



Corso di Laurea in Chimica Industriale
Chimica Fisica II

Lezione 5

Particelle confinate

A.A. 2022-2023

Marco Ruzzi



Dipartimento di Scienze Chimiche
Università degli Studi di Padova
Via Marzolo 1 35129 Padova
E-mail: marco.ruzzi@unipd.it

Particelle confinate [1]

Richiami sul concetto di particella libera e particella confinata

Una particella libera è una particella sulla quale agisce una risultante di forze nulla per ogni istante di tempo t .

Per la particella libera in uno spazio 1-dimensionale, per ogni istante t , vale:

$$F(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} U(x, t) \mathbf{i} = 0$$

ossia:

$$U(x, t) = U_0$$

con U_0 energia potenziale costante che può essere sempre posta uguale a zero...

Una particella libera è una particella caratterizzata per ogni istante di tempo t da un'energia potenziale nulla ($\forall t$ vale $U(x, t) = U_0 = 0$).

Osservazione 1

L'equazione sopra è ovviamente un caso particolare del caso più generale a tre dimensioni. Vale

$$F(\mathbf{r}, t) = -\frac{\partial}{\partial x} U(\mathbf{r}, t) \mathbf{i} - \frac{\partial}{\partial y} U(\mathbf{r}, t) \mathbf{j} - \frac{\partial}{\partial z} U(\mathbf{r}, t) \mathbf{k} = -\nabla U(\mathbf{r}, t) = 0$$

ossia:

$$U(\mathbf{r}, t) = U_0$$

con U_0 energia potenziale costante che può essere sempre posta uguale a zero...



Particelle confinate [2]

La situazione è radicalmente diversa nel caso di una particella confinata nello spazio da un opportuno campo di forze. In generale, in fisica, il confinamento di una particella è descritto tramite il concetto di buca di (energia) potenziale...

Per una particella confinata in uno spazio 1-dimensionale, per ogni istante t , vale:

$$F(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} U(x,t) \mathbf{i} \neq 0$$

con $F(x,t)$ campo di forze confinante...

e in tal caso l'energia potenziale $U(x,t)$ deve essere rappresentata da un'opportuna funzione analitica che riproduca, attraverso l'operazione di derivata sullo spazio, il campo di forze confinante. Tale funzione analitica è in generale rappresentata da una *funzione a buca*...

Una particella confinata è una particella caratterizzata per ogni istante di tempo t da un'energia potenziale $U(x,t)$ rappresentata da una funzione analitica a buca...

Osservazione 2

L'estensione al caso della particella confinata 3-dimensionale è immediata...

$$F(\mathbf{r},t) = -\frac{\partial}{\partial x} U(\mathbf{r},t) \mathbf{i} - \frac{\partial}{\partial y} U(\mathbf{r},t) \mathbf{j} - \frac{\partial}{\partial z} U(\mathbf{r},t) \mathbf{k} = -\nabla U(\mathbf{r},t) \neq 0$$

con $F(x,t)$ campo di forze confinante

ossia con energia potenziale $U(\mathbf{r},t)$ rappresentata da una funzione analitica a buca...



Particelle confinate [3]

Osservazione 3

In elettrodinamica, l'energia potenziale associata ad una particella con carica q_0 è usualmente espressa in termini di potenziale elettrico...

In generale per sistemi in uno spazio 1-dimensionale valgono:

$$U(x,t) = q_0 V(x,t)$$
$$\mathbf{F}(x,t) = q_0 \mathbf{E}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} U(x,t) \mathbf{i} = -\frac{\partial}{\partial x} q_0 V(x,t) \mathbf{i} \Rightarrow \mathbf{E}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} V(x,t) \mathbf{i}$$

Una particella libera risente di un potenziale costante:

$$U(x,t) = U_0 = -e V_0 \quad \forall t$$

e di un campo elettrico nullo:

$$\mathbf{E}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} V(x,t) \mathbf{i} = -\frac{\partial}{\partial x} V_0 \mathbf{i} = 0 \quad \forall t$$

Una particella confinata risente di un potenziale $V(x,t)$ a forma di buca (buca di potenziale) e di un campo elettrico confinante non nullo...

$$U(x,t) = q_0 V(x,t)$$

e di un campo elettrico confinante non nullo...

$$\mathbf{E}(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x} V(x,t) \mathbf{i}$$



Particelle confinate [4]

Esempio: campo elettrico di una particella di carica Q nello spazio

Nel caso di un campo elettrico coulombiano, centrale (a simmetria sferica), generato da una carica Q nello spazio, vale:

$$\mathbf{E}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r^2} \mathbf{u}_r = -\nabla \{V(r)\}$$

ossia in modulo:

$$E(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r^2} = -\frac{\partial}{\partial r} \{V(r)\} = -\frac{\partial}{\partial r} \left\{ +\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r} \right\}$$

da cui si può dedurre l'espressione del potenziale: $V(r) = +\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{r}$.

In altre parole, considerando la forza coulombiana tra la carica Q che genera il campo e la carica q_0 interagente con il campo stesso, vale:

$$\mathbf{F}(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_0 Q}{r^2} \mathbf{u}_r = -\nabla \{U(r)\}$$

ossia in modulo:

$$F(r) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_0 Q}{r^2} = -\frac{\partial}{\partial r} \{U(r)\} = -\frac{\partial}{\partial r} \left\{ +\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_0 Q}{r} \right\}$$

da cui si può dedurre l'espressione dell'energia potenziale: $U(r) = +\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_0 Q}{r}$

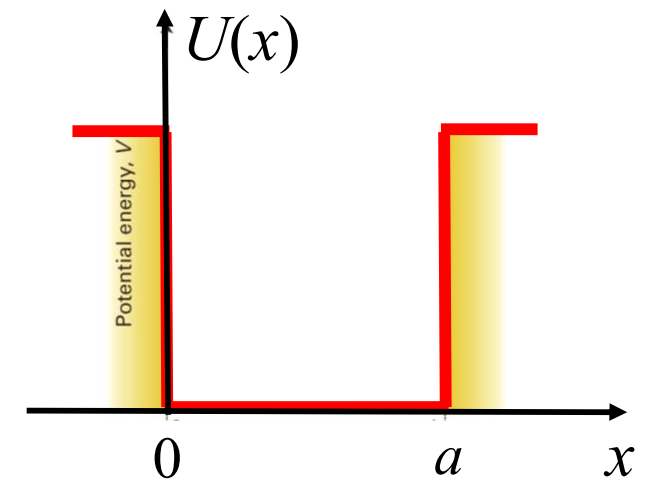


Particelle confinate [5]

L'equazione di Schroedinger per la particella confinata in uno spazio 1-dimensionale
Idealmente un campo di forze confinante una particella in uno spazio limitato 1-dimensionale è caratterizzato da un'energia potenziale $U(x)$ con andamento descritto da una funzione a buca 1-dimensionale.

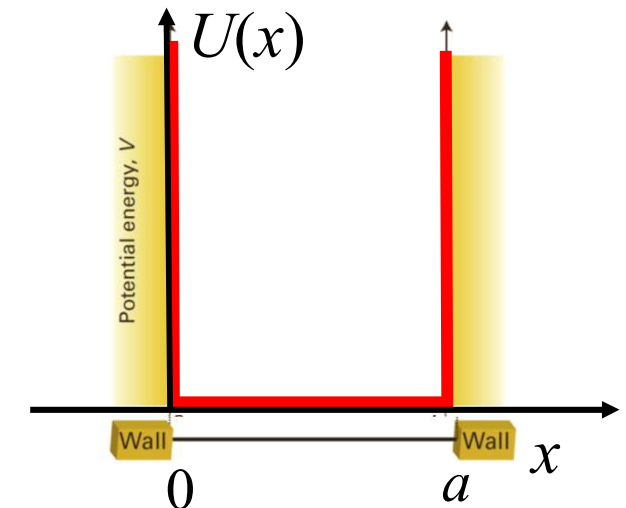
Analiticamente una buca di energia potenziale è descritta da una funzione a tratti del tipo:

$$U(x,t) = U(x) = \begin{cases} U_0 & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ U_0 & x > a \end{cases}$$



La particella risulta confinata nella regione $0 < x < a$ se la buca di energia potenziale ha pareti di altezza infinita:

$$U(x,t) = U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$



Particelle confinate [6]

L'equazione di Schroedinger allo stato stazionario per una particella confinata in una buca di potenziale stazionaria a pareti infinite si scrive:

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

con:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a \\ \infty & \text{altrimenti} \end{cases}$$

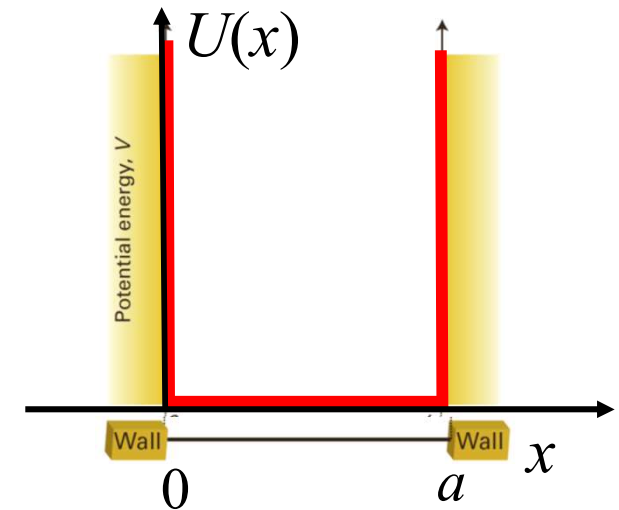
In tal caso l'equazione di Schroedinger nella regione di confinamento ($0 \leq x \leq a$) si scrive:

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

con le seguenti condizioni al contorno sulle soluzioni:

$$\psi(0) = \psi(a) = 0$$

Tali condizioni al contorno impongono una funzione d'onda nulla in quelle regioni di spazio (pareti) caratterizzate da un'energia potenziale $U(x)$ tendente ad infinito...



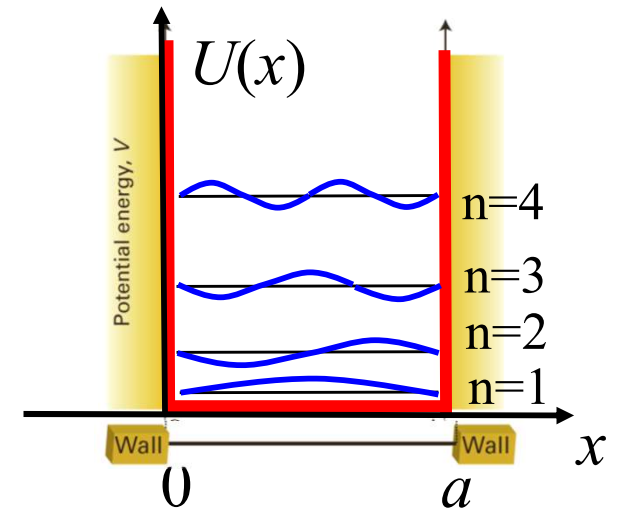
Particelle confinate [7]

La risoluzione dell'equazione di Schroedinger fornisce le funzioni d'onda $\psi_n(x)$ di stato stazionario (autofunzioni) e i corrispondenti valori E_n (autovalori) che descrivono, rispettivamente, i possibili stati e le possibili energie della particella quantistica confinata nella buca.

Valgono:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \quad (n \text{ intero positivo})$$

$$E_n = \frac{h^2}{8m} \frac{n^2}{a^2}$$



Le condizioni al contorno imposte dal confinamento della particella nella buca implicano necessariamente l'introduzione di un numero quantico n (intero positivo) nella forma analitica delle soluzioni (autofunzioni $\psi_n(x)$)...

Tale numero quantico caratterizza anche gli autovalori E_n dell'equazione e dunque determina i possibili valori di energia discreti assunti dalla particella confinata...

Si noti che lo stato di minima energia ($n = 1$) ha un'energia (cinetica) non nulla:

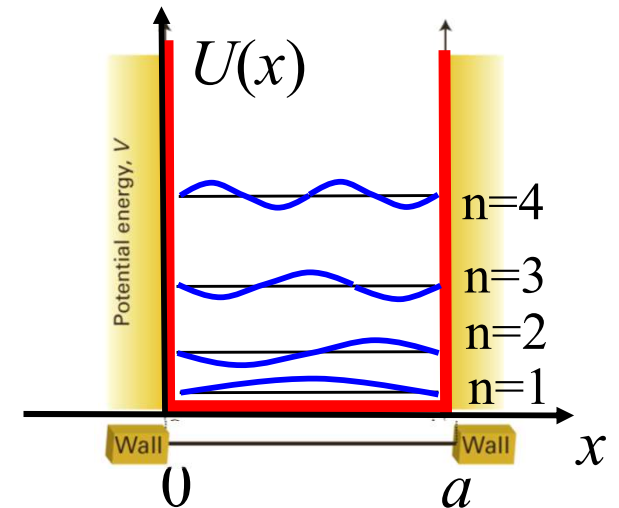
$$E_1 = \frac{h^2}{8m} \frac{1}{a^2}$$

Particelle confinate [8]

La risoluzione dell'equazione di Schroedinger fornisce le funzioni d'onda $\psi_n(x)$ di stato stazionario (autofunzioni) e i corrispondenti valori E_n (autovalori) che descrivono, rispettivamente, i possibili stati e le possibili energie della particella quantistica confinata nella buca.

Valgono:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \quad (n \text{ intero positivo})$$
$$E_n = \frac{h^2}{8m} \frac{n^2}{a^2}$$



Osservazione 4

Si noti che la quantizzazione delle energie ha origine dalle condizioni al contorno imposte per la funzione d'onda ($\psi(0) = \psi(a) = 0$) a seguito del confinamento della particella.. In assenza di condizioni al contorno (particella libera) non si arriva a stati energetici quantizzati ma ad uno spettro continuo.

L'assunto è generale: la quantizzazione degli osservabili è la diretta conseguenza delle condizioni al contorno imposte sulle funzioni d'onda e dunque del confinamento della particella

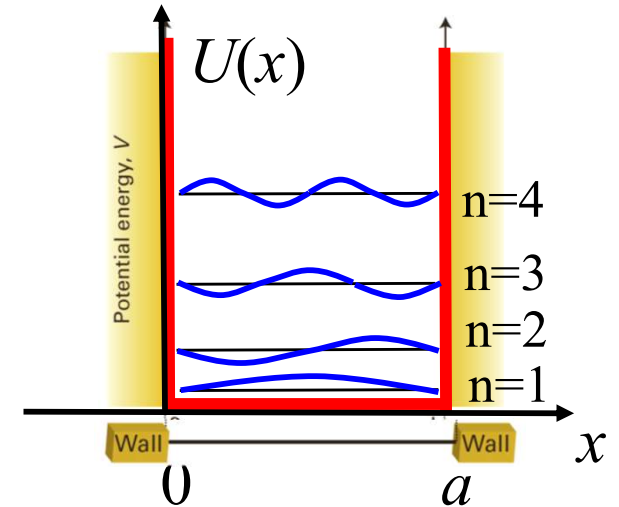


Particelle confinate [9]

Valgono:

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \quad (n \text{ intero positivo})$$

$$E_n = \frac{h^2 n^2}{8m a^2}$$



Ricordando il significato del modulo quadrato della funzione d'onda in termini di densità di probabilità:

$$dw(x,t) = |\Psi(x,t)|^2 dx = \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = \psi_n^*(x) \phi^*(t) \psi_n(x) \phi(t) dx$$

si ottiene:

$$dw(x,t) = \psi_n^*(x) e^{-i\frac{E_n}{\hbar}t} \psi_n(x) e^{+i\frac{E_n}{\hbar}t} dx = \psi_n^*(x) \psi_n(x) dx = |\psi_n(x)|^2 dx$$

con:

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a}$$

E evidente dunque che la probabilità di trovare la particella all'interno della buca di potenziale non è distribuita uniformemente nello spazio...

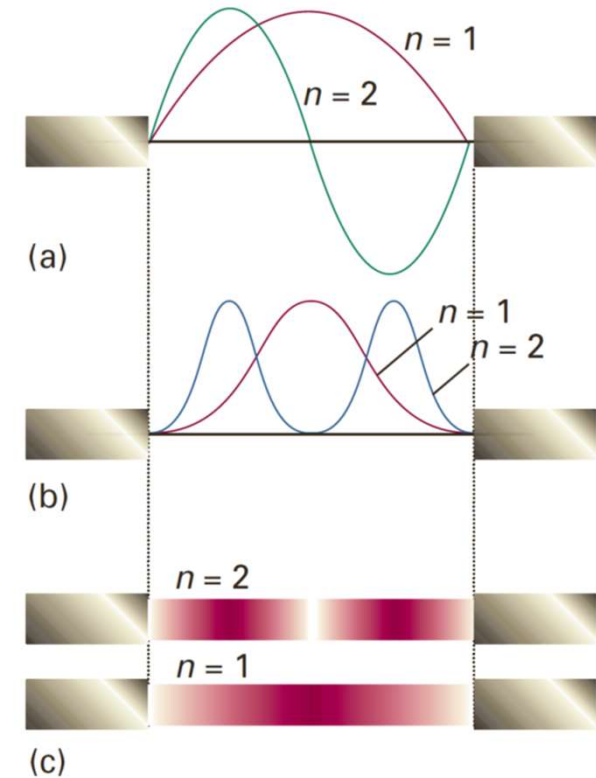
Particelle confinate [10]

Il calcolo della probabilità di trovare la particella in un intervallo $[x_1, x_2]$ centrato su una determinata posizione x dipende dunque dalla posizione x considerata...

Valgono:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a} \quad (n \text{ intero positivo})$$

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a}$$



La probabilità di trovare la particella in un intervallo $[x_1, x_2]$ centrato su una determinata posizione x vale:

$$dw_n = |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a} dx$$

$$w_{n, [x_1, x_2]} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a} dx$$

Particelle confinate [11]

$$W_{n, [x_1, x_2]} = \int_{x_1}^{x_2} |\psi_n(x)|^2 dx = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{a} dx$$

Eseguendo la sostituzione:

$$\frac{n\pi x}{a} = u \quad x = \frac{a}{n\pi} u \quad dx = \frac{a}{n\pi} du$$

si ottiene:

$$W_{n, [x_1, x_2]} = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{a} dx = \frac{2}{a} \int_{n\pi x_1/a}^{n\pi x_2/a} \frac{a}{n\pi} \text{sen}^2 u du = \frac{2}{a} \frac{a}{n\pi} \left[\frac{u}{2} - \frac{1}{4} \text{sen} 2u \right] \Bigg|_{n\pi x_1/a}^{n\pi x_2/a}$$

e in tal modo si riesce a calcolare la probabilità di trovare la particella in un determinata regione $[x_1, x_2]$ centrata in x all'interno della regione di confinamento. Si evince chiaramente che il valore numerico trovato non è costante ma dipende dalla posizione x considerata...

Particelle confinate [12]

$W_n, [x_1, x_2]$

Esegu

$\frac{n\pi x}{a}$

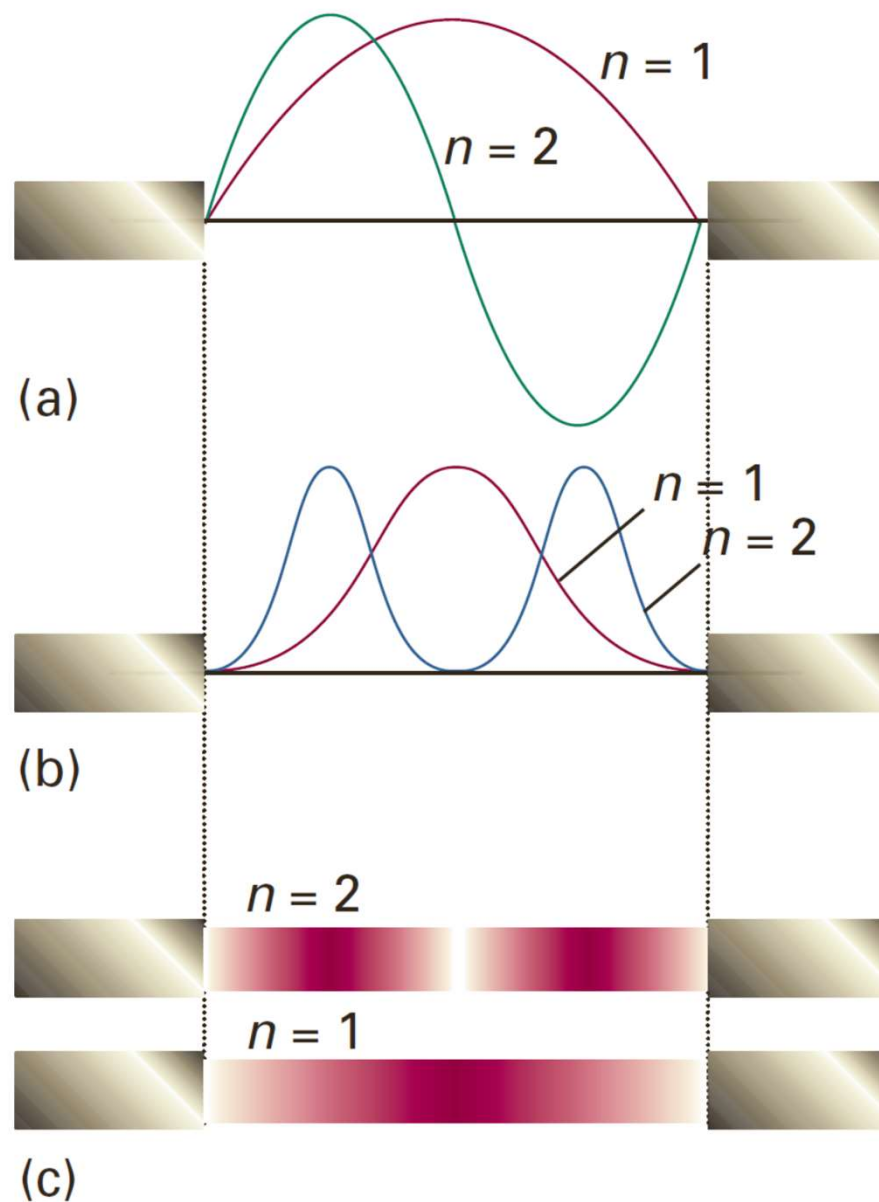
si ott

$W_n, [x_1, x_2]$

e in
determ
Si evi
dalla

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a}$$

$$|\psi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a}$$



/a

/a

in un
ento.
ende

Particelle confinate [13]

Esercizio

Si ricavi la funzione d'onda della particella quantistica confinata nella buca di potenziale 1-dimensionale partendo dalla soluzione generale dell'equazione di Schroedinger del tipo: $\psi(x) = A \sin kx + B \cos kx$.

Nella regione $0 < x < a$ l'equazione di Schroedinger si scrive:

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

ed è facile verificare (derivando e sostituendo...) che quella data è effettivamente soluzione generale dell'equazione di Schroedinger.

Imponendo le condizioni al contorno $\psi(0) = \psi(a) = 0$ si trova la soluzione particolare cercata. Deve valere:

$$\psi(0) = A \sin k0 + B \cos k0 = 0 \quad \Rightarrow \quad B = 0$$

e quindi :

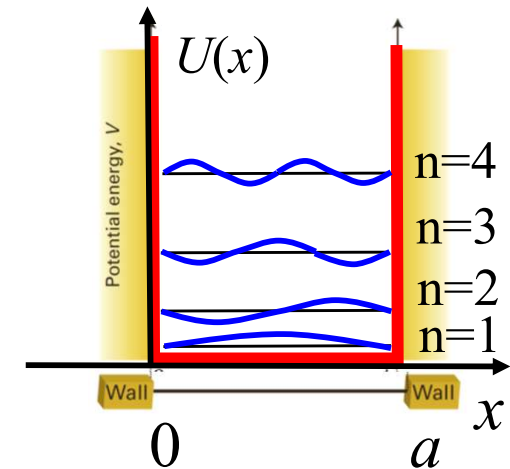
$$\psi(x) = A \sin kx$$

Deve valere:

$$\psi(a) = A \sin ka = 0 \quad \Rightarrow \quad ka = n\pi \quad \Rightarrow \quad \frac{2\pi}{\lambda} a = n\pi \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{2a}{n} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

e quindi :

$$\psi(x) = A \sin kx = A \sin \frac{2\pi}{\lambda} x = A \sin \frac{2\pi}{2a} nx = A \sin \frac{n\pi x}{a}$$



Particelle confinate [14]

Imponendo la normalizzazione...

$$|\psi(x)|^2 = \psi^*(x)\psi(x) = \int_0^a A^2 \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a} dx = 1$$

Eseguendo la sostituzione:

$$\frac{n\pi x}{a} = u \quad x = \frac{a}{n\pi} u \quad dx = \frac{a}{n\pi} du$$

si ottiene:

$$A^2 \int_0^a \operatorname{sen}^2 \frac{n\pi x}{a} dx = A^2 \int_0^{n\pi} \frac{a}{n\pi} \operatorname{sen}^2 u du = \frac{A^2 a}{n\pi} \left[\frac{u}{2} - \frac{1}{4} \operatorname{sen} 2u \right] \Big|_0^{n\pi} = 1$$

ossia:

$$\frac{A^2 a}{n\pi} \left[\left(\frac{n\pi}{2} - \frac{1}{4} \operatorname{sen} 2n\pi \right) \right] = 1$$

$$\frac{A^2 a}{n\pi} \frac{n\pi}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad A^2 = \frac{2}{a} \quad \Rightarrow \quad A = \pm \sqrt{\frac{2}{a}}$$

La funzione d'onda (allo stato stazionario) normalizzata risulta:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \operatorname{sen} \frac{n\pi x}{a}$$



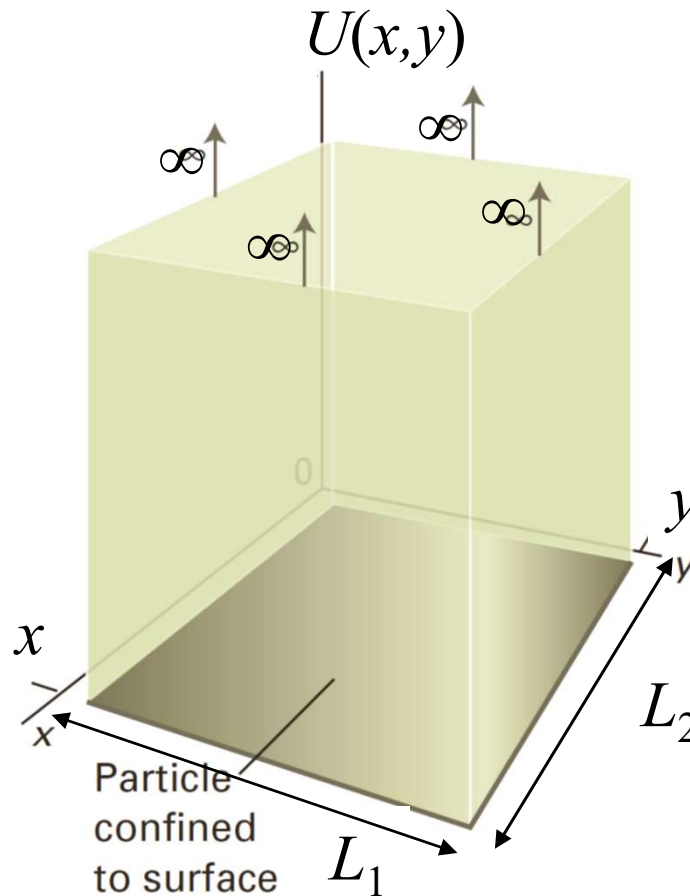
Particelle confinate [15]

L'equazione di Schroedinger per la particella confinata in uno spazio 2-dimensionale
L'estensione al caso 2-dimensionale è immediata...

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

In questo caso la particella è vincolata da quattro barriere di energia infinita a rimanere in un piano xy (ad esempio un rettangolo di lati L_1 e L_2).

$$0 \leq x \leq L_1, 0 \leq y \leq L_2$$



Particelle confinate [16]

La risoluzione dell'equazione segue la strategia attuata nel caso 1-dimensionale:

1. assumendo che le soluzioni siano del tipo: $\psi(x,y)=f(x)g(y)$ con $f(x)$ e $g(y)$ funzioni analoghe a quelle ottenute nel caso unidimensionale.

2. imponendo che fuori dalla barriera la funzione d'onda sia nulla:

$$\psi(x,y) = 0 \quad \text{per: } x, y < 0 \quad \text{e} \quad x > L_1, y > L_2$$

3. applicando le condizioni di continuità ai bordi:

$$\psi(0,y) = \psi(x,0) = \psi(L_1,y) = \psi(x,L_2) = 0$$

si ottengono soluzioni costituite da onde stazionarie (in analogia al caso delle vibrazioni di una membrana piana vincolata ai bordi).

Particelle confinate [16]

La risoluzione dell'equazione segue la strategia attuata nel caso 1-dimensionale:

1. assumendo che le soluzioni siano del tipo: $\psi(x,y)=f(x)g(y)$ con $f(x)$ e $g(y)$ funzioni analoghe a quelle ottenute nel caso unidimensionale.
2. imponendo che fuori dalla barriera la funzione d'onda sia nulla:

$$\psi(x,y) = 0 \quad \text{per: } x, y < 0 \text{ e } x > L_1, y > L_2$$

3. applicando le condizioni di continuità ai bordi:

$$\psi(0,y) = \psi(x,0) = \psi(L_1,y) = \psi(x,L_2) = 0$$

si ottengono soluzioni costituite da onde stazionarie (in analogia al caso delle vibrazioni di una membrana piana vincolata ai bordi).

La risoluzione dell'equazione di Schroedinger fornisce le autofunzioni e i corrispondenti autovalori che descrivono, rispettivamente, gli stati e le energie dei diversi stati della particella confinata nell'area 2-dimensionale:

$$\Psi_{n_1,n_2}(x,y) = \sqrt{\frac{4}{L_1 L_2}} \operatorname{sen} \frac{n_1 \pi x}{L_1} \operatorname{sen} \frac{n_2 \pi y}{L_2} \quad \begin{array}{l} 0 \leq y \leq L_2 \\ 0 \leq x \leq L_1 \end{array}$$

$$E_{n_1,n_2} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} \right)$$

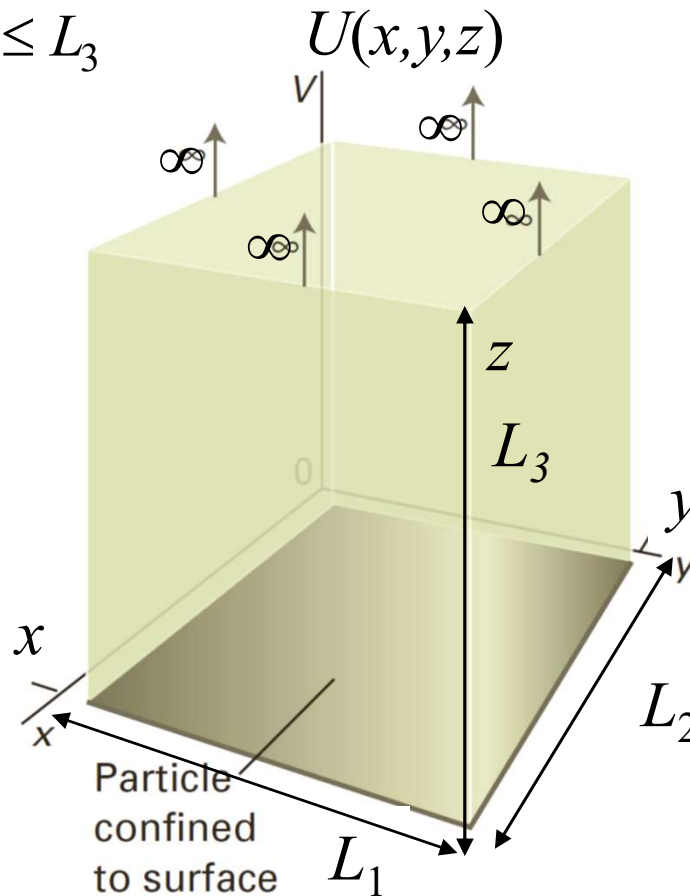
Particelle confinate [17]

L'equazione di Schroedinger per la particella confinata in uno spazio 3-dimensionale
L'estensione al caso 3-dimensionale è immediata...

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} + U(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

In questo caso la particella è vincolata da sei barriere di energia infinita a rimanere in un volume xyz (ad esempio un parallelepipedo di lati L_1 , L_2 e L_3).

$$0 \leq x \leq L_1, 0 \leq y \leq L_2, 0 \leq z \leq L_3$$



Particelle confinate [18]

La risoluzione dell'equazione di Schroedinger fornisce le autofunzioni e i corrispondenti autovalori che descrivono, rispettivamente, gli stati e le energie dei diversi stati della particella confinata nel volume 3-dimensionale:

$$\Psi_{n_1, n_2, n_3}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_1 L_2 L_3}} \operatorname{sen} \frac{n_1 \pi x}{L_1} \operatorname{sen} \frac{n_2 \pi y}{L_2} \operatorname{sen} \frac{n_3 \pi z}{L_3} \quad \begin{array}{l} 0 \leq y \leq L_2 \\ 0 \leq x \leq L_1 \\ 0 \leq z \leq L_3 \end{array}$$
$$E_{n_1, n_2, n_3} = \frac{h^2}{8m} \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right)$$

Particelle confinate [19]

Stati energeticamente degeneri

Nei sistemi a più dimensioni è tipico trovare stati energeticamente degeneri ossia stati descritti da differenti funzioni d'onda ma caratterizzati dalla medesima energia.

In particolare la degenerazione è correlabile alla simmetria del sistema (nei casi visti alla simmetria della buca di potenziale)...

Esempio

Considerando la buca di potenziale 2-dimensionale quadrata ($L_1=L_2=L$) valgono:

$$\Psi_{n_1, n_2}(x, y) = \sqrt{\frac{4}{L^2}} \operatorname{sen} \frac{n_1 \pi x}{L} \operatorname{sen} \frac{n_2 \pi y}{L} \quad E_{n_1, n_2} = \frac{h^2}{8mL^2} (n_1^2 + n_2^2)$$

e ponendo (per comodità di notazione):

$$E_0 = h^2/8mL^2$$

è facile vedere che (ad esempio):

gli stati: $(n_1, n_2) = (2, 1)$ e $(n_1, n_2) = (1, 2)$ sono degeneri (vale: $E_{(2,1)} = E_{(1,2)} = 5E_0$);
gli stati: $(n_1, n_2) = (1, 7)$ e $(n_1, n_2) = (5, 5)$ sono degeneri (vale: $E_{(1,7)} = E_{(5,5)} = 50E_0$).



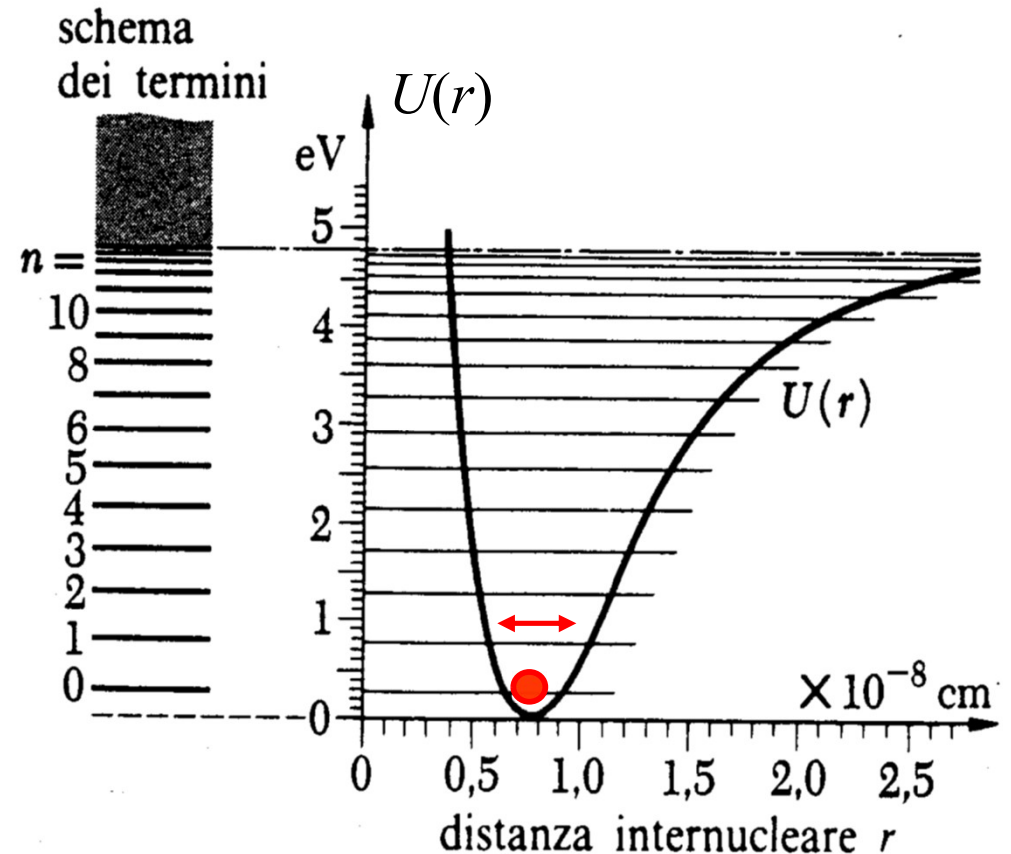
Particelle confinate [20]

L'equazione di Schroedinger per la descrizione di molecole biatomiche omonucleari
L'energia potenziale $U(r)$ per una molecola biatomica omonucleare in funzione della distanza tra i due atomi ha andamento come quello rappresentato in figura...

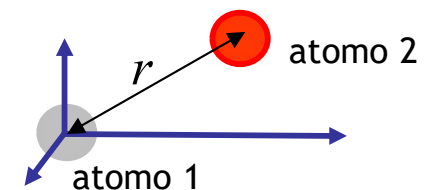
Per basse energie l'atomo 2 è confinato dal campo di forze generato dall'atomo 1 ed è localizzato nell'intorno della posizione di equilibrio (ossia nell'intorno della posizione r_{min}) caratterizzata da minima energia potenziale. In questa condizione i due atomi sono in uno stato legato (molecola) e la distanza r_{min} è la distanza di legame.

Nell'intorno del minimo (*i.e.* per $r \sim r_{min}$) l'andamento analitico del potenziale $U(r)$ è di tipo quadratico ($U(r) \sim r^2$).

In tal caso per $r \sim r_{min}$ (basse energie) il sistema può essere descritto in termini di oscillatore armonico e la risoluzione dell'equazione di Schroedinger per l'oscillatore fornisce le funzioni d'onda e i livelli energetici E_n della molecola...



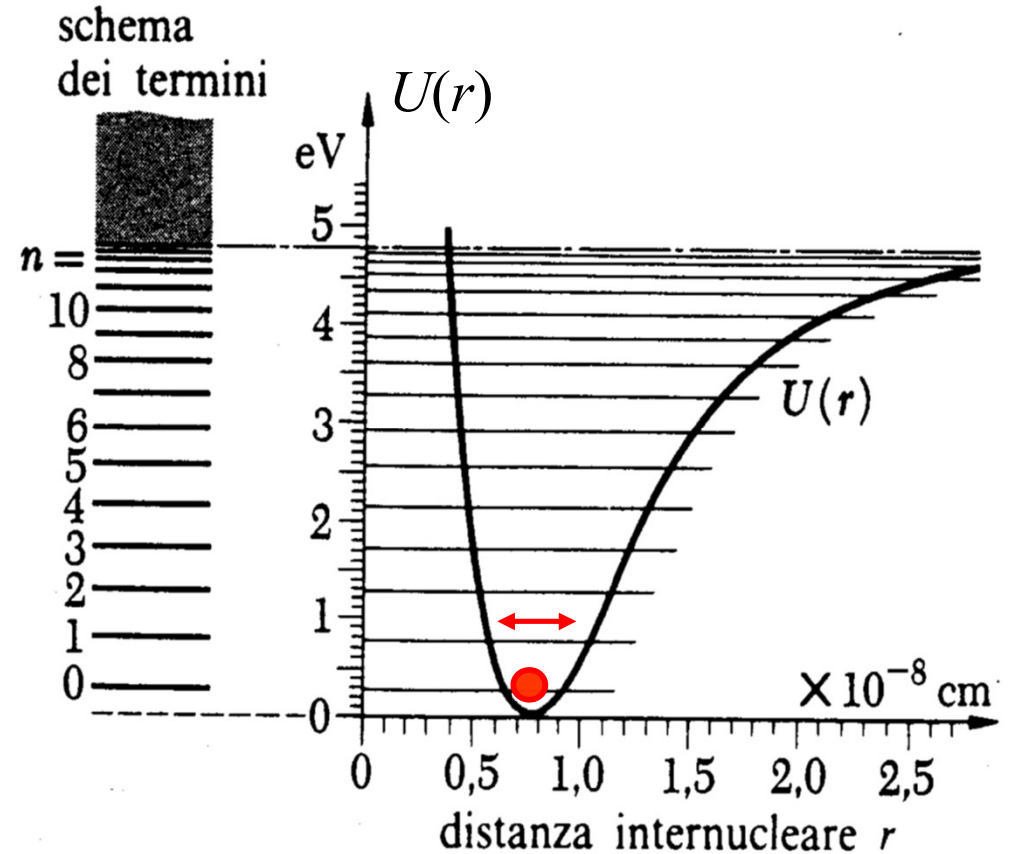
Rappresentazione schematica di una molecola biatomica omonucleare (molecola H_2)



Particelle confinate [21]

L'equazione di Schroedinger per la descrizione di molecole biatomiche omonucleari
L'energia potenziale $U(r)$ per una molecola biatomica omonucleare in funzione della distanza tra i due atomi ha andamento come quello rappresentato in figura...

Per basse energie l'atomo 2 è confinato dal campo di forze generato dall'atomo 1 ed è localizzato nell'intorno della posizione di equilibrio (ossia nell'intorno della posizione r_{min}) caratterizzata da minima energia potenziale. In questa condizione i due atomi sono in uno stato legato (molecola) e la distanza r_{min} è la distanza di legame.

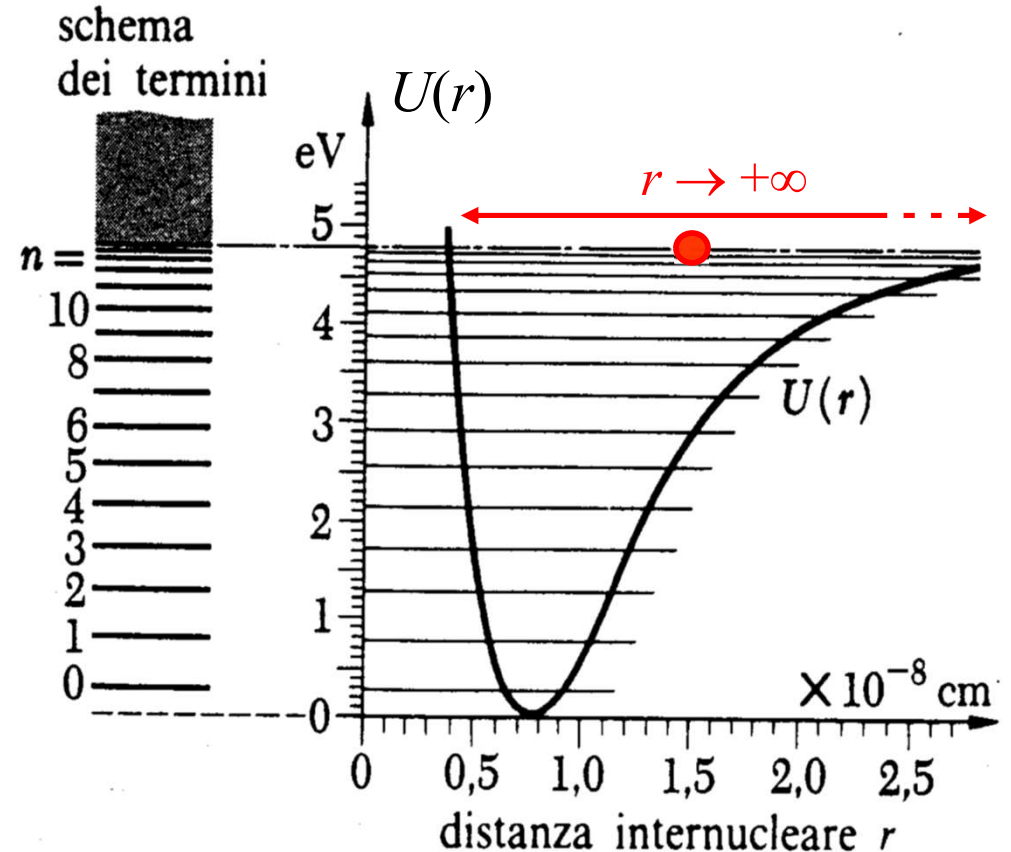


Se l'energia dell'atomo 2 è piccola rispetto alla profondità della buca (se $E < U_0$) l'atomo 2 è confinato in una buca di tipo armonico (oscillatore armonico) ed esiste una soluzione fisicamente valida dell'equazione di Schroedinger della molecola biatomica (descritta in termini di oscillatore). In tal caso gli autovalori E_n ottenuti dall'equazione di Schroedinger forniscono le energie quantizzate dei livelli energetici della molecola...

Particelle confinate [22]

L'equazione di Schroedinger per la descrizione di molecole biatomiche omonucleari
L'energia potenziale $U(r)$ per una molecola biatomica omonucleare in funzione della distanza tra i due atomi ha andamento come quello rappresentato in figura...

Per elevate energie l'atomo 2 non è più confinato dal campo di forze generato dall'atomo 1 e risulta completamente delocalizzato nello spazio (r può tendere ad infinito). In questa condizione i due atomi sono in uno stato slegato (di non molecola).



Se l'energia dell'atomo 2 è circa uguale alla profondità della buca (i.e se $E \sim U_0$) l'atomo 2 non è più confinato in quanto r può tendere ad infinito e in tal caso il sistema non si trova più in uno stato legato. I livelli energetici per i due atomi sono quelli della particella libera (le energie dei due atomi possono variare in modo continuo) e il sistema può assumere valori di energia non più quantizzati...

Particelle confinate [23]

Soluzione per altri potenziali unidimensionali costanti a tratti

In particolare sarà presa in considerazione la soluzione dell'equazione di Schroedinger stazionaria in una dimensione per potenziali $U(x)$ a gradino.

La situazione fisica è quella di una particella libera che procedendo secondo le x crescenti incontra un gradino di potenziale costante $U(x) = U_0$.

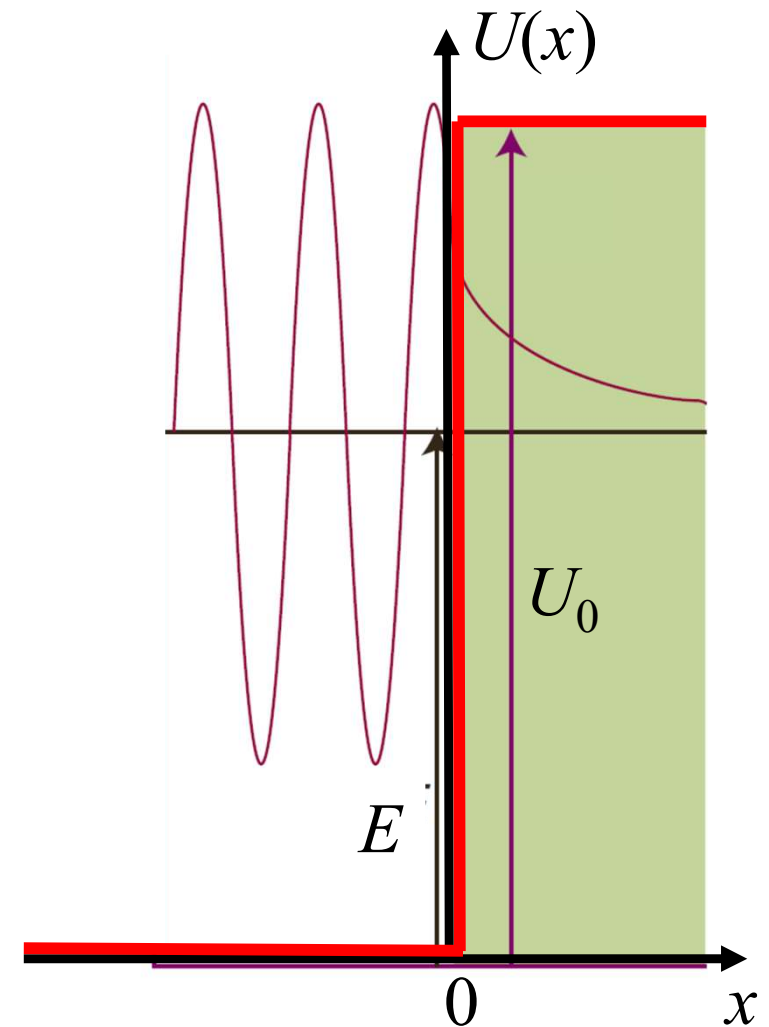
In tal caso:

nella regione $x < 0$ la particella è caratterizzata da un'energia potenziale costante che può sempre essere assunta nulla (particella libera) ...

nella regione $x > 0$ la particella è caratterizzata da un'energia potenziale costante U_0 non nulla...

Vale:

$$U(x,t) = U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & \text{altrimenti} \end{cases}$$



Particelle confinate [24]

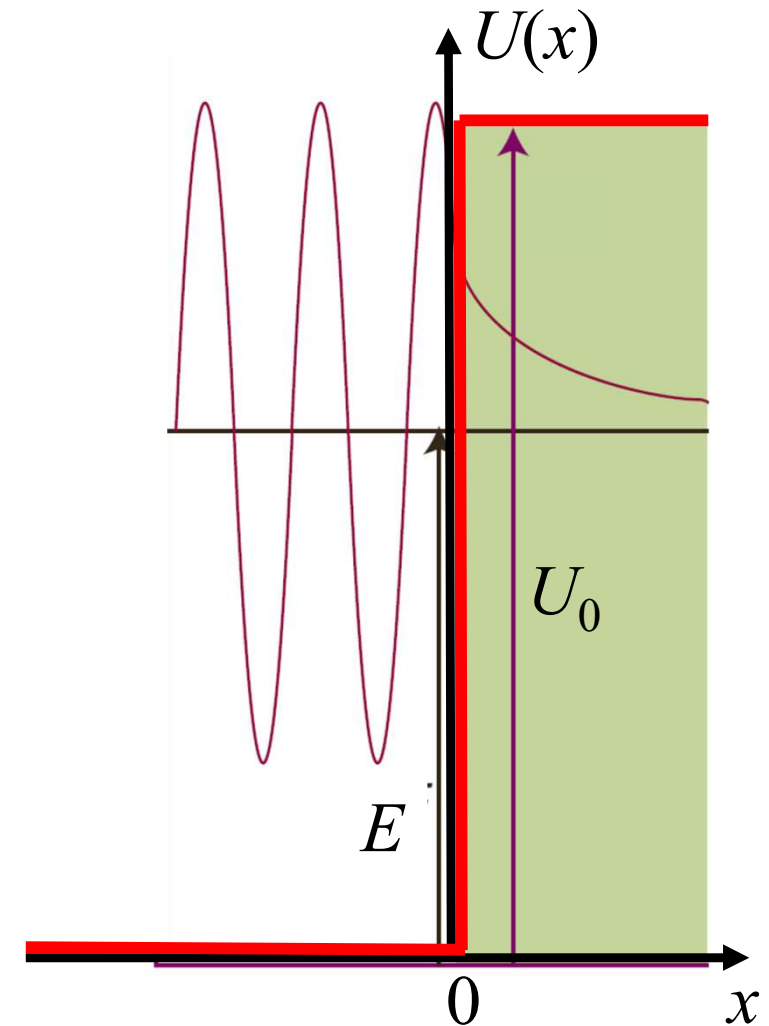
Esempio

La situazione approssima l'energia potenziale di una particella carica (elettrone) in prossimità di un'interfaccia di tipo metallo 1/metallo 2.

All'interno del metallo 1 l'elettrone è sottoposto all'azione di un potenziale costante $V_{0,1}$ (deve valere $\vec{E} = -\nabla V = 0$) che può essere sempre assunto nullo. All'interno del metallo 2 il potenziale è ancora costante (continua a valere $\vec{E} = -\nabla V = 0$) ma assume un valore $V_{0,2}$ superiore al potenziale $V_{0,1}$ del metallo 1 (quest'ultimo assunto come riferimento a potenziale nullo). Ovviamente l'andamento dell'energia potenziale $U(x)$ riflette l'andamento del potenziale $V(x)$ (vale $U(x) = qV(x)$) e dunque l'andamento a gradino del potenziale può essere riportato in termini di energia potenziale...

Il modello descritto è il punto di partenza per trattare e descrivere il comportamento di un gas di elettroni in prossimità di una giunzione a gradino di tipo metallo 1/metallo 2 ...

metallo 1	metallo 2
$\vec{E} = -\nabla V = 0$	$\vec{E} = -\nabla V = 0$
$V = V_{0,1} = 0$	$V = V_{0,2}$
↓	↓
$U_{0,1} = qV_{0,1} = 0$	$U_{0,2} = qV_{0,2} = U_0$



Particelle confinate [25]

In particolare...

si assuma che l'energia cinetica E della particella nella regione $x < 0$ risulti minore all'ampiezza del gradino di energia potenziale:

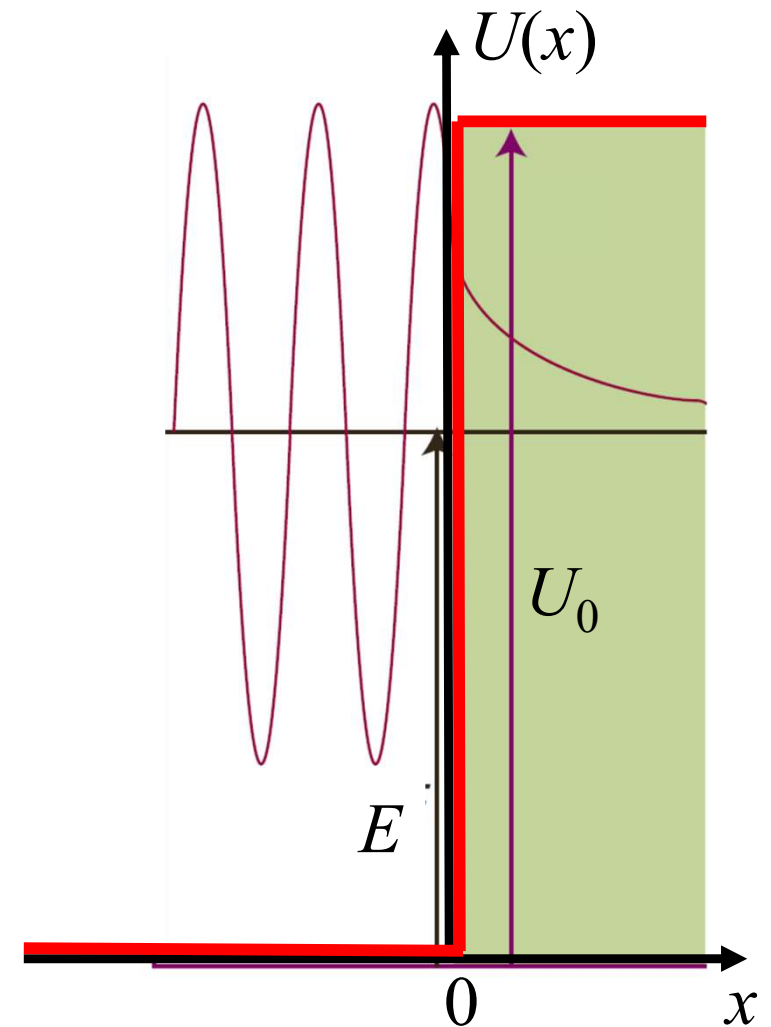
$$E < U_0$$

Secondo la meccanica classica...

la particella non può penetrare nella regione delle x positive poiché la sua energia cinetica in quella regione dovrebbe diventare negativa...

La situazione viene descritta mediante una forza di tipo impulsivo (collisione elastica) che agisce sulla particella, istantaneamente, nella posizione $x = 0$ facendo invertire il verso del moto e conservando l'energia cinetica $E = p^2 / 2m$.

Nel punto d'inversione $x = 0$ vale $p = 0$.



Particelle confinate [26]

In particolare...

si assuma che l'energia cinetica E della particella nella regione $x < 0$ risulti minore all'ampiezza del gradino di energia potenziale:

$$E < U_0$$

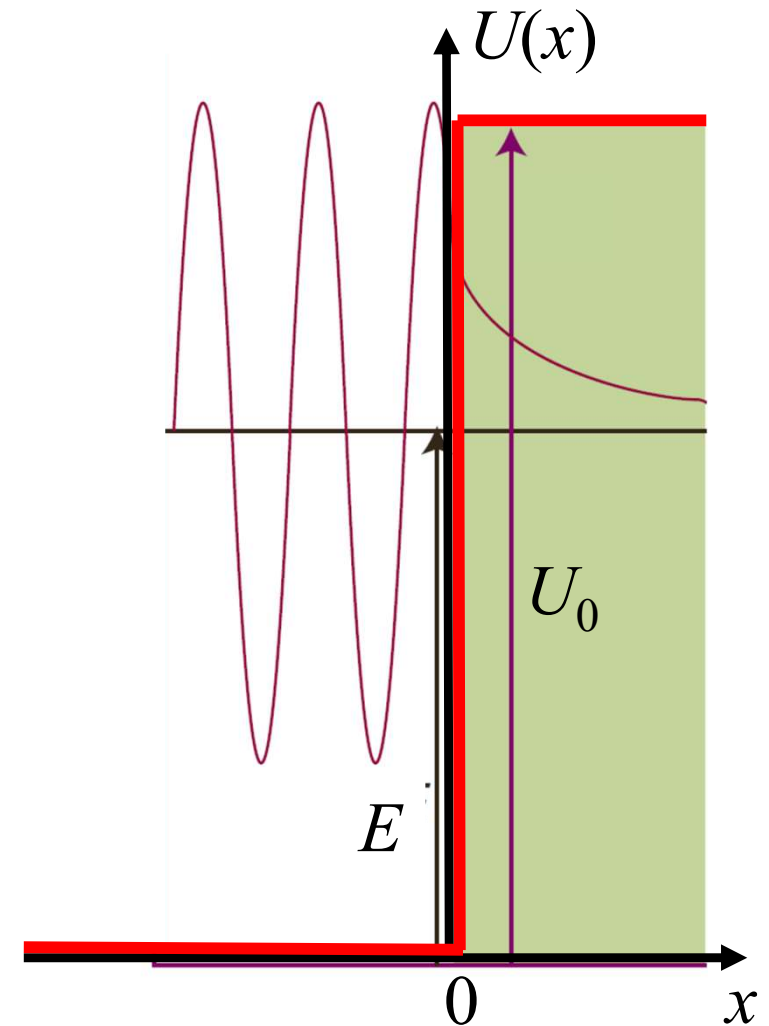
Secondo la meccanica quantistica...

vale l'equazione di Schroedinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E\psi(x) \quad x < 0$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U_0\psi(x) = E\psi(x) \quad x \geq 0$$

Il problema prevede la risoluzione separata delle due equazioni e il successivo raccordo delle soluzioni (autofunzioni) nel punto $x = 0$ dove le autofunzioni dovranno essere univoche, continue e finite, assieme alle derivate prime.



Particelle confinate [27]

Alla fine le soluzioni si scrivono:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} & x < 0 \quad \left(k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar \right) \\ C e^{k_2x} + D e^{-k_2x} & x \geq 0 \quad \left(k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar \right) \end{cases}$$

I parametri A , B , C e D si ricavano imponendo le seguenti condizioni al contorno:

1. normalizzazione:

per la condizione sulla normalizzazione deve risultare $C=0$.

In assenza di tale condizione (*i.e.* se $C \neq 0$) il termine esponenziale $A e^{k_2x}$ porta alla divergenza dell'integrale:

$$\int_0^{+\infty} \left(C e^{k_2x} + D e^{-k_2x} \right)^* \left(C e^{k_2x} + D e^{-k_2x} \right) dx$$

E' facile vedere d'altra parte che se $C=0$ l'integrale:

$$\int_0^{+\infty} \left(D e^{-k_2x} \right)^* \left(D e^{-k_2x} \right) dx$$

è certamente convergente...

Si noti che normalizzazione non impone condizioni sui parametri A e B in quanto l'integrale che segue è sempre convergente...

$$\int_0^{+\infty} \left(A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} \right)^* \left(A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} \right) dx$$

Particelle confinate [28]

Alla fine le soluzioni si scrivono:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & x < 0 \quad \left(k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar \right) \\ \cancel{C e^{k_2 x}} + D e^{-k_2 x} & x \geq 0 \quad \left(k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar \right) \end{cases}$$

I parametri A , B , C e D si ricavano imponendo le seguenti condizioni al contorno:

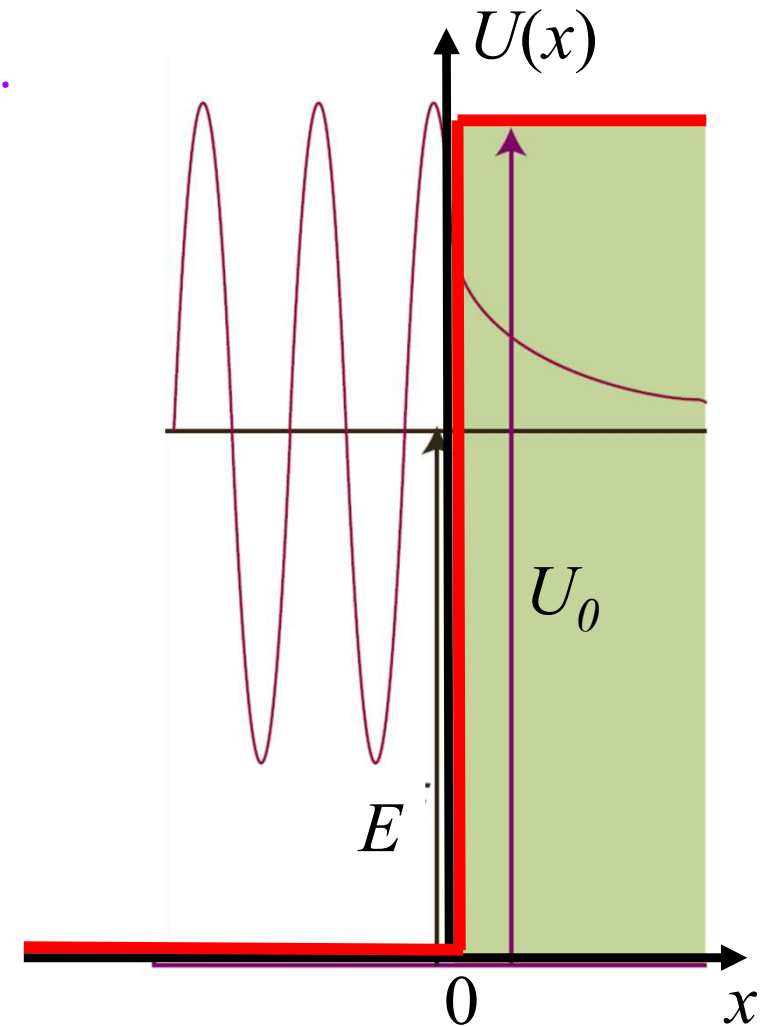
2. continuità tra autofunzioni e tra derivate in $x = 0$.

Si ottiene il sistema:

$$\begin{cases} A + B = D \\ ik_1 A - ik_1 B = -k_2 D \end{cases}$$

ossia:

$$\begin{cases} A = \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) \\ B = \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) \end{cases}$$



Particelle confinate [29]

Alla fine le autofunzioni (allo stato stazionario) sono:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & x < 0 \quad \left(k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar \right) \\ D e^{-k_2 x} & x \geq 0 \quad \left(k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar \right) \end{cases}$$

mentre le funzioni d'onda complete si scrivono:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} e^{-i\omega t} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} e^{-i\omega t} & x < 0 \\ D e^{-k_2 x} e^{-i\omega t} & x \geq 0 \end{cases}$$

Particelle confinate [30]

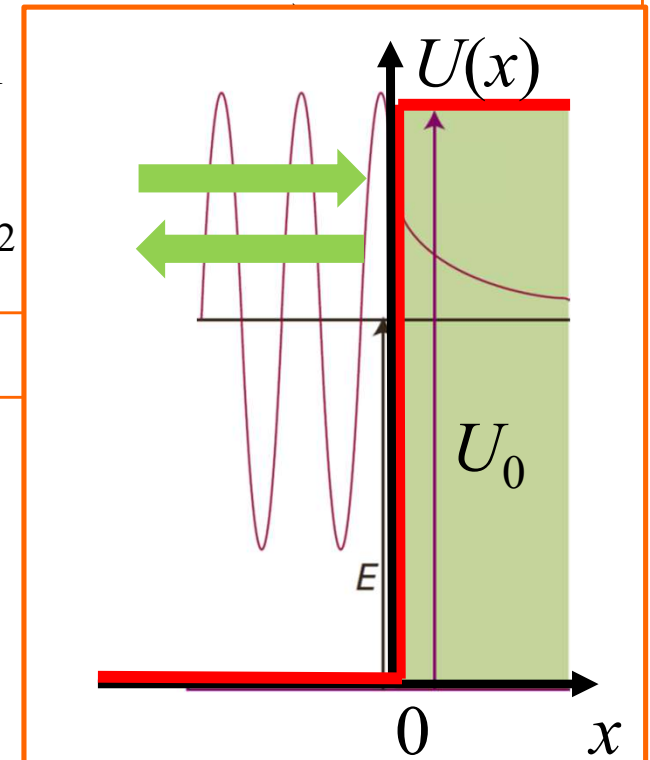
Alla fine le autofunzioni (allo stato stazionario) sono:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & x < 0 \quad (k_1) \\ D e^{-k_2 x} & x \geq 0 \quad (k_2) \end{cases}$$

mentre le funzioni d'onda complete si scrivono:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} e^{-i\omega t} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} e^{-i\omega t} \\ D e^{-k_2 x} e^{-i\omega t} \end{cases}$$

onda incidente **onda riflessa**



L'interpretazione della soluzione è che nella regione delle $x < 0$ la funzione d'onda è data dalla sovrapposizione di una funzione d'onda associata ad una particella incidente (in moto lungo l'asse positivo delle x) e di una funzione d'onda associata ad una particella riflessa (in moto lungo l'asse negativo delle x).

Particelle confinate [31]

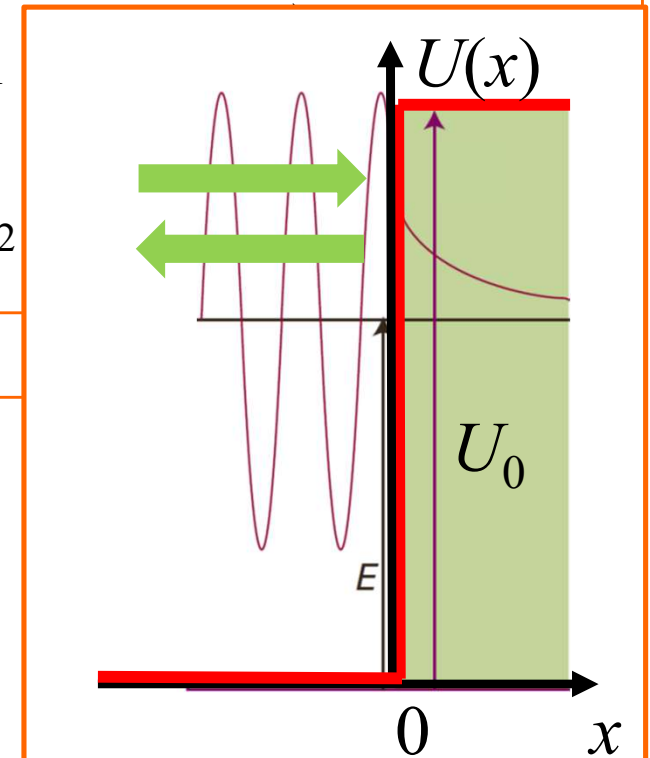
Alla fine le autofunzioni (allo stato stazionario) sono:

$$\psi(x) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} & x < 0 \quad (k_1) \\ D e^{-k_2 x} & x \geq 0 \quad (k_2) \end{cases}$$

mentre le funzioni d'onda complete si scrivono:

$$\Psi(x, t) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1 x} e^{-i\omega t} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1 x} e^{-i\omega t} \\ D e^{-k_2 x} e^{-i\omega t} \end{cases}$$

onda incidente onda riflessa



Il coefficiente di riflessione R quantistico (rapporto fra il modulo quadro dell'onda riflessa e il modulo quadro dell'onda incidente) risulta:

$$R = \frac{(1 - ik_2/k_1)^* (1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^* (1 + ik_2/k_1)} = \frac{|(1 - ik_2/k_1)|^2}{|(1 + ik_2/k_1)|^2} = 1$$

Il risultato esprime il fatto che nella regione per $x < 0$, per $E < U_0$, la particella viene sempre riflessa, in accordo con quanto previsto anche dalla meccanica classica...

Particelle confinate [32]

Tuttavia la previsione quantistica sorprendente è che la probabilità di trovare la particella nella regione $x > 0$ non è zero:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} \frac{D}{2} \left(1 + i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{ik_1x} e^{-i\omega t} + \frac{D}{2} \left(1 - i \frac{k_2}{k_1} \right) e^{-ik_1x} e^{-i\omega t} & x < 0 \\ D e^{-k_2x} e^{-i\omega t} & x \geq 0 \end{cases}$$

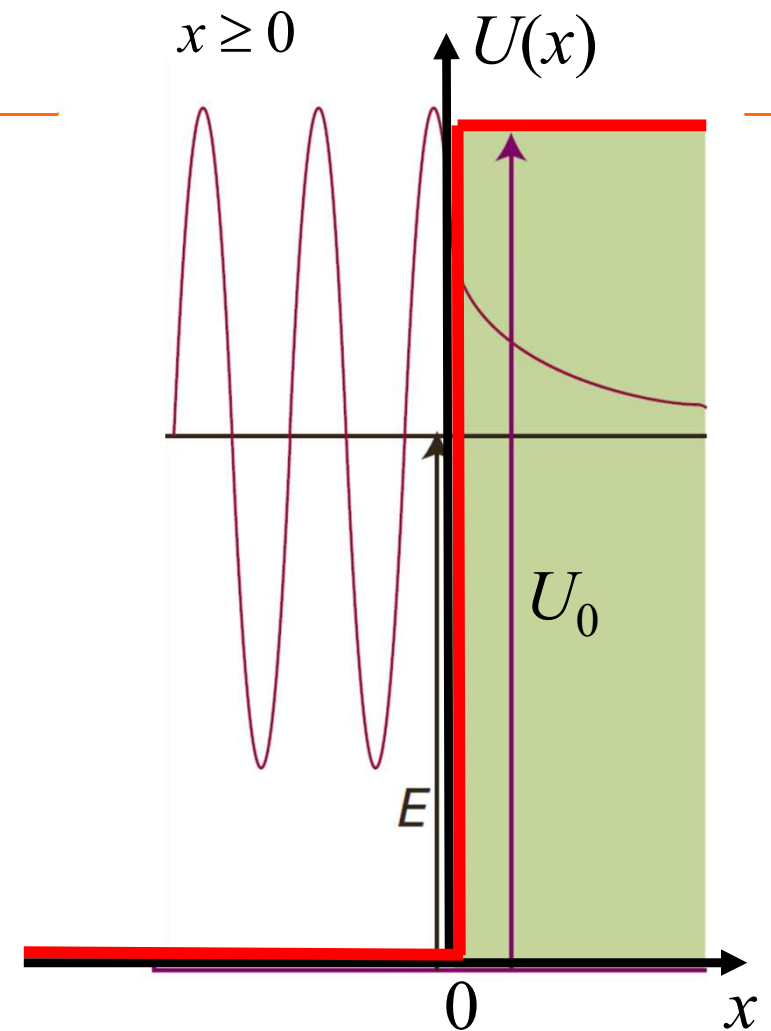
funzione d'onda
interna alla barriera

Per $x > 0$ vale:

$$\begin{aligned} |\Psi(x,t)|^2 &= \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) \\ &= \left(D^* e^{-k_2x} e^{i\omega t} \right) \left(D e^{-k_2x} e^{-i\omega t} \right) \\ &= |D|^2 e^{-2k_2x} \quad \text{con } k_2 \text{ reale.} \end{aligned}$$

Conclusione non interpretabile classicamente:

la probabilità di trovare la particella nella regione $x > 0$, classicamente proibita, è finita e non nulla...



Particelle confinate [33]

La probabilità di trovare la particella nella regione $x > 0$, classicamente proibita, è finita e non nulla...

In particolare, per $x > 0$, valgono:

$$dw = |\Psi(x, t)|^2 dx = |D|^2 e^{-2k_2 x} dx$$

con:

$$k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$$

In conclusione...

nella regione classicamente proibita ($x > 0$) il decadimento della densità di probabilità segue un andamento esponenziale...

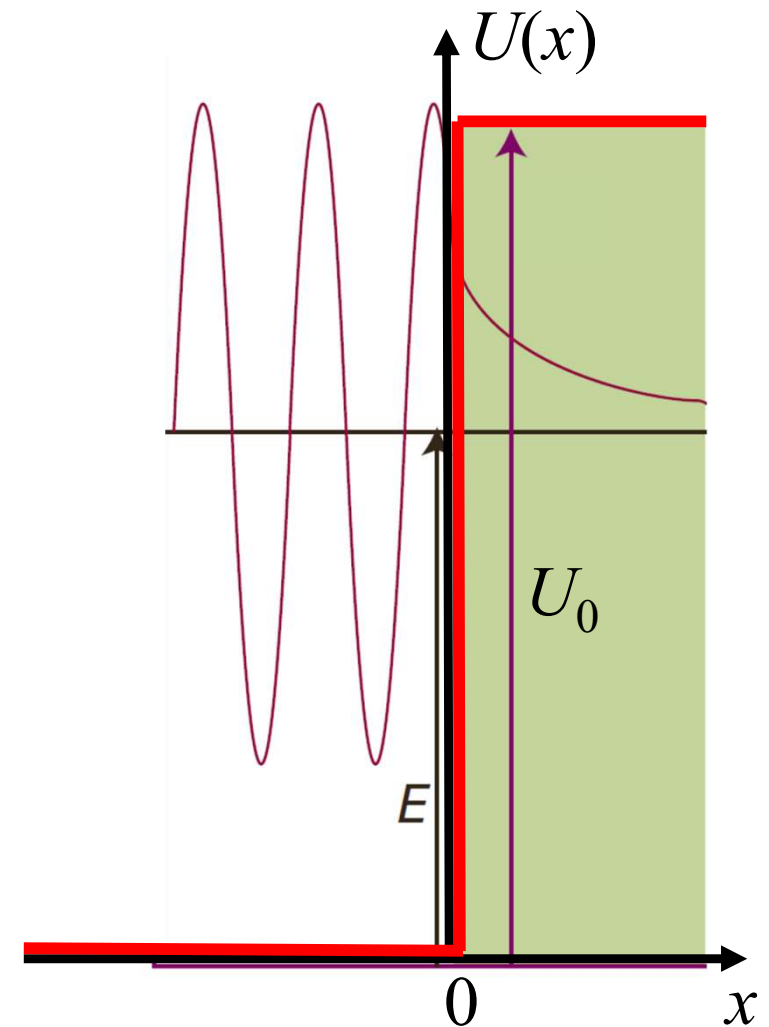
Tale decadimento è tanto più veloce quanto più:

(a) la particella ha massa elevata...

con masse macroscopiche la penetrazione è nulla.

(b) il termine $(U_0 - E)$ è elevato...

se $U_0 \rightarrow +\infty$ (gradino di altezza infinita) la penetrazione è nulla.



Particelle confinate [34]

La barriera di potenziale e l'effetto tunnel

Nella barriera di potenziale:

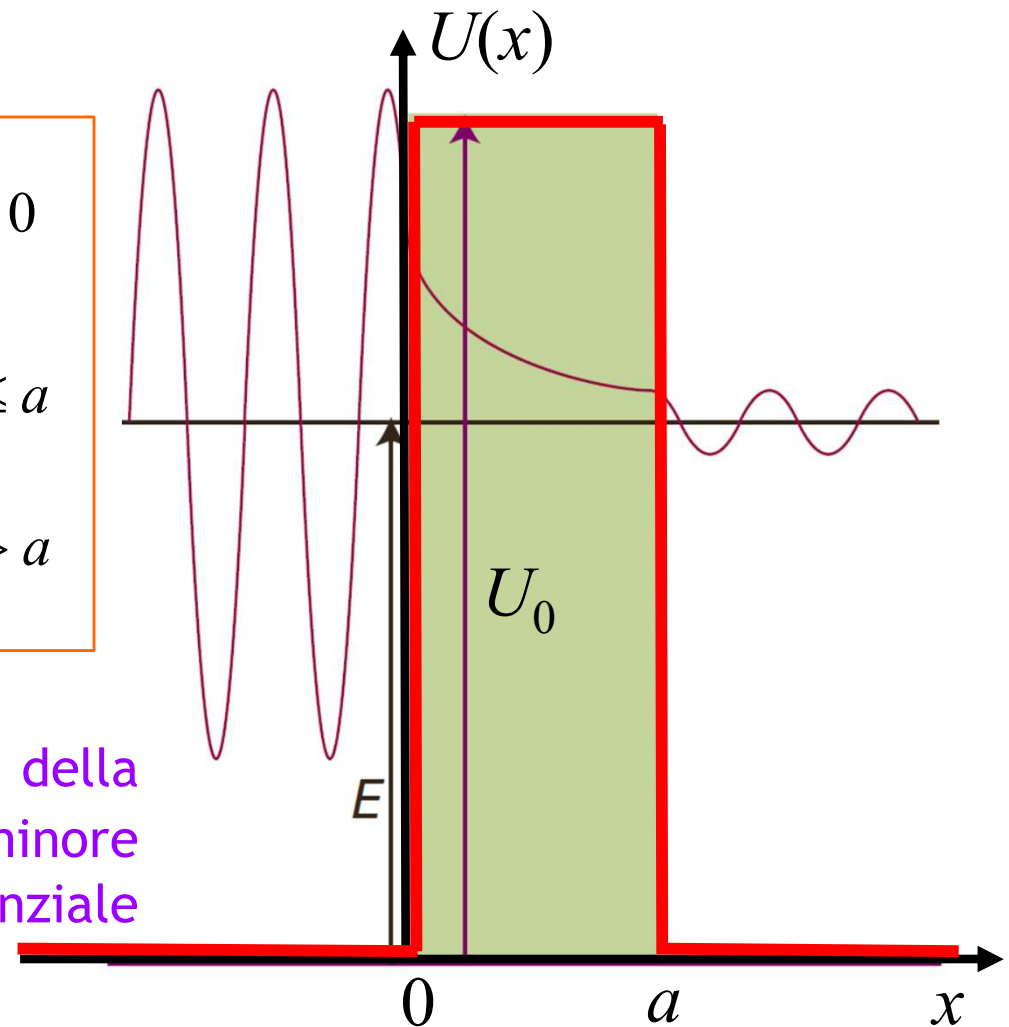
$$U(x,t) = U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & 0 \leq x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

vale l'equazione di Schroedinger:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= E\psi(x) & x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U_0\psi(x) &= E\psi(x) & 0 \leq x \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= E\psi(x) & x > a \end{aligned}$$

In particolare...

si assuma che l'energia cinetica E della particella nella regione $x < 0$ risulti minore all'ampiezza del gradino di energia potenziale ossia che valga $E < U_0$.



Particelle confinate [35]

La barriera di potenziale e l'effetto tunnel

Nella barriera di potenziale:

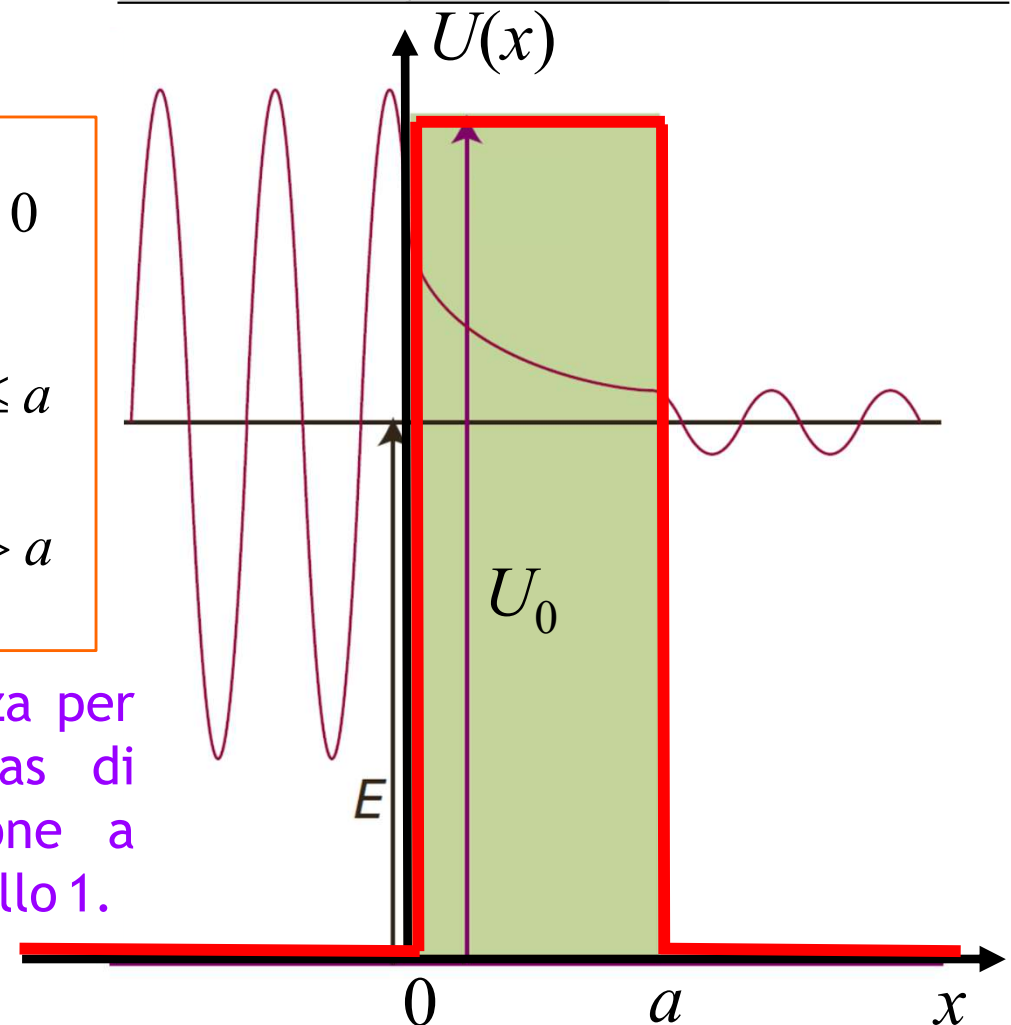
$$U(x,t) = U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & 0 \leq x < a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

vale l'equazione di Schroedinger:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= E\psi(x) & x < 0 \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + U_0\psi(x) &= E\psi(x) & 0 \leq x \leq a \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} &= E\psi(x) & x > a \end{aligned}$$

Il modello descritto è il punto di partenza per descrivere il comportamento di un gas di elettroni in prossimità di una giunzione a sandwich di tipo metallo 1/metallo 2/metallo 1.

metallo 1	metallo 2	metallo 1
$\vec{E} = -\nabla V = 0$	$\vec{E} = -\nabla V = 0$	$\vec{E} = -\nabla V = 0$
$V = V_{0,1} = 0$	$V = V_{0,2}$	$V = V_{0,1} = 0$
↓	↓	↓
$U_{0,1} = qV_{0,1} = 0$	$U_{0,2} = qV_{0,2} = U_0$	$U_{0,1} = qV_{0,1} = 0$



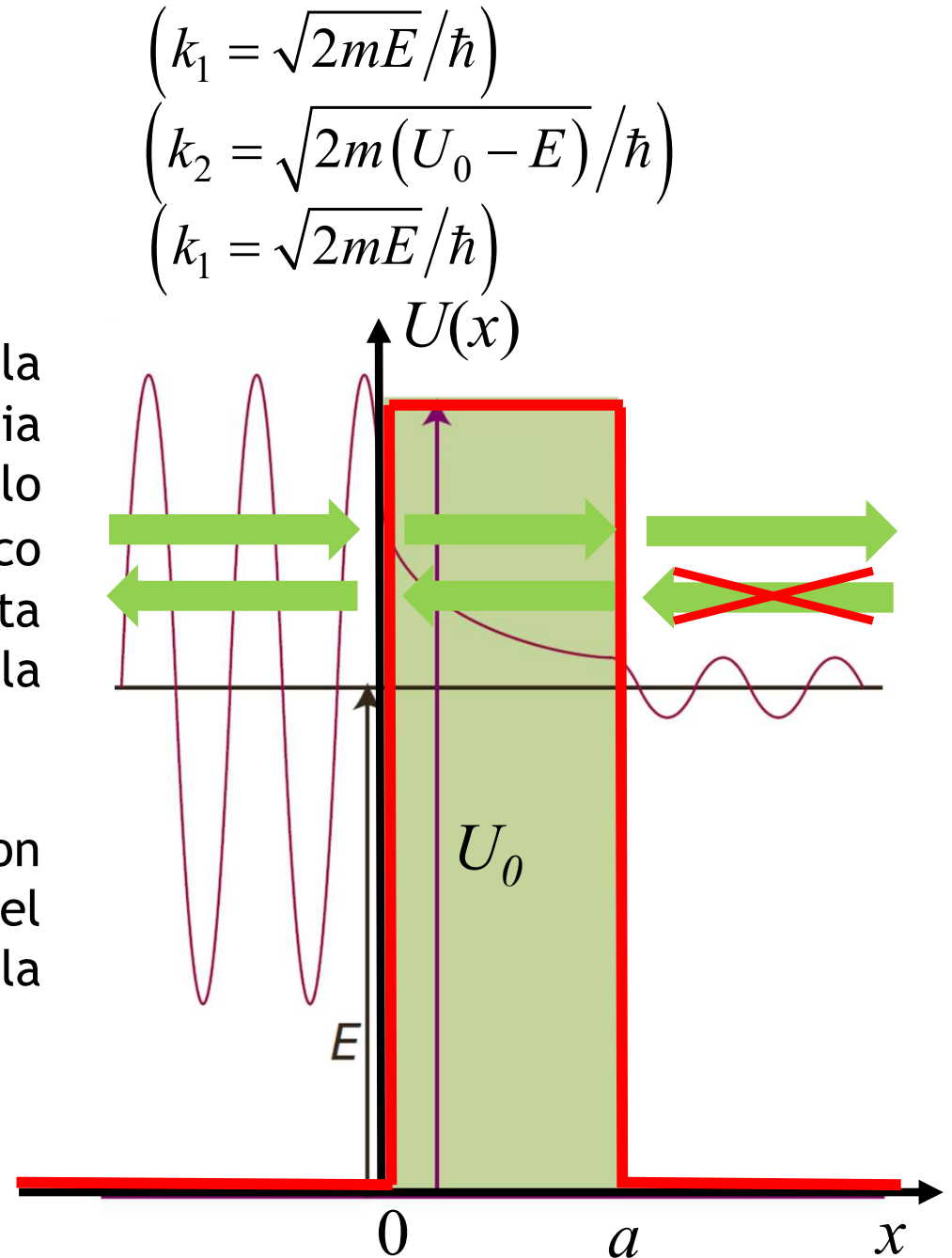
Particelle confinate [36]

Le soluzioni si scrivono:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} & x < a \\ C e^{k_2x} + D e^{-k_2x} & 0 \leq x \leq a \\ F e^{ik_1x} & x > a \end{cases} \quad \begin{cases} (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \\ (k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar) \\ (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \end{cases}$$

Si noti che si è imposto, per $x > a$, la condizione che la funzione d'onda sia associata ad una particella propagante solo verso dx (x crescenti). Non ha senso fisico ammettere l'esistenza di un'onda associata ad una particella propagante verso sx nella regione a dx della barriera....

Per senso fisico, dunque, è lecito non considerare, il termine esponenziale del tipo $G e^{-ik_1x}$ con momento $p = -\hbar k_1$ nella regione $x > a$.



Particelle confinate [37]

Le soluzioni si scrivono:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} & x < a \\ C e^{k_2x} + D e^{-k_2x} & 0 \leq x \leq a \\ F e^{ik_1x} & x > a \end{cases} \quad \begin{cases} (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \\ (k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar) \\ (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \end{cases}$$

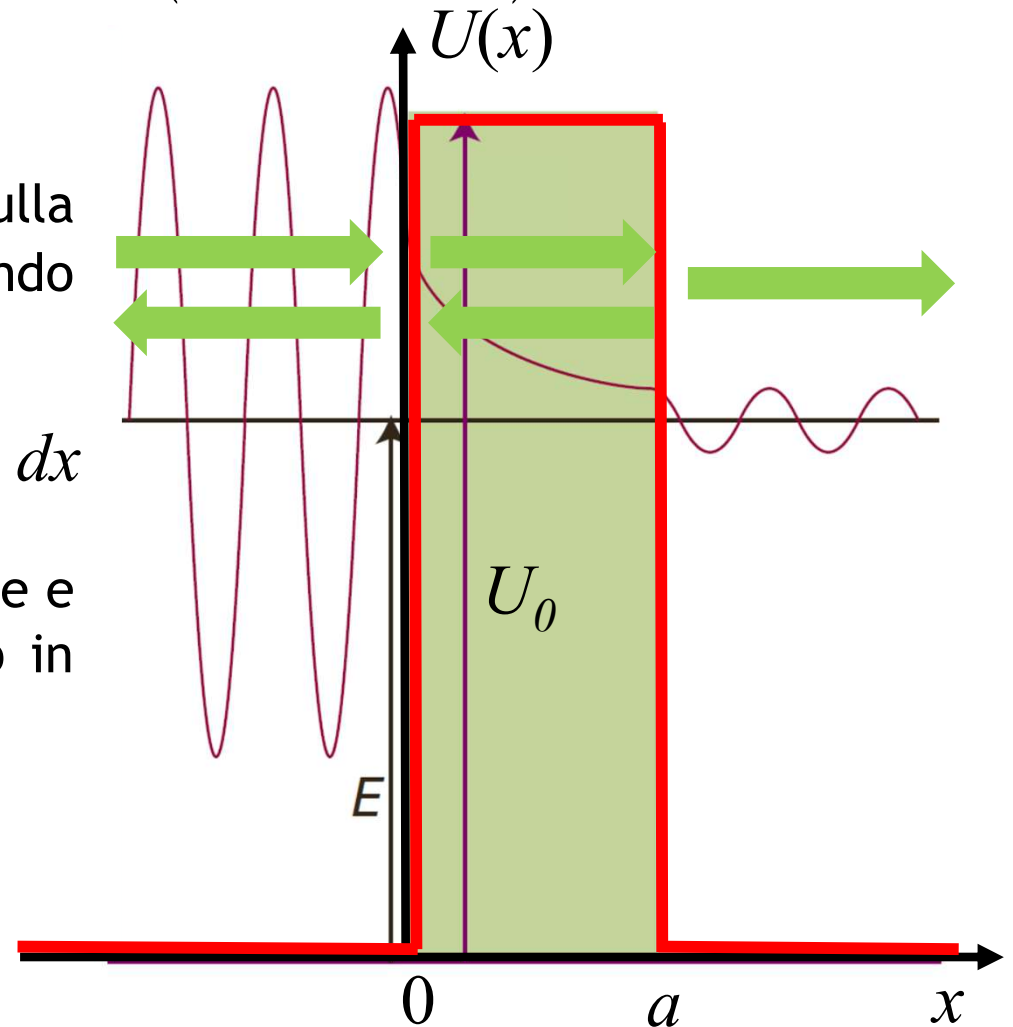
Condizioni al contorno:

1. normalizzazione.

Si noti che in questo caso la condizione sulla normalizzazione non richiede $C=0$ essendo l'integrale esteso su un dominio finito:

$$\int_0^a (C e^{k_2x} + D e^{-k_2x})^* (C e^{k_2x} + D e^{-k_2x}) dx$$

In tal caso con $C \neq 0$ l'integrale non diverge e il termine $C e^{ik_2x}$ deve essere tenuto in conto nelle soluzioni .



Particelle confinate [38]

Le soluzioni si scrivono:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & x < a \\ C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} & 0 \leq x \leq a \\ F e^{ik_1 x} & x > a \end{cases} \quad \begin{cases} (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \\ (k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar) \\ (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \end{cases}$$

Condizioni al contorno:

2. continuità tra autofunzioni e tra derivate in $x = 0$.

Si ottengono le condizioni:

$$A + B = C + D$$

$$ik_1 A - ik_1 B = k_2 C - k_2 D$$

3. continuità tra autofunzioni e tra derivate in $x = a$.

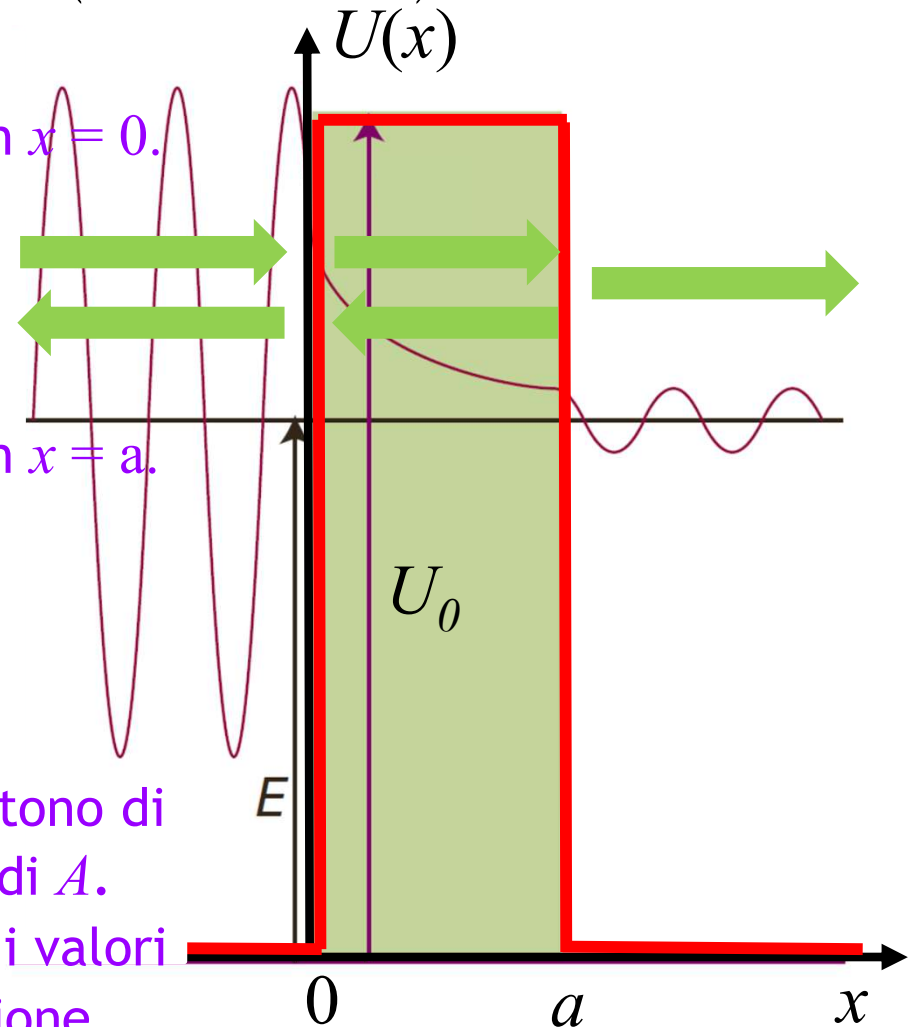
Si ottengono le condizioni:

$$C e^{k_2 a} + D e^{-k_2 a} = F e^{ik_1 a}$$

$$C k_2 e^{k_2 a} - D k_2 e^{-k_2 a} = F i k_1 e^{-k_1 a}$$

Le quattro condizioni messe a sistema permettono di ricavare i coefficienti B , C , D e F in funzione di A .

Ponendo (arbitrariamente) $A = 1$ si ottengono i valori numerici di B , C , D e F di una possibile soluzione...



Particelle confinate [39]

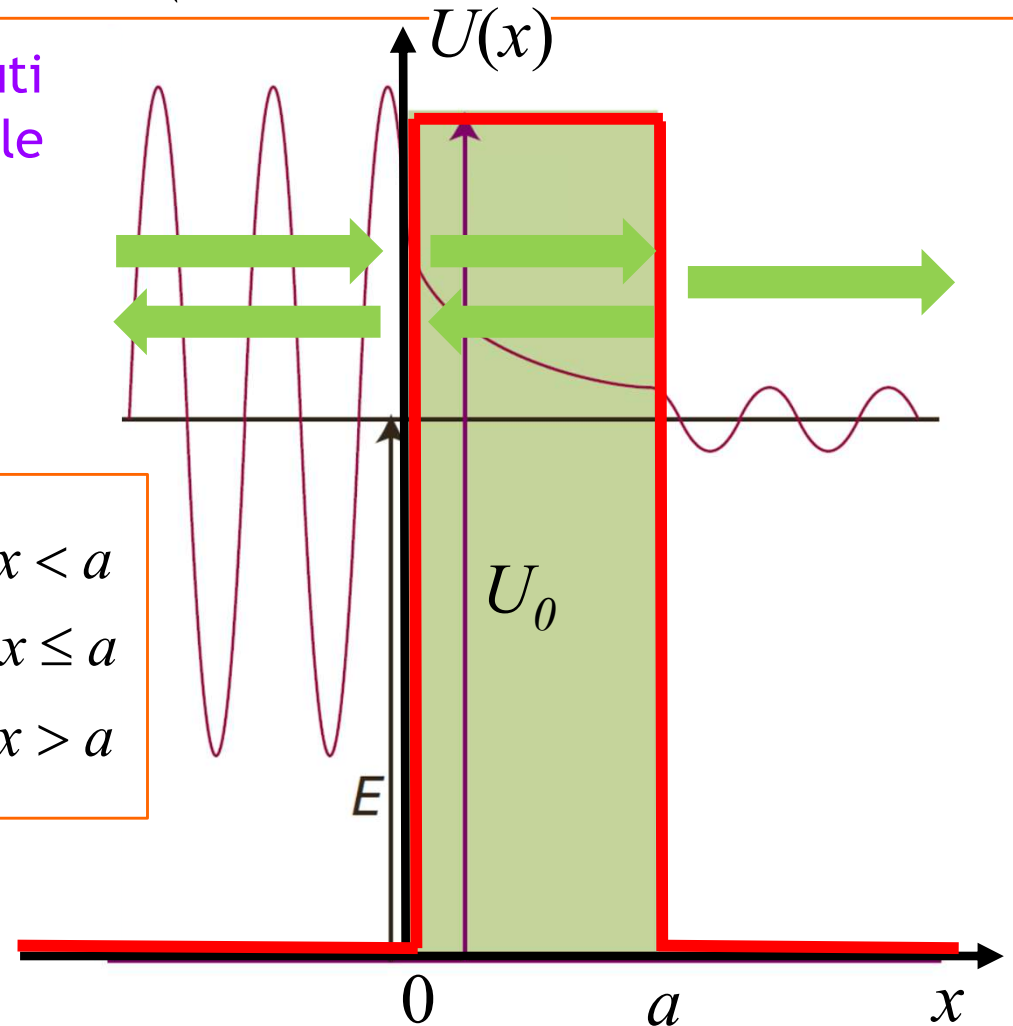
Alla fine la soluzione dell'equazione stazionaria si scrive:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x} & x < a \\ C e^{k_2 x} + D e^{-k_2 x} & 0 \leq x \leq a \\ F e^{ik_1 x} & x > a \end{cases} \quad \begin{cases} (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \\ (k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar) \\ (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \end{cases}$$

con $A=1$, B , C , D e F parametri ottenuti dalla risoluzione del sistema algebrico delle condizioni al contorno.

Le funzioni d'onda complete si scrivono:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} A e^{ik_1 x} e^{-i\omega t} + B e^{-ik_1 x} e^{-i\omega t} & x < a \\ C e^{k_2 x} e^{-i\omega t} + D e^{-k_2 x} e^{-i\omega t} & 0 \leq x \leq a \\ F e^{ik_1 x} e^{-i\omega t} & x > a \end{cases}$$



Particelle confinate [40]

In particolare nella regione $x > a$ la soluzione completa si scrive:

$$\Psi(x,t) = F e^{ik_1x} e^{-i\omega t}$$

con F coefficiente non nullo:

$$F = \frac{-4ik_1k_2}{(k_2 - ik_1)^2 e^{(ik_1+k_2)a} - (k_2 + ik_1)^2 e^{(ik_1+k_2)a}}$$

il che implica una densità di probabilità non nulla a destra della barriera:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) = F^* e^{-ik_1x} e^{+i\omega t} F e^{ik_1x} e^{-i\omega t} = |F|^2$$

con :

$$|F|^2 = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2} \quad \begin{aligned} & \left(k_1 = \sqrt{2mE} / \hbar \right) \\ & \left(k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar \right) \end{aligned}$$

Vale:

$$dw = |\Psi(x,t)|^2 dx = |F|^2 dx$$

La probabilità di trovare la particella nella regione $x > a$, oltre la barriera di potenziale, è finita e non nulla...

Il fenomeno, non spiegabile classicamente prende il nome di effetto tunnel...!

Particelle confinate [41]

A partire dalla soluzione trovata:

$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik_1x} + B e^{-ik_1x} & x < a \\ C e^{k_2x} + D e^{-k_2x} & 0 \leq x \leq a \\ F e^{ik_1x} & x > a \end{cases} \quad \begin{cases} (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \\ (k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar) \\ (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar) \end{cases}$$

con $A=1$, B , C , D e F parametri ottenuti dalla risoluzione del sistema algebrico delle condizioni al contorno.

è possibile calcolare la probabilità di penetrazione della barriera (rapporto tra la densità di probabilità della funzione d'onda associata alla particella trasmessa e la densità di probabilità della funzione d'onda associata alla particella incidente):

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{4k_1^2 k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2 k_2 a + 4k_1^2 k_2^2}$$

Alla fine dopo una certa quantità di calcoli...

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1+G} \quad G = \frac{(e^{a/D} - e^{-a/D})}{16\varepsilon(1-\varepsilon)} \quad D = \left[\frac{\hbar^2}{2m(U_0 - E)} \right]^{1/2} \quad \varepsilon = \frac{E}{U_0}$$

Particelle confinate [42]

Le espressioni per la penetrazione della barriera si semplificano considerando una barriera alta e stretta... :

$$T = \frac{|F|^2}{|A|^2} = \frac{1}{1+G} \quad G = \frac{\left(e^{a/D} - e^{-a/D}\right)^2}{16\varepsilon(1-\varepsilon)} \quad D = \left[\frac{\hbar^2}{2m(U_0 - E)} \right]^{1/2} \quad \varepsilon = \frac{E}{U_0}$$

Vale:

$$a/D = a \left[\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2} \right]^{1/2} = k_2 a$$

Nel limite in cui:

- (a) m risulti sufficientemente grande (massa macroscopica...);
- (b) il termine $(U_0 - E)$ risulti sufficientemente grande (barriera di energia potenziale sufficientemente alta rispetto all'energia della particella...);
- (c) a risulti sufficientemente grande (barriera lunga...);

vale:

$$a/D \gg 1 \Rightarrow e^{a/D} - e^{-a/D} \simeq e^{a/D} \Rightarrow G \simeq \frac{e^{2a/D}}{16\varepsilon(1-\varepsilon)} \gg 1 \Rightarrow T = \frac{1}{1+G} \simeq \frac{1}{G}$$

$$T \simeq G^{-1} = \frac{16\varepsilon(1-\varepsilon)}{\left(e^{a/D} - e^{-a/D}\right)^2} \simeq 16\varepsilon(1-\varepsilon)e^{-2a/D} \sim e^{-2a/D} \sim e^{-2k_2 a}$$

Particelle confinate [43]

Conclusioni...

Vale:

$$T \sim e^{-2a/D} = e^{-2k_2 a} = e^{-2 \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar} a}$$

Nel limite in cui:

- (a) m risulti sufficientemente grande (massa macroscopica...);
- (b) il termine $(U_0 - E)$ risulti sufficientemente grande (barriera di energia potenziale sufficientemente alta rispetto all'energia della particella...);
- (c) a risulti sufficientemente grande (barriera lunga...);

la probabilità di penetrazione della barriera per effetto tunnel decresce esponenzialmente con lo spessore a della barriera e con il parametro k_2 ...