left. \frac{\partial \psi}{\partial x} \right|_{a^+} \quad (12)$$

4.1 Caso $E < V_0$

Per $E < V_0$ valgono le considerazioni già fatte nella Sezione 3.1. Si cercano allora soluzioni del tipo:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx} & \text{per } x < 0 \\ Ce^{-\alpha x} + De^{\alpha x} & \text{per } 0 < x < a \\ Ee^{ikx} + Fe^{-ikx} & \text{per } x > 0 \end{cases}$$

Dove, per considerazioni analoghe a quelle delle Sezioni 3.1 e 3.2 possiamo dire che $F = 0$. Studiamo allora le condizioni di raccordo:

$$\begin{cases} A + B = C + D \\ ikA - ikB = -\alpha C + \alpha D \\ Ce^{\alpha a} + De^{-\alpha a} = Ee^{ika} \\ -\alpha Ce^{\alpha a} + \alpha De^{-\alpha a} = ikEe^{ika} \end{cases}$$

Che risultano nel rapporto tra i coefficienti:

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

Si possono allora scrivere i coefficienti di trasmissione \mathbf{T} e di riflessione \mathbf{R}

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

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

Per $\alpha a \gg 1$ è poi possibile approssimare

$$\mathbf{T} \approx \left(\frac{4\alpha k}{\alpha^2 + k^2}\right)^2 e^{-2\alpha a} \approx e^{-2\alpha a}$$

4.2 Caso $E > V_0$

- 5 Particella confinata in buca di potenziale infinita, autovalori
- 6 Particella confinata in buca di potenziale finita, soluzione grafica
- 7 Particella confinata in buca di potenziale infinita 2D
- 8 Doppia buca accoppiata