

FISICA MODERNA

CdLM Ingegneria Energetica - sede di Bologna
CdLM Ingegneria Elettrica - sede di Bologna

05 – Meccanica quantistica 2



Prof. Mauro Villa

Anno Accademico 2016/2017

Dettaglio del corso

- Stati liberi e stati legati
 - Eq. di Schroedinger con potenziale.
 - Stati legati unidimensionali:
 - Stati stazionari;
 - buca di potenziale infinita
 - buca di potenziale finito
 - Oscillatore armonico
 - Stati liberi
 - barriera di potenziale (step singolo e doppio)
 - effetto tunnel
 - Esempi: microscopia ad effetto tunnel, decadimenti beta, fusione nucleare
- L'atomo di idrogeno
 - Problemi in 3 dimensioni
 - Livelli energetici, numeri quantici
- Emissione di luce
 - Spettri di emissione e di assorbimento
 - Spettri di corpo nero
 - Principio di funzionamento dei Laser
- Spin e fisica atomica
 - Spin ed elettroni in un campo B
 - Spin e statistica
 - Interazione spin orbita e doppietti spettrali

Materiale didattico e testi

- Halliday, Resnik, *Fondamenti di Fisica – Fisica Moderna*, CEA
- Franco Cicacci, *Fisica Atomica e quantistica*, EdiSES

Prima parte: Stati legati

- Equazione di Schrödinger con potenziale
- Soluzioni all'eq. di Schrödinger: stati stazionari
- Normalizzazione e continuità delle funzioni d'onda
- Esempio I: buca di potenziale infinita
- Grandezze fisiche: operatori ed incertezze; osservabili

- Esempio II: buca di potenziale finita
- Esempio III: Forza elastica / Oscillatore armonico
- Sovrapposizione ed evoluzione di stati
- Principio di corrispondenza: M. Quantistica \leftrightarrow M. Classica

Elementi di una descrizione Quanto Meccanica (1D)

- **Elementi di meccanica classica: problema unidimensionale.**

- Descrizione: legge oraria (incognita) e forze $x(t), f(x)$
- Legge del moto $f(x) = m\ddot{x}$
- Soluzione (C.I.) e caratteristiche: $x(t) = \dots, v(t) = \dot{x}, E = \frac{1}{2}mv^2 + U, \dots$

- **Elementi Quanto Meccanici (1D)**

- Funzione d'onda (incognita) $\Psi(x, t)$
- Interpretazione probabilistica $P(x, t)dx = |\Psi(x, t)|^2 dx$
- Legge di evoluzione della F.O. $f(\Psi(x, t), \dot{\Psi}(x, t), \ddot{\Psi}(x, t)) = 0$
- Soluzione definita dalle condizioni iniziali $\Psi(x, t) = \dots$
- Grandezze misurabili (??)

Equazione di Schrödinger (particella libera)

Eq per la particella libera (1D):
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t}$$

Caratteristiche principali:

eq differenziale *lineare e omogenea* su quantità energetiche

Vale il **Principio di sovrapposizione**:

$$\psi_1; \psi_2 \text{ soluzioni} \Rightarrow \psi = a\psi_1 + b\psi_2 \text{ soluzione}$$

La soluzione $\Psi(x,t) = Ae^{i(kx-\omega t)}$ rappresenta un'onda piana.

Sostituendo nella equazione di Schrödinger, si ottiene

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \cancel{\Psi(x,t)} = \hbar \omega \cancel{\Psi(x,t)} \quad \text{ma} \quad \left. \begin{array}{l} E = \hbar \omega \\ p = \hbar k \end{array} \right\} \Rightarrow (K \equiv) \frac{p^2}{2m} = E = \frac{1}{2} m v^2$$

che rispecchia la proprietà della particella libera

(non soggetta a forze e quindi senza energia potenziale).

Normalizzazione delle funzioni d'onda

Che significato **fisico** diamo all'ampiezza della funzione d'onda?

- Probabilità di trovare la particella in un intervallo di larghezza dx :

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx$$

- Certezza di trovare la particella da qualche parte:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1$$

L'eq definisce la costante moltiplicativa della funzione d'onda.

Solitamente si tratta di un numero definito a meno di una fase

ininfluente. Se $\Psi(x,t)$ è soluzione norm. \rightarrow anche $\Psi(x,t) e^{i\theta}$ lo è

Eccezione: onde piane. O non si normalizza $\rightarrow \Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$

o si normalizza in un "volume" (lunghezza) arbitrario (V)

$$P(V)=1 \rightarrow \Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)} / \sqrt{V}$$

Eq. di Schrödinger con potenziale

- In meccanica classica l'equazione energetica di riferimento è'

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + U(x) = \frac{p^2}{2m} + U(x)$$

- Una naturale estensione dell'equazione di Schrödinger in presenza di potenziali è quindi:

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

- Il principio di corrispondenza MC \leftrightarrow MQ è così soddisfatto

In MC, il *moto di un corpo* è determinato sulla base delle equazioni cardinali della meccanica: eq. sulle forze e sui momenti delle forze.

In MQ, lo *stato di un sistema* (Ψ) è determinato sulla base dell'equazione di Schrödinger: trovare la $\Psi(x, t)$ conoscendo la $U(x)$

Soluzioni all'eq. di Schrödinger: stati stazionari (I)

L'eq. di Schrödinger è una eq *lineare* alle derivate parziali in $\Psi(x,t)$ che si risolve in diversi passi.

Conseguenze della linearità:

$$\psi_1; \psi_2 \text{ soluzioni} \Rightarrow \psi = a\psi_1 + b\psi_2 \text{ soluzione}$$

Come trovo una prima soluzione?

Ipotesi. Separazione delle variabili: $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$

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

$\psi(x)$ parte spaziale

$\varphi(t)$ parte temporale

Infine divido tutto per $\psi(x)\varphi(t)$:

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

**C non dipende
da x o da t**

Stati stazionari: II - parte temporale $\varphi(t)$

Iniziamo ad analizzare la parte temporale.

Si tratta di una eq differenziale lineare al primo ordine:

$$i\hbar \frac{1}{\varphi(t)} \frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = C \rightarrow \frac{d\varphi(t)}{dt} = -i \frac{C}{\hbar} \varphi(t)$$

Notare il cambio
 $\partial \rightarrow d$

La cui soluzione è facile: $\varphi(t) = A e^{-i(C/\hbar)t}$

Si tratta della parte temporale dell'equazione delle onde.

Questa soluzione ha una pulsazione data da: $\omega = C / \hbar$

E quindi una energia E data da : $E = \hbar \omega = C$

La costante C ha le dimensioni dell'energia (verificare!) e rappresenta l'energia associata ad una determinata funzione d'onda. Nel processo di separazione delle variabili abbiamo imposto che l'energia del sistema sia ben definita!

Stati stazionari: III – definizione ed energia

Proprietà principale degli stati ad energia E definita:

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\varphi(t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$$

Notare l'assenza di A

La densità di probabilità non dipende dal tempo:

$$P(x, t) = \Psi^*(x, t)\Psi(x, t) = [\psi^*(x)e^{+iEt/\hbar}][\psi(x)e^{-iEt/\hbar}] = \psi^*(x)\psi(x) = P(x)$$

Poiché la probabilità $P(x, t)$ non varia con t , lo stato *osservabile* del sistema non varia nel tempo. Tali stati quantistici sono detti

stati stazionari.

Per tali stati l'energia E è nota con precisione. Per il principio di indeterminazione di Heisenberg, in tali stati il tempo è una quantità non determinabile: $\Delta E \Delta t > \hbar / 2$

Stati stazionari: IV – parte spaziale $\psi(x)$

Riprendiamo l'eq di Schrödinger e sostituiamo la $\varphi(t)$:

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

Dopo alcuni passaggi si perviene *all'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo*:

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

Caratteristiche: eq differenziale lineare alle derivate seconde (no derivate parziali in 1D) senza termini complessi. La $\psi(x)$ può essere reale (ma ricordate che se $\psi(x)$ è una soluzione allora anche $a\psi(x)$ con a costante complessa lo è!)

Normalizzazione delle funzioni d'onda spaziali $\psi(x)$

Che significato **fisico** diamo all'ampiezza della funzione d'onda?

- Probabilità di trovare la particella in un intervallo di ampiezza

dx :

$$P(x,t)dx = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx \quad (= \psi^*(x)\psi(x)dx)$$

- Certezza di trovare la particella da qualche parte:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t)\Psi(x,t)dx = 1 \quad \left(= \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx \right)$$

L'eq definisce la costante moltiplicativa della funzione d'onda.

Solitamente si tratta di un numero definito a meno di una fase

ininfluente. Se $\psi(x)$ è soluzione norm. \rightarrow anche $\psi(x) e^{i\theta}$ lo è

Eccezione: onde piane. O non si fa la normalizzazione $\rightarrow \psi(x) = e^{ikx}$

o si normalizza in un "volume" (lunghezza) arbitrario (V)

$$P(V)=1 \rightarrow \psi(x) = e^{ikx} / \sqrt{V}$$

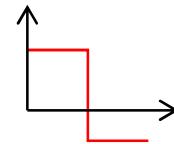
Continuità della funzione d'onda (I)

- Riscriviamo l'equazione di Schrödinger nella forma:

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

- Se $U(x)$ è una funzione continua e $\psi(x)$ è almeno una funzione C_0 ,
→ $\psi''(x)$ è continua e quindi $\psi(x)$ è una funzione almeno C_2
- In generale, se $U(x)$ è una funzione C_n , allora $\psi(x)$ è una funzione C_{n+2}

- Se $U(x)$ presenta un salto finito,
allora la $\psi''(x)$ sarà discontinua, ma la $\psi'(x)$ sarà continua e
così anche la $\psi(x)$



Continuità della funzione d'onda (II)

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

- Se $U(x)$ presenta un salto infinito, allora la $\psi''(x)$ sarà discontinua, così anche la $\psi'(x)$, ma la $\psi(x)$ sarà ancora continua.

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ u & x > 0 \end{cases}$$

Regola generale: la $\psi(x)$ è sempre continua

La nostra prima soluzione: $\psi(x)=0$ per $x<0$

per $x > 0$: $\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (u - E)\psi(x)$ posto $k = \sqrt{2m(E - u)} / \hbar$

$$\rightarrow \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0 \quad \rightarrow \quad \psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)$$

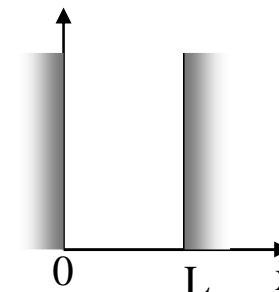
La continuità in $x=0$ ci impone: $\psi(0) = 0 = A\sin 0 + B\cos 0 = B \rightarrow B = 0$

per $x > 0$: $\psi(x) = A\sin(kx)$ con $k = \sqrt{2m(E - u)} / \hbar \quad \rightarrow \quad \Psi(x, t) = A\sin(kx) e^{-iEt/\hbar}$

Esempio I: buca di potenziale infinita (I)

Determiniamo la funzione d'onda per un potenziale dato da:

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 & (I) \\ 0 & 0 < x < L & (II) \\ +\infty & x > L & (III) \end{cases} \quad \text{(buca di potenziale)}$$



Soluzione:
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (U(x)\psi(x) - E\psi(x))$$

La nostra prima soluzione: $\psi_I(x)=0$ per $x < 0$

e $\psi_{III}(x)=0$ per $x > L$

La particella non può mai trovarsi a x negative, né a $x > L$

per $0 < x < L$:
$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x)$$

$$\rightarrow \psi_{II}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad \text{con} \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}, \quad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Esempio I: buca di potenziale infinita (II)

Nella regione II: $\psi_{II}(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$

A , B , $E(k)$, incogniti. Richiedo la continuità per $x=0$:

per $x=0$, $\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow 0 = B$ $\psi_{II}(x) = A \sin(kx)$

Richiedo la continuità per $x=L$:

per $x=L$, $\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \rightarrow A \sin kL = 0$

$\rightarrow A = 0$ oppure $kL = \pi n$ con n intero

$k = \frac{n\pi}{L} \rightarrow E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$ Solo certi valori di energia sono permessi;
L'energia è quantizzata

Normalizzazione: $\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx = 1 \rightarrow \int_0^L \psi_{II}^*(x) \psi_{II}(x) dx = 1 \rightarrow A^* AL / 2 = 1$

Posso scegliere A reale: $\psi_{II}(x) = \sin(kx) \sqrt{2/L}$

Esempio I: buca di potenziale infinita (III)

- Soluzione completa all'eq. Indipendente da t :

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 & (I) \\ 0 & 0 < x < L & (II) \\ +\infty & x > L & (III) \end{cases} \rightarrow \psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 & (I) \\ \text{sen}(kx)\sqrt{2/L} & 0 < x < L & (II) \\ 0 & x > L & (III) \end{cases}$$

Dove $k = k_n = \frac{n\pi}{L} \rightarrow E = E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2$ con n intero > 0

Reintroduciamo il tempo:

$$\Psi_n(x, t) = \text{sen}(k_n x) e^{-iE_n t / \hbar} \sqrt{2/L}$$

Soluzione con
energia E_n definita

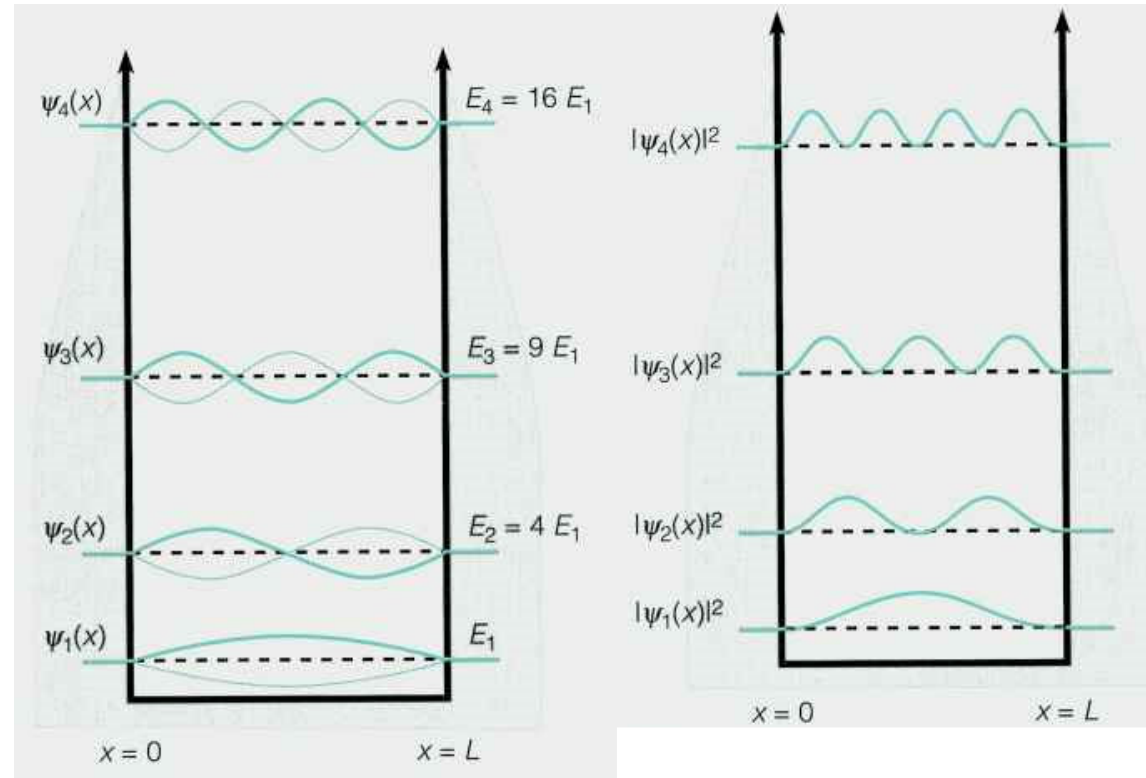
Usiamo il *principio di sovrapposizione* per trovare la soluzione più generale:

$$\Psi(x, t) = \sum_1^{+\infty} c_n \Psi_n(x, t) = \sum_1^{+\infty} c_n \text{sen}(k_n x) e^{-iE_n t / \hbar} \sqrt{2/L} \quad \text{con} \quad \sum_1^{+\infty} |c_n|^2 = 1$$

I coefficienti c_n sono determinati dalle condizioni iniziali.

Buca di potenziale infinita

Primi stati
stazionari:



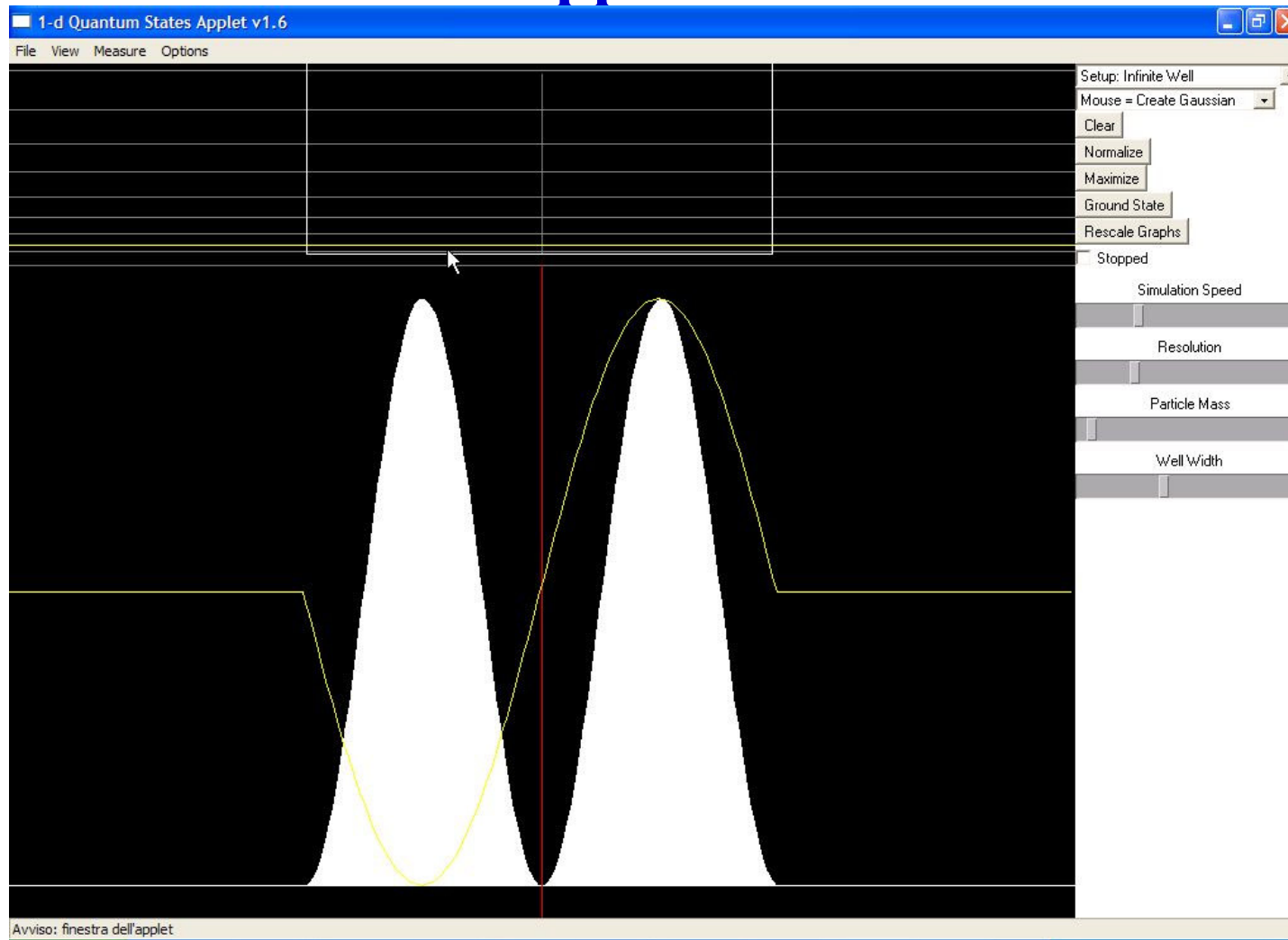
Livello di minima energia ($n=1$, ground state):

$$\Psi_1(x, t) = \text{sen}(\pi x / L) e^{-iE_1 t / \hbar} \sqrt{2 / L} \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Secondo livello energetico ($n=2$):

$$\Psi_2(x, t) = \text{sen}(2\pi x / L) e^{-i4E_1 t / \hbar} \sqrt{2 / L} \quad E_2 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 = n^2 E_1 = 4E_1$$

Applet Java



<http://ishtar.df.unibo.it/Uni/bo/ingegneria/all/villa/stuff/2005/LS/appl/1DStates/index.html>

Grandezze fisiche: operatori ed incertezze

- Abbiamo una soluzione completa all'equazione di Schrödinger. Ormai sappiamo tutto del nostro sistema quantistico....
- Ma come si determina la posizione, l'impulso, la velocità e l'energia di una particella conoscendo la funzione d'onda?

Generalizzando il concetto di probabilità:

$P(x)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$ è la probabilità di trovare la particella nell'intervallo $x, x+dx$. La probabilità di *misurare* un valore x in un intorno di $x, x+dx$ è quindi: $P(x)dx = \psi^*(x)\psi(x)dx$

Calcolo il valore medio della quantità x attraverso l'espressione della *media pesata*:

$$\langle x \rangle = \int xP(x)dx = \int \psi^*(x) x \psi(x)dx$$

Operatori ed Incertezze

Stati stazionari:

Posizione: $\langle x \rangle = \int xP(x)dx = \int \psi^*(x)x\psi(x)dx$

Potenze della posizione: $\langle x^n \rangle = \int x^n P(x)dx = \int \psi^*(x)x^n\psi(x)dx$

$$(U(x) = U_0 + U_1x + U_2x^2 + U_3x^3 \dots)$$

Incerteza sulla posizione: $\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

Stati non stazionari:

Posizione: $\langle x \rangle(t) = \int xP(x,t)dx = \int \Psi^*(x,t)x\Psi(x,t)dx$

Incerteza sulla posizione: $\Delta x(t) = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2}$

Per gli stati non stazionari le grandezze fisiche osservabili (e le loro incertezze) sono funzione del tempo t

Principio di indeterminazione di Heisenberg: $\Delta x \cdot \Delta p \geq \hbar / 2$ 22

Generalizzando....

Possiamo facilmente generalizzare per funzioni generiche della posizione: $f(x) = f_0 + f_1x + f_2x^2 + f_3x^3 \dots$

$$\langle f(x) \rangle(t) = \int f(x)P(x,t)dx = \int \Psi^*(x,t)f(x)\Psi(x,t)dx$$

Generalizziamo ulteriormente utilizzando il concetto di *operatore funzionale* \bar{O} : $\bar{O}\Psi(x,t) = f(x,t)$

L'operatore funzionale è una operazione sulla funzione $\Psi(x,t)$

$$\langle O \rangle(t) = \int \Psi^*(x,t)\bar{O}\Psi(x,t)dx = \int \left\{ \Psi^*(x,t) \left[\bar{O}\Psi(x,t) \right] \right\} dx$$

In MQ, tutte le *quantità fisiche misurabili* (posizione, energia) sono *operatori funzionali*. I valori medi di tali operatori sono detti “**osservabili**” (quantità osservabile, misurabile), per distinguerli dalla funzione d'onda che non è osservabile né misurabile.

Principali osservabili fisiche

- Posizione. Operatore $\bar{O} = x$

$$\text{Osservabile: } \langle x \rangle = \int x P(x) dx = \int \psi^*(x) x \psi(x) dx$$

- Impulso. Operatore $\bar{O} = p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\text{Osservabile: } \langle p \rangle = -\int \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial x} dx = -\int \psi^*(x) i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} dx$$

- Energia. Operatore $\bar{O} = \bar{E} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx \quad \left(= \sum |c_n|^2 E_n \right)$$

Nota bene: l'equazione di Schrödinger è tra operatori:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \quad \rightarrow \quad \left(\frac{p^2}{2m} + U(x) \right) \Psi(x,t) = \bar{E} \Psi(x,t)$$

Esercizio sulla buca di potenziale infinita

- Calcolare le osservabili *posizione* e *impulso* e le loro incertezze per la funzione d'onda di minima energia

$$\Psi_1(x, t) = \text{sen}(\pi x / L) e^{-iE_1 t / \hbar} \sqrt{2 / L} \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Posizione: $\langle x \rangle = \int \psi_1^*(x) x \psi_1(x) dx = \int_0^L x \text{sen}^2(k_1 x) dx (2/L) = L/2$

$$\langle x^2 \rangle = \int \psi_1^*(x) x^2 \psi_1(x) dx = \int_0^L x^2 \text{sen}^2(k_1 x) dx (2/L) = L^2 \left(\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2} \right)$$

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} \simeq 0,181L$$

Impulso: $\langle p \rangle = -\int \psi_1^*(x) i\hbar \frac{d\psi_1(x)}{dx} dx = -i\hbar \int_0^L k_1 \text{sen}(k_1 x) \cos(k_1 x) dx (2/L) = 0$

$$\langle p^2 \rangle = -\hbar^2 \int \psi_1^*(x) \frac{d^2\psi_1(x)}{dx^2} dx = 2mE_1 \quad \Delta p = \sqrt{\langle p^2 \rangle - \langle p \rangle^2} = \frac{\pi\hbar}{L}$$

Principio di indeterminazione: $\Delta x \cdot \Delta p = 0.568\hbar$

Rifare l'esercizio
per $\Psi_2(x, t)$

Riassunto della lezione precedente

- Equazione fondamentale della Meccanica Quantistica:

- Equazione di Schroedinger in 1D

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

- Nell'ipotesi di fattorizzazione delle variabili $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t)$

- Si arriva all'eq. di Schroedinger indipendente dal tempo

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

- Soluzione ad energia definita: $\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) = \psi(x) e^{-iEt/\hbar}$

- Normalizzazione $\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x,t) \Psi(x,t) dx = 1 \quad \left(= \int \psi^*(x) \psi(x) dx \right)$

- Soluzione completa: $\Psi(x,t) = \sum c_n \Psi_n(x,t) \quad \text{con} \quad \sum |c_n|^2 = 1$

Buca di potenziale infinita: riassunto

- Abbiamo visto:
 - 1) Come passare dall'eq di Schrödinger completa a quella indipendente dal tempo (separazione delle variabili);
 - 2) Come risolvere la parte temporale (energia definita);
 - 3) Come risolvere la parte spaziale (per regioni omogenee)
 - 4) Come usare la continuità della funzione d'onda per determinare alcune caratteristiche della $\psi(x)$
 - 5) Come *ottenere* la quantizzazione dell'energia imponendo la continuità:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad \text{con } n \text{ intero;}$$

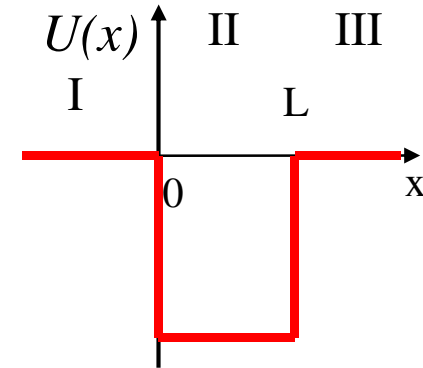
- 6) Come ricomporre la funzione d'onda completa $\Psi_n(x,t)$
- 7) Come ottenere la soluzione più generale

$$\Psi(x,t) = \sum_1^{+\infty} c_n \text{sen}(k_n x) e^{-iE_n t / \hbar} \sqrt{2/L} \quad \text{con} \quad \sum_1^{+\infty} |c_n|^2 = 1$$

Esempio II: buca di potenziale finita

Determiniamo la funzione d'onda dello *stato fondamentale* per un potenziale dato da:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \quad (I) \\ -U_0 & 0 < x < L \quad (II) \\ 0 & x > L \quad (III) \end{cases}$$



Soluzione:

Il sistema sarà caratterizzato da stati liberi e da stati legati.

Gli stati liberi ($E > 0$) saranno simili ad onde piane (quando $U_0 \rightarrow 0$),

Gli stati legati ($E < 0$) saranno simili a quelli per la buca di potenziale Infinita (quando $U_0 \rightarrow -\infty$)

Limitiamoci agli stati legati: $E < 0$

Nella regione I ($x < 0$) si ha:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \rightarrow \psi(x) = Ce^{\alpha x} + \cancel{De^{-\alpha x}} \text{ con } \alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Soluzione non normalizzabile: $D=0$

Buca di potenziale finita (II)

- Ricerchiamo una soluzione nella forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{+\alpha x} & x < 0 \quad (I) \\ A \sin(kx) + B \cos(kx) & 0 < x < L \quad (II) \\ Ge^{-\alpha x} & x > L \quad (III) \end{cases} \quad \text{con} \quad \alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

$$k = \sqrt{\frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2}}$$

Imponiamo la continuità di ψ e di ψ' in 0 e in L

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \rightarrow C = B \quad \psi'_I(0) = \psi'_{II}(0) \rightarrow C\alpha = kA$$

Fisso A e B

$$\psi_{II}(L) = \psi_{III}(L) \rightarrow A \sin(kL) + B \cos(kL) = Ge^{-\alpha L}$$

Fisso G

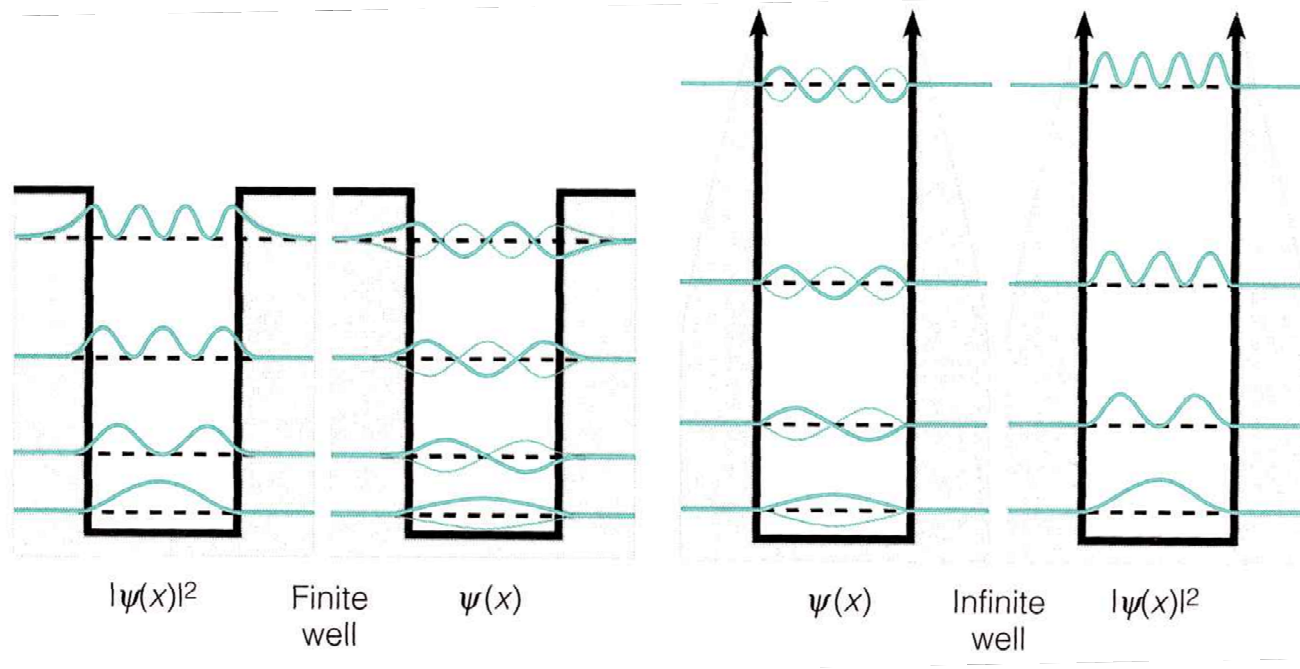
$$\psi'_{II}(L) = \psi'_{III}(L) \rightarrow Ak \cos(kL) - kB \sin(kL) = -\alpha Ge^{-\alpha L}$$

Indipendente da C

Sostituendo e riarrangiando i termini: $2 \cot(kL) = \frac{k}{\alpha} - \frac{\alpha}{k}$

E' una relazione di quantizzazione!

Buca di potenziale finita (III)



Notare le differenze tra la buca di potenziale finita (sinistra), l'analogo classico e la buca a potenziale infinito (destra).

In questo caso, la particella **NON** è confinata nella buca, ma può Essere trovata anche nelle regioni I e III, non permesse classicamente

Lunghezza di penetrazione δ : $\psi(x) = e^{-\alpha x}$

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U - E)}}$$

$$\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{-2mE}} \quad \text{per } U_{I,III} = 0 \quad 30$$

Esempio III: Forza elastica / Oscillatore armonico

Caso classico:

Legge di Hooke: $F_x = -kx$ $F_x = ma = m\ddot{x}$

Potenziale: $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$

Equazione del moto: $x(t) = A \cos(\omega t + \varphi_0)$ con $\omega = \sqrt{k/m}$

Moto oscillatorio tra $x=-A$ e $x=+A$

Caso quantistico:

Potenziale: $U(x) = \frac{1}{2}kx^2$

Eq. di Schrödinger: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x)$

Quantizzazione: esistono soluzioni solo quando

$$E = \hbar\omega_0\left(n + \frac{1}{2}\right) \quad \text{con} \quad \omega_0 = \sqrt{k/m}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

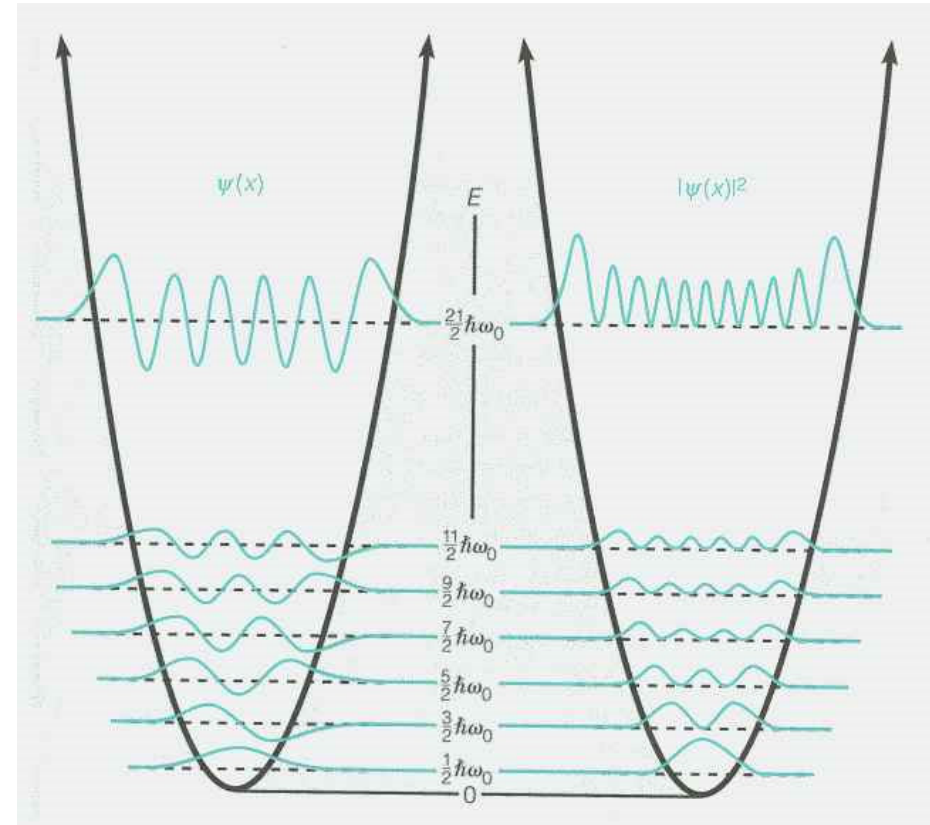
Lunghezza caratteristica: $L=1/b \rightarrow b = \left(mk / \hbar^2\right)^{1/4}$

Le soluzioni per l'oscillatore armonico

n	E	$\psi_n(x)$
0	$\frac{1}{2} \hbar \omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2}$
1	$\frac{3}{2} \hbar \omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}} (2bx) e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2}$
2	$\frac{5}{2} \hbar \omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{8\sqrt{\pi}}} (4b^2 x^2 - 2) e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2}$
3	$\frac{7}{2} \hbar \omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{48\sqrt{\pi}}} (8b^3 x^3 - 12bx) e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2}$
n	$(n + \frac{1}{2}) \hbar \omega_0$	$\sqrt{\frac{b}{2^n n! \sqrt{\pi}}} H_n(bx) e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2}$

$H_n(bx)$: polinomi di Hermite

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm} \begin{cases} 1 & \text{per } n = m \\ 0 & \text{per } n \neq m \end{cases}$$



Vale per ogni insieme di soluzioni stazionarie

Lo stato fondamentale

$$\Psi_0(x,t) = \sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}b^2x^2 - \frac{i}{2}\omega_0 t}$$

Posizione media: $\langle x \rangle = 0$

(notare: $\langle x \rangle_n = 0 \quad \forall n$)

Incertezza su x : $\Delta x = \sqrt{\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle} = \frac{1}{b\sqrt{2}}$

Impulso medio: $\langle p \rangle = 0$

(notare: $\langle p \rangle_n = 0 \quad \forall n$)

Incertezza sull'impulso: $\Delta p = \sqrt{\langle (p - \langle p \rangle)^2 \rangle} = \frac{\hbar b}{\sqrt{2}}$

Relazione di indeterminazione di Heisenberg: $\Delta x \Delta p = \hbar / 2$

Energia: $E = \frac{1}{2} \hbar \omega_0$ con $\omega_0 = \sqrt{k/m}$

Regola generale (su tutti gli stati QM): l'energia minima NON è mai 0: il corpo appare sempre in moto ($\Delta p \neq 0$), anche se non si sposta ($\langle p \rangle = 0$)!
Per questo comportamento non esiste un analogo classico.

Sovrapposizione di stati

Supponiamo di avere un oscillatore armonico in una sovrapposizione di stati stazionari ($n=0, n=1$):

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_0(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2}b^2x^2 - \frac{1}{2}i\omega_0t} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}} (2bx) e^{-\frac{1}{2}b^2x^2 - \frac{3}{2}i\omega_0t}$$

Determiniamo l'osservabile posizione:

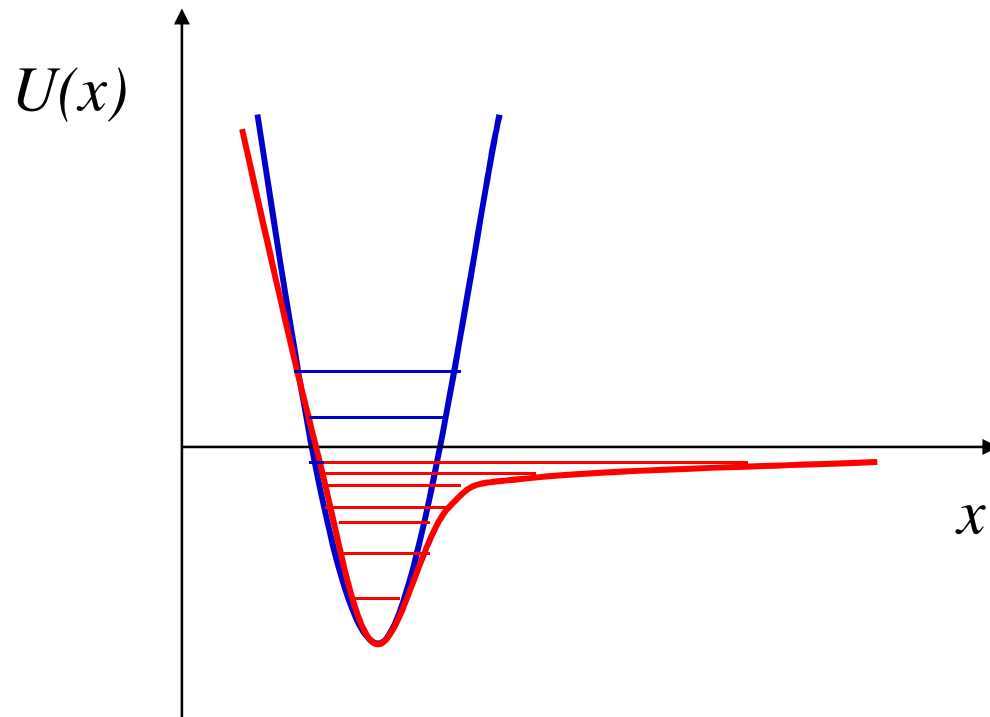
$$\begin{aligned} \langle x \rangle(t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) dx = \int \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_0^*(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1^*(x, t) \right) x \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_0(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1(x, t) \right) dx \\ &= \frac{1}{2} \int \Psi_0^*(x, t) x \Psi_0(x, t) dx + \frac{1}{2} \int \Psi_1^*(x, t) x \Psi_1(x, t) dx + \frac{1}{2} \int \Psi_0^*(x, t) x \Psi_1(x, t) dx + \\ &+ \frac{1}{2} \int \Psi_1^*(x, t) x \Psi_0(x, t) dx = 0 + 0 + \text{Re} \left[\int \Psi_0^*(x, t) x \Psi_1(x, t) dx \right] = \\ &= \text{Re} \left[\sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}} \sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}} e^{+\frac{1}{2}i\omega_0t - \frac{3}{2}i\omega_0t} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}b^2x^2} x (2bx) e^{-\frac{1}{2}b^2x^2} dx \right] = \frac{1}{\pi b} \cos(\omega_0 t) \end{aligned}$$

La sovrapposizione degli stati produce il moto nel sistema! Applet →

Esempi di oscillatori armonici: molecole, nuclei

MC: dato un potenziale arbitrario $U(x)$ con un minimo, in prossimità del minimo il sistema ha delle oscillazioni (piccole oscillazioni)

MQ: per minimi sufficientemente profondi, il sistema si comporta come un oscillatore armonico: livelli energetici equispaziati



Esempi:
molecole biatomiche,
nuclei



Principio di Corrispondenza MQ \leftrightarrow MC

Meccanica Classica: $\vec{F} = m\vec{a}$, $F_x = m\ddot{x} \rightarrow x(t)$

Meccanica Quantistica: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x,t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} \rightarrow \Psi(x,t)$

La $\Psi(x,t)$ descrive *completamente* lo stato QM ma non è misurabile

Osservabile fisica: $\langle O \rangle(t) = \int \Psi^*(x,t) \bar{O} \Psi(x,t) dx$

Esempio: osservabile posizione $\langle x \rangle(t) = \int \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx$

Usando l'eq di Schrödinger si può verificare che:

$$m \frac{d^2 \langle x \rangle(t)}{dt^2} = m \frac{d^2}{dt^2} \left(\int \Psi^*(x,t) x \Psi(x,t) dx \right) = \int \Psi^*(x,t) \left(-\frac{dU}{dx} \right) \Psi(x,t) dx = \left\langle -\frac{dU}{dx} \right\rangle = \langle F_x \rangle$$

Gli osservabili *accelerazione* e *forza* verificano: $\left\langle -\frac{dU}{dx} \right\rangle = \langle F_x \rangle = m \langle \ddot{x} \rangle$

La base della MC è una relazione tra *valori medi* sugli *stati quantistici*

Riassumendo

Esercizio I: condizione di normalizzazione

- Un sistema quantistico è soggetto ad un potenziale $U(x)$ che produce solo stati legati. Siano $\Psi_n(x, t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ con $n=0, 1, 2, \dots$ le soluzioni normalizzate degli stati stazionari.

$$\int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \delta_{nm} \begin{cases} 1 & \text{per } n = m \\ 0 & \text{per } n \neq m \end{cases}$$

Verificare che per uno stato arbitrario normalizzato

$$\Psi(x, t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x, t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Vale la condizione di normalizzazione $\sum_0^{+\infty} |c_n|^2 = 1$

Esercizio 2: Energia di un sistema

- Un sistema quantistico è soggetto ad un potenziale $U(x)$ che produce solo stati legati. Siano $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ con $n=0,1,2,\dots$ le soluzioni normalizzate degli stati stazionari. Verificare che per uno stato arbitrario

$$\Psi(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

l'energia media vale:

$$\langle E \rangle = \int \Psi^*(x,t) i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} dx = \sum |c_n|^2 E_n$$

Esercizio 3: Evoluzione di un sistema

- Al tempo $t=0$, un sistema quantistico è descritto da una funzione d'onda data $\varphi(x)$. Sapendo che $\Psi_n(x,t) = \psi_n(x)e^{-iE_n t/\hbar}$ con $n=0,1,2,\dots$ sono le soluzioni normalizzate degli stati stazionari, determinare l'evoluzione futura ($t>0$) della funzione d'onda.

Soluzione: devo trovare i c_n per cui

$$\Psi(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x,t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

Sapendo che: $\Psi(x,t=0) = \varphi(x)$

$$\begin{aligned} \int \Psi_n^*(x,t) \Psi(x,t) dx &= \int \psi_n^*(x) e^{+iE_n t/\hbar} \left(\sum_0^{+\infty} c_m \psi_m(x) e^{-iE_m t/\hbar} \right) dx = \\ &= \sum_0^{+\infty} c_m e^{+iE_n t/\hbar} e^{-iE_m t/\hbar} \int \psi_n^*(x) \psi_m(x) dx = \sum_0^{+\infty} c_m e^{+iE_n t/\hbar} e^{-iE_m t/\hbar} \delta_{nm} = c_n \end{aligned}$$

Esercizio 3: Evoluzione di un sistema II

- Soluzione:

$$\int \Psi_n^*(x, 0) \varphi(x) dx = \int \psi_n^*(x) \varphi(x) dx = c_n$$

$$\Psi(x, t) = \sum_0^{+\infty} c_n \Psi_n(x, t) = \sum_0^{+\infty} c_n \psi_n(x) e^{-iE_n t / \hbar}$$

In questo modo sono sicuro che:

$$\Psi(x, t = 0) = \varphi(x)$$

Seconda parte: stati liberi

- Stati liberi e stati legati
- Prototipo di stato libero
- Salti di potenziale
- Stati liberi per la buca di potenziale finita
- Barriera finita di potenziale
- Effetto tunnel: riflessione e trasmissione
- Effetto tunnel: microscopia ad effetto tunnel
- Effetto tunnel: altri esempi
- Livelli energetici nei conduttori

Stati liberi

Stati legati: la particella è confinata in una zona finita di spazio.

(cum grano salis)

Stati liberi: la particella può essere ovunque nello spazio.

Caratteristiche generali in MQ:

- Assenza di onde stazionarie
- Assenza di quantizzazione

Prototipo di stato libero

- Richiami di onde piane:

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

Se $U(x)=0$ allora:

$\Psi(x,t) = e^{i(kx-\omega t)}$ è un'onda piana progressiva ($\langle p \rangle = +\hbar k$)

$\Psi(x,t) = e^{i(-kx-\omega t)}$ è un'onda piana regressiva ($\langle p \rangle = -\hbar k$)

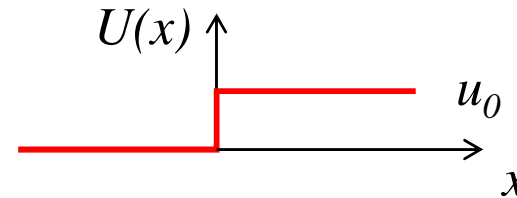
Entrambe di energia $E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Se $U(x) \neq 0$ allora avrò soluzioni diverse, ma vicine a queste, o combinazioni di queste....

Stato libero: $U(\pm\infty) = \text{costante}$

Salto di potenziale

- Iniziamo con il caso più semplice:



Supponiamo di sapere che vi è una sorgente di particelle (elettroni) che provengono da sinistra con $E > u_0$ e che nel loro percorso incontrano il salto di potenziale.

$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ è l'onda iniziale ($x < 0$), con $E = \hbar\omega$, $k = \sqrt{2mE} / \hbar$

In generale per $x < 0$: $\Psi_I(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{i(-kx - \omega t)}$

Per $x > 0$, $\Psi_{II}(x, t) = Ce^{i(k'x - \omega't)}$ con $\omega' = E / \hbar = \omega$, $k' = \sqrt{2m(E - u_0)} / \hbar$

Oss: per $x > 0$ manca l'onda regressiva per le nostre condizioni iniziali!

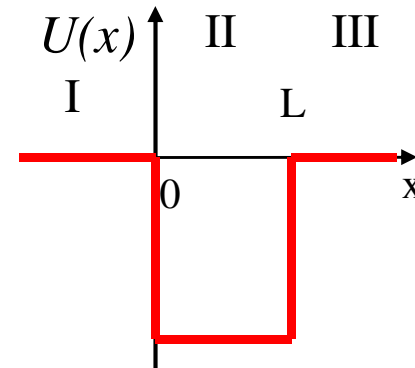
Se richiedo la continuità a $x=0$, ogni t , trovo: $A+B=C$, $k(A-B)=k'C$

In generale: $B \neq 0 \rightarrow$ ho SEMPRE un'onda riflessa dal salto di potenziale
 $C \neq 0 \rightarrow$ ho un'onda trasmessa dopo il salto di potenziale ($E > u_0$)

Stati liberi per la buca di potenziale

Consideriamo ora quanto avviene nel caso precedente (sorgente di Elettroni a sinistra) nel caso della buca di potenziale:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 & (I) \\ -U_0 & 0 < x < L & (II) \\ 0 & x > L & (III) \end{cases}$$



Le soluzioni ad E fissata sono:

$$\Psi(x,t) = \begin{cases} Ae^{+i(kx-\omega t)} + Be^{+i(-kx-\omega t)} & x < 0 & (I) \\ Ce^{+i(k'x-\omega t)} + De^{+i(-k'x-\omega t)} & 0 < x < L & (II) \\ Fe^{+i(kx-\omega t)} & x > L & (III) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE} / \hbar \\ k' &= \sqrt{2m(E + U_0)} / \hbar \end{aligned}$$

Condizioni di continuità in $x=0$ e $x=L \rightarrow 4$ relazioni: fisso B,C,D,F

Non ho alcuna relazione di quantizzazione!

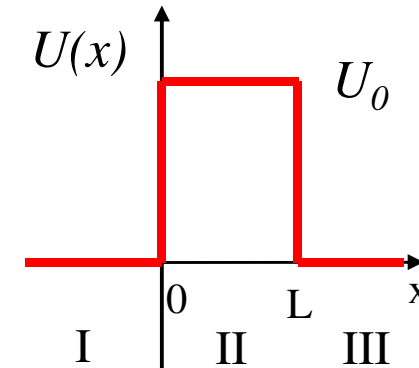
Definisco: probabilità di **riflessione** $R = |B|^2 / |A|^2 = f_1(k, L, U_0) \quad (R \geq 0)$

Probabilità di **trasmissione** $T = |F|^2 / |A|^2 = f_2(k, L, U_0) \quad (T \leq 1)$

Barriera finita di potenziale

Caso analogo (uguale!!) al precedente ma diverso dal caso classico:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 & (I) \\ +U_0 & 0 < x < L & (II) \\ 0 & x > L & (III) \end{cases}$$



Supponiamo di avere a sinistra una sorgente di elettroni con $E < U_0$:

$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$ è l'onda iniziale ($x < 0$), con $E = \hbar\omega$, $k = \sqrt{2mE} / \hbar$

Classicamente la particella rimarrebbe nella zona I (rimbalza in $x=0$)

Quantisticamente il sistema è descritto dalle stesse equazioni di prima:

Unica differenza: $-U_0 \rightarrow +U_0$

$$\psi_{II}(x) = Ce^{+ik'x} + De^{-ik'x} \quad \text{con} \quad k' = \sqrt{2m(E - U_0)} / \hbar \quad (\in \mathbb{C} \text{ se } E < U_0, k' = \pm i\alpha)$$

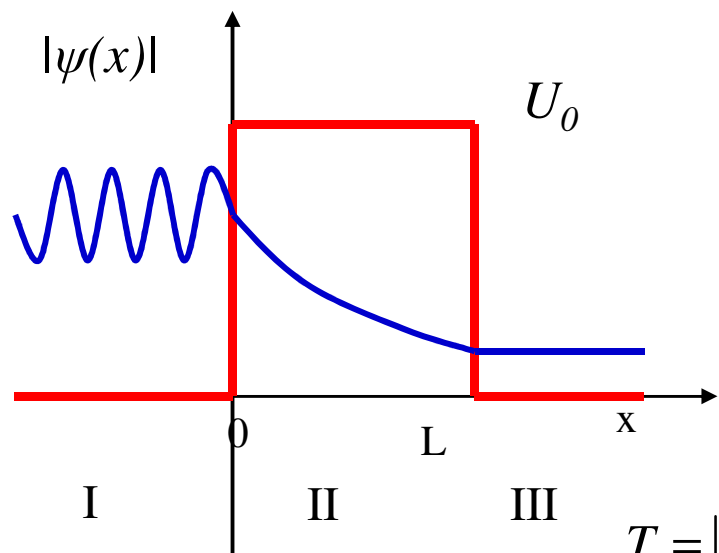
Effetto tunnel: riflessione e trasmissione

Soluzione generale per $E < U_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{+ikx} + Be^{-ikx} & x < 0 \quad (I) \\ Ce^{+\alpha x} + De^{-\alpha x} & 0 < x < L \quad (II) \\ Fe^{+ikx} & x > L \quad (III) \end{cases} \quad \text{con} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE} / \hbar \\ \alpha &= \sqrt{2m(U_0 - E)} / \hbar \quad (\in \mathbb{R}) \end{aligned}$$

Condizioni di continuità in 0 e in L \rightarrow 4 relazioni: fisso B,C,D,F

Non ho alcuna relazione di quantizzazione!



La particella può penetrare dentro la barriera di potenziale, ed uscirne a $x > L$

Probabilità di **trasmissione** dell'onda

$$T = |F|^2 / |A|^2 = f_2(E, L, U_0) \approx \exp\left(-2L \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}\right)$$

Trasmissione risonante

Caso analogo per $E > U_0$. Stesso formalismo, stessi risultati.

Definisco: probabilità di **riflessione** dell'onda $R = |B|^2 / |A|^2 = f_1(E, L, U_0)$

Probabilità di **trasmissione** dell'onda $T = |F|^2 / |A|^2 = f_2(E, L, U_0)$

Svolgendo i conti:

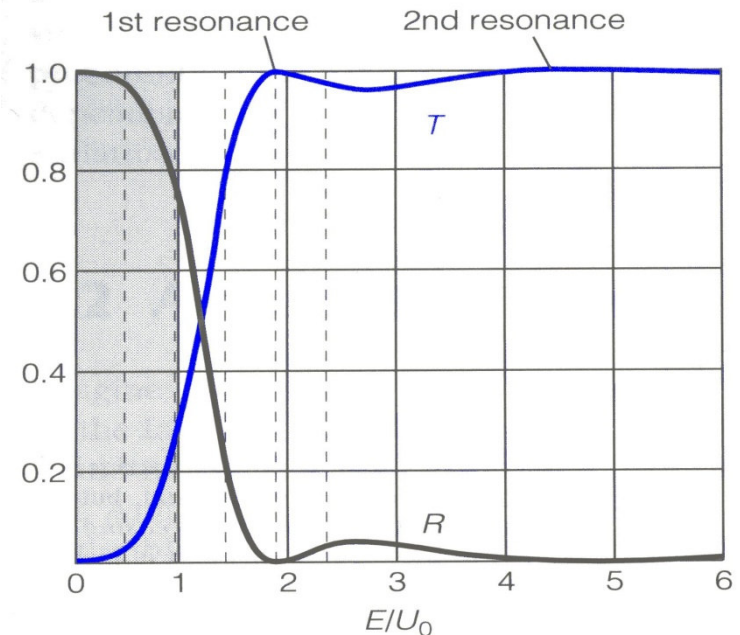
posto $\beta = \sin^2 \left[\frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} L \right]$ e $\gamma = 4 \frac{E}{U_0} \left(\frac{E}{U_0} - 1 \right)$

Si ottiene: $R = \frac{\beta}{\beta + \gamma}$ e $T = \frac{\gamma}{\beta + \gamma}$ ($T + R = 1$)

Nota bene: quando

$$\beta = \sin^2 \left[\frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar} L \right] = 0 \quad R = 0, T = 1$$

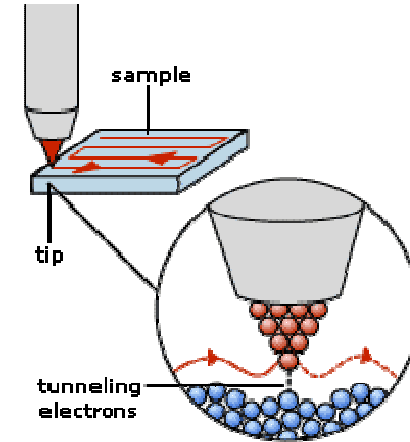
Trasmissione risonante



Effetto tunnel: microscopia ad effetto tunnel

L'effetto tunnel (T) dipende dalla distanza tra la punta e il campione, e dall'ampiezza della zona di tunneling. Questa sensibilità è sfruttata nell'effetto tunnel.

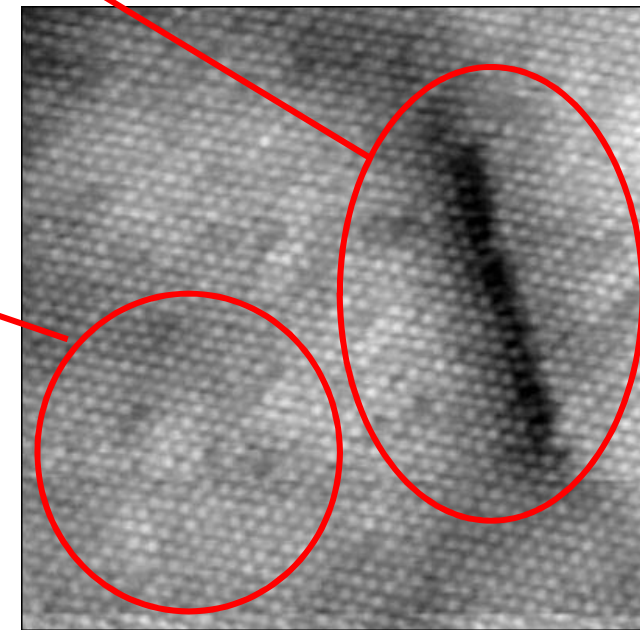
Difetto nel reticolo



Caratterizzata da una punta con un reticolo atomico regolare. Gli elettroni tunnelano dalla punta al campione per effetto tunnel.

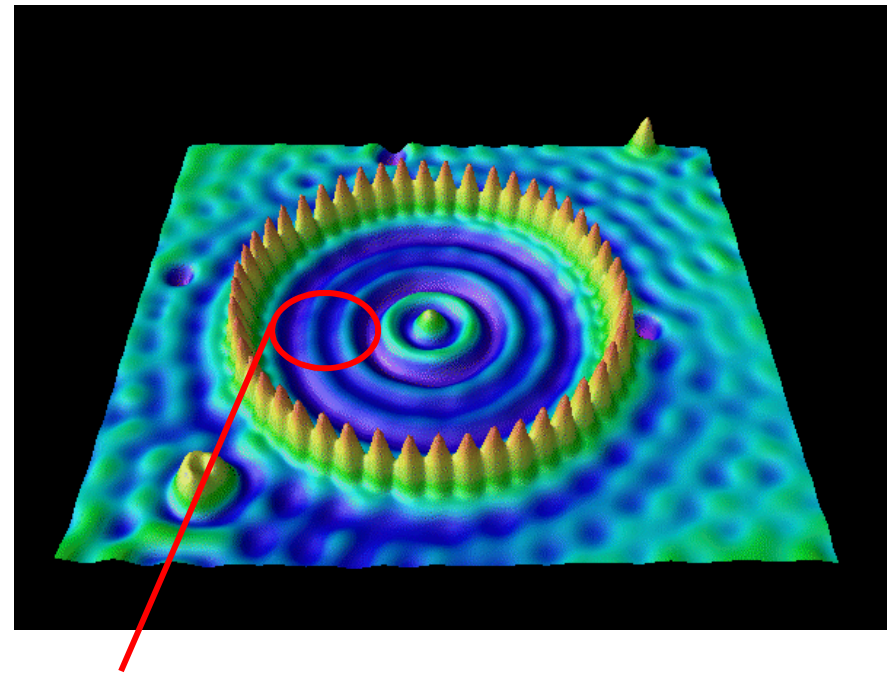
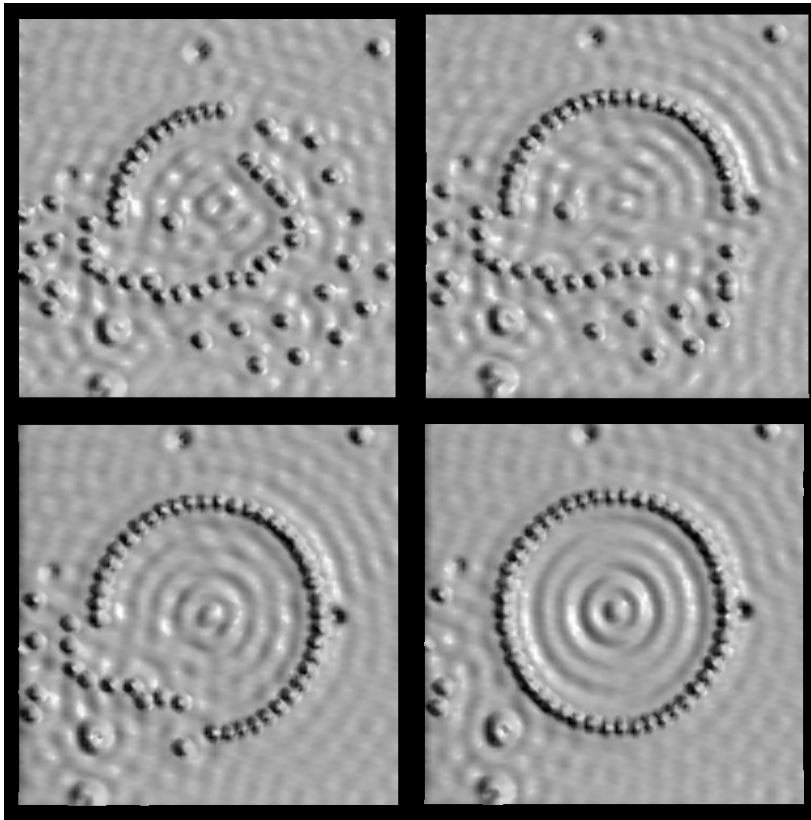
Reticolo atomico regolare

L'intensità della corrente dipende dalla distanza atomo della punta-atomo del campione! Il moto della punta sulla faccia del campione permette la ricostruzione bidimensionale delle posizioni degli atomi.



Microscopia ad effetto tunnel

Costruzione di immagini con singoli atomi (IBM Labs)!



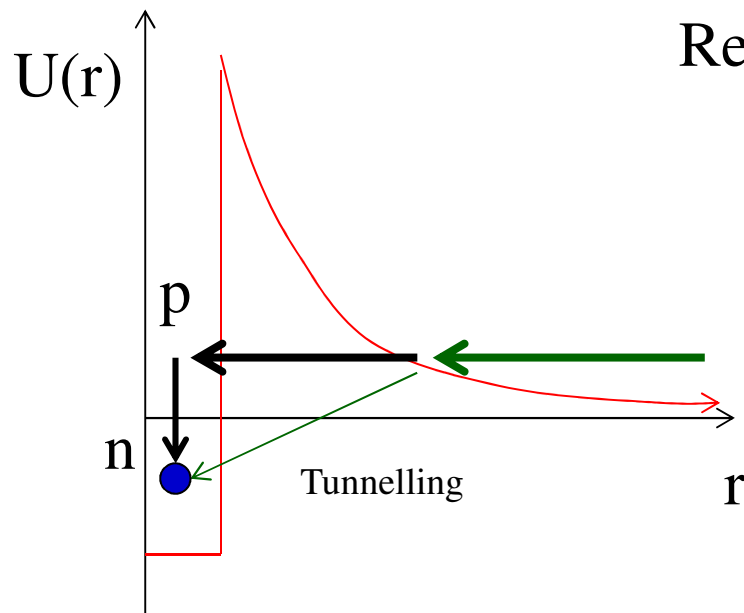
Onde stazionarie di probabilità

Posizionamento di 48 atomi di Fe su un substrato di Cu a 4K

Esempi di effetto tunnel

L'effetto tunnel ha un ruolo in un numero notevole di situazioni tra cui:

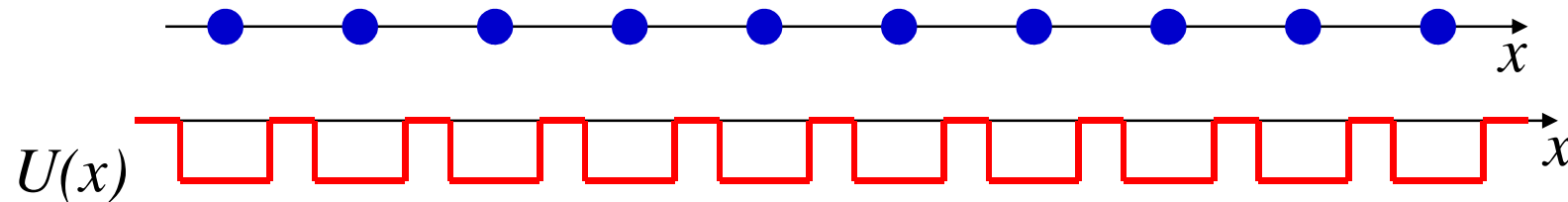
- Decadimenti radiattivi dei nuclei
- Fusione nucleare
- Semiconduttori



Reazione nel Sole: $p+p \rightarrow d+\text{energia}$

Livelli energetici nei conduttori

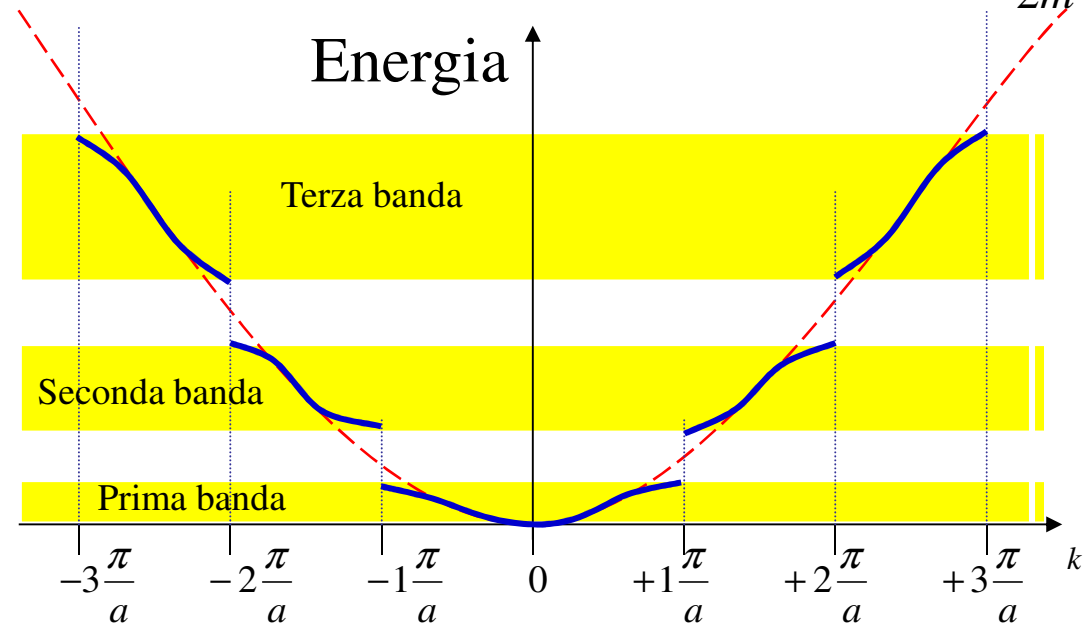
Modellino di una fila di atomi di materiale conduttore:



$U(x)$ è un potenziale periodico $U(x+a)=U(x)$ sentito dagli *elettroni*.

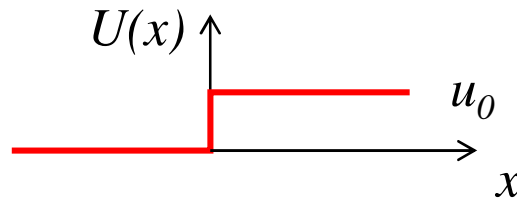
Le $\psi(x)$ avranno la stessa periodicità: $\psi(x+a) = e^{i\theta}\psi(x) \approx e^{ikx}$ $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

Gli stati degli elettroni saranno caratterizzati dalla comparsa di bande energetiche permesse e bande proibite (i dettagli dipendono dalla forma di $U(x)$)



Esercizio sul salto di potenziale

- Sia dato il potenziale a gradino:



- Verificare che un'onda piana progressiva con $E < u_0$ viene completamente riflessa dal potenziale ($R=1$, $T=0$).
- Calcolare il coefficiente di riflessione R per un'onda piana progressiva con $E > u_0$.
- Calcolare il coefficiente di trasmissione $T=1-R$ per un'onda piana progressiva con $E > u_0$ e verificare che dipende (anche) dalle velocità della particella nelle due zone.

Terza parte: problemi tridimensionali

- L'equazione di Schrödinger in tre dimensioni
- Buca di potenziale infinita in 3D
- Forze (e potenziali) centrali
- Momenti angolari
- Atomo di idrogeno
- Livelli energetici
- Transizioni tra livelli
- Spettri atomici

L'equazione di Schrödinger in tre dimensioni

- Equazione di Schrödinger in una dimensione:

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

Dove, sapendo che $p_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ $\rightarrow \left(\frac{p_x^2}{2m} + U(x) \right) \Psi(x,t) = \hat{E} \Psi(x,t)$

- La naturale estensione dell'equazione di Schrödinger in tre dimensioni è quindi:

$$\left(\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + U(x,y,z) \right) \Psi(x,y,z,t) = \hat{E} \Psi(x,y,z,t)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Psi(x,y,z,t) + U(x,y,z)\Psi(x,y,z,t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x,y,z,t)$$

In forma compatta:

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

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Estensioni alle tre dimensioni

L'eq. di Schrödinger è lineare anche in 3D →

$$\psi_1; \psi_2 \text{ soluzioni} \Rightarrow \psi = a\psi_1 + b\psi_2 \text{ soluzione}$$

E' ancora possibile ricercare le soluzioni con la tecnica della separazione delle variabili: $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\varphi(t)$

Troverò in questo modo le soluzioni stazionarie ad energia definita:

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + U(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r})$$

eq. di Schrödinger in 3d indipendente dal tempo

Normalizzazione:
$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \Psi^*(\vec{r}, t)\Psi(\vec{r}, t) dx dy dz = \int_V \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) d^3 r = 1$$

Proprietà di continuità analoghe al caso 1D

Buca di potenziale infinita in 3D

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0 & 0 < x < L_x, 0 < y < L_y, 0 < z < L_z \\ +\infty & \text{altrimenti} \end{cases} \quad \rightarrow \psi(x, y, z) = 0$$

Tentiamo una soluzione nella forma: $\psi(x, y, z) = F(x)G(y)H(z)$

L'eq di Schrödinger diventa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{F(x)} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} \right) + \left(\frac{1}{G(y)} \frac{d^2 G(y)}{dy^2} \right) + \left(\frac{1}{H(z)} \frac{d^2 H(z)}{dz^2} \right) \right] + U(x, y, z) = E$$

$$\frac{1}{F(x)} \frac{d^2 F(x)}{dx^2} = C_x \dots \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} (C_x + C_y + C_z) = E$$

$$\text{Soluzione: } F_{n_x}(x) = \text{sen}(k_{n_x} x) \sqrt{2/L_x} \quad k_{n_x} = \frac{n_x \pi}{L_x} \rightarrow C_n = -\frac{\pi^2}{L_x^2} n_x^2 \quad n \text{ intero}$$

La richiesta di continuità in 0 e in L_x porta alla quantizzazione in x .

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \text{sen}(k_{n_x} x) \text{sen}(k_{n_y} y) \text{sen}(k_{n_z} z) \sqrt{2^3 / (L_x L_y L_z)}$$

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right)$$

Forze (e potenziali) centrali

MC: Forze centrali: $\vec{\mathbf{F}} = f(r)\hat{\mathbf{u}}_r$ $r = |\vec{\mathbf{r}}|$

Sono conservative: $\exists U(r): \vec{\mathbf{F}} = -\vec{\nabla}U(r)$

Nel moto si conserva il momento angolare $\vec{\mathbf{L}} = \vec{\mathbf{r}} \wedge \vec{\mathbf{p}}: \quad \frac{d\vec{\mathbf{L}}}{dt} = \vec{\mathbf{0}}$

MQ: proprietà analoghe per i potenziali centrali $U(r)$:

Si avranno soluzioni $\Psi(\vec{\mathbf{r}}, t)$ con momento angolare definito.

Numeri quantici associati al momento angolare: **due e solo due!**

l : numero quantico associato al modulo $\langle |\vec{\mathbf{L}}|^2 \rangle = l(l+1)\hbar^2$

m : numero quantico associato ad una componente $\langle L_z \rangle = m\hbar$

numero quantico **magnetico**: $-l \leq m \leq l$

Indeterminazione di Heisenberg: non si hanno stati a definito L_x, L_y, L_z

Eq di Schrödinger in coordinate polari

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r})+U(\vec{r})\psi(\vec{r})=E\psi(\vec{r}) \quad \rightarrow \quad -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(r,\theta,\varphi)+U(r)\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)$$

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad \rightarrow$$

$$\rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Le variabili angolari compaiono solo in un termine....

Ricerco le soluzioni nella forma: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$

$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y(\theta, \varphi) = C Y(\theta, \varphi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d^2(r^2 R(r))}{dr^2} + \frac{C}{r^2} R(r) \right) + U(r)R(r) = ER(r)$$

Armoniche sferiche e Momenti angolari

Armoniche sferiche:
$$\left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) Y_l^m(\theta, \varphi) = -l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$$

$$C = -l(l+1) \quad l \text{ intero}$$

$$-l \leq m \leq l, \quad m \text{ intero}$$

$$P_{0,0}(\theta) = 1, \quad P_{1,0}(\theta) = \cos \theta, \quad P_{1,1}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta,$$

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}} P_{l,m}(\theta) e^{im\varphi}$$

$$P_{2,0}(\theta) = \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}, \quad P_{2,1}(\theta) = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta,$$

$$Y_l^{-m}(\theta, \varphi) = (-1)^m (Y_l^m(\theta, \varphi))^*$$

$$P_{2,2}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{8}} \sin^2 \theta,$$

Operatore L_z :
$$L_z = (\vec{r} \wedge \vec{p})_z = xp_y - yp_x = x \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right) - y \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

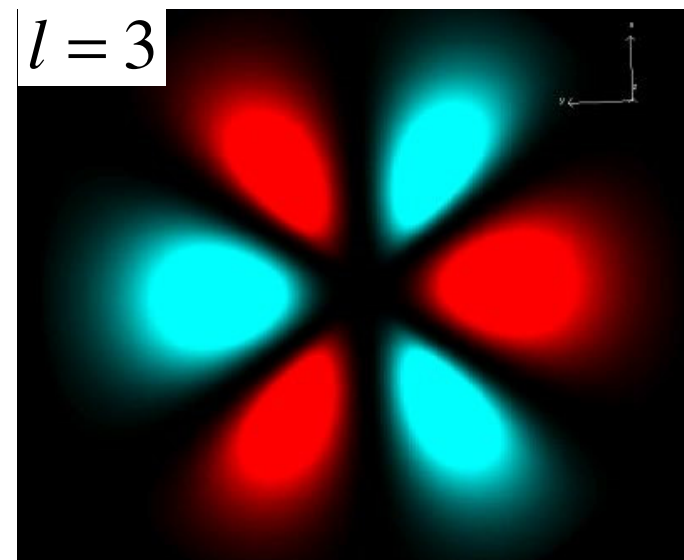
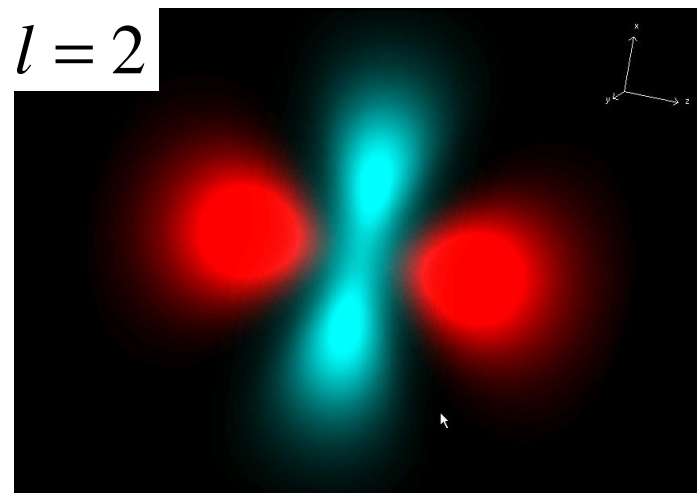
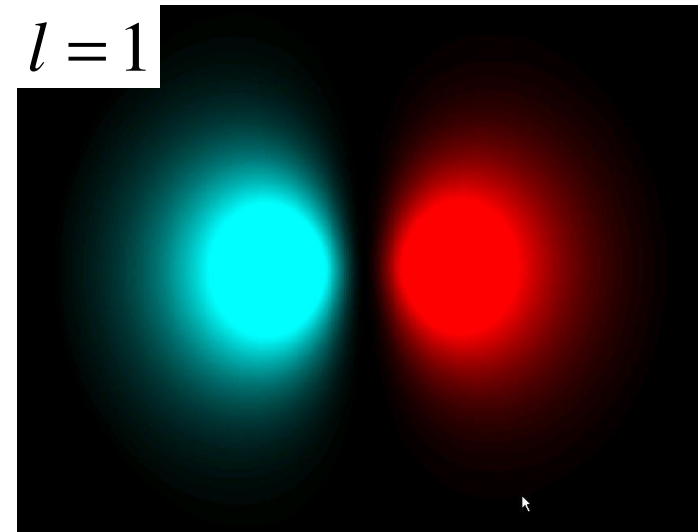
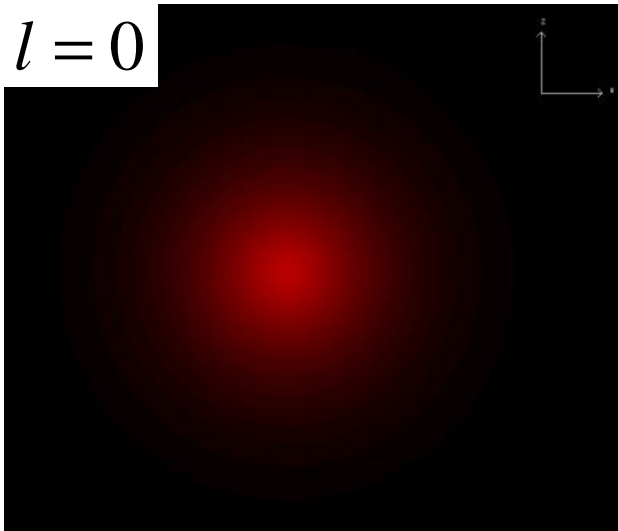
$$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi)$$

Operatore L^2 :
$$L^2 = |\vec{r} \wedge \vec{p}|^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

$$L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = [l(l+1)\hbar^2] Y_l^m(\theta, \varphi)$$

I numeri quantici **m** ed **l** servono per classificare gli stati stazionari 3D;
Definiscono completamente la parte angolare della funzione d'onda

Alcune armoniche sferiche semplici



Funzione spaziale

Soluzioni nella forma: $\psi(r, \theta, \varphi) = R(r)Y(\theta, \varphi)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 dR(r)/dr)}{dr} + \frac{-l(l+1)}{r^2} R(r) \right) + U(r)R(r) = ER(r)$$

dipende da **l**
ma non da **m**

Una eq differenziale in una funzione: per stati legati si avrà una relazione di quantizzazione ed un nuovo numero quantico che è detto **numero quantico principale (n)**

Gli stati stazionari saranno quindi identificati da terne di numeri:

$$n, l, m \rightarrow \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = R_{n,l}(r)Y_l^m(\theta, \varphi) \quad E = E_{n,l} = f(n, l)$$

Una generica soluzione di stato legato sarà:

Degenerare per m

$$\Psi(r, \theta, \varphi, t) = \sum_n \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{n,l,m} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) e^{-iE_{n,l}t/\hbar} = \sum_n \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{n,l,m} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) e^{-iE_{n,l}t/\hbar} = \sum_n \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} c_{n,l,m} R_{n,l}(r) Y_l^m(\theta, \varphi) e^{-iE_{n,l}t/\hbar}$$

Le condizioni iniziali/al contorno definiscono i $c_{n,l,m}$

Atomo di idrogeno

Sistema protone-elettrone tenuto insieme dalla forza elettromagnetica

$$U(\vec{r}) = U(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r}$$

$$\text{Massa ridotta: } m = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \approx m_e$$

E' un potenziale centrale: conosciamo già le soluzioni angolari
- armoniche sferiche -

$$\text{Parte radiale: } -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 dR(r)/dr)}{dr} + \frac{-l(l+1)}{r^2} R(r) \right) + U(r)R(r) = ER(r)$$

$$\text{Stati legati } \rightarrow E \text{ quantizzata: } E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad E_1 = -13.6 \text{ eV}$$
$$E_1 = -R_\infty$$

Occorrono 13.6 eV per ionizzare un
atomo di idrogeno
(liberare l'elettrone dal legame atomico)

Energia di Rydberg

Soluzioni radiali per lo stato legato

Le soluzioni (autofunzioni) all'equazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r^2} \frac{d(r^2 dR(r)/dr)}{dr} + \frac{-l(l+1)}{r^2} R(r) \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} R(r) = ER(r)$$

Sono dette funzioni di Laguerre:

$$n = 1, 2, 3, \dots, +\infty \quad l = 0, 1, \dots, n-1$$

Raggio di Bohr: $a_0 = \frac{(4\pi\epsilon_0)\hbar^2}{me^2} = 0,0529 \text{ nm}$

n, l	$R_{n,l}(r)$
1,0	$2e^{-r/a_0} / a_0^{3/2}$
2,0	$2(1 - \frac{r}{2a_0})e^{-r/(2a_0)} / (2a_0)^{3/2}$
2,1	$2 \frac{r}{\sqrt{3}a_0} e^{-r/(2a_0)} / (2a_0)^{3/2}$
3,0	$(2 - \frac{4r}{3a_0} + \frac{4r^2}{27a_0^2})e^{-r/(3a_0)} / (3a_0)^{3/2}$
n, l	$p_{n-l-1}(r/a_0)e^{-r/(na_0)} / (na_0)^{3/2}$

Distanza media elettrone-protone:

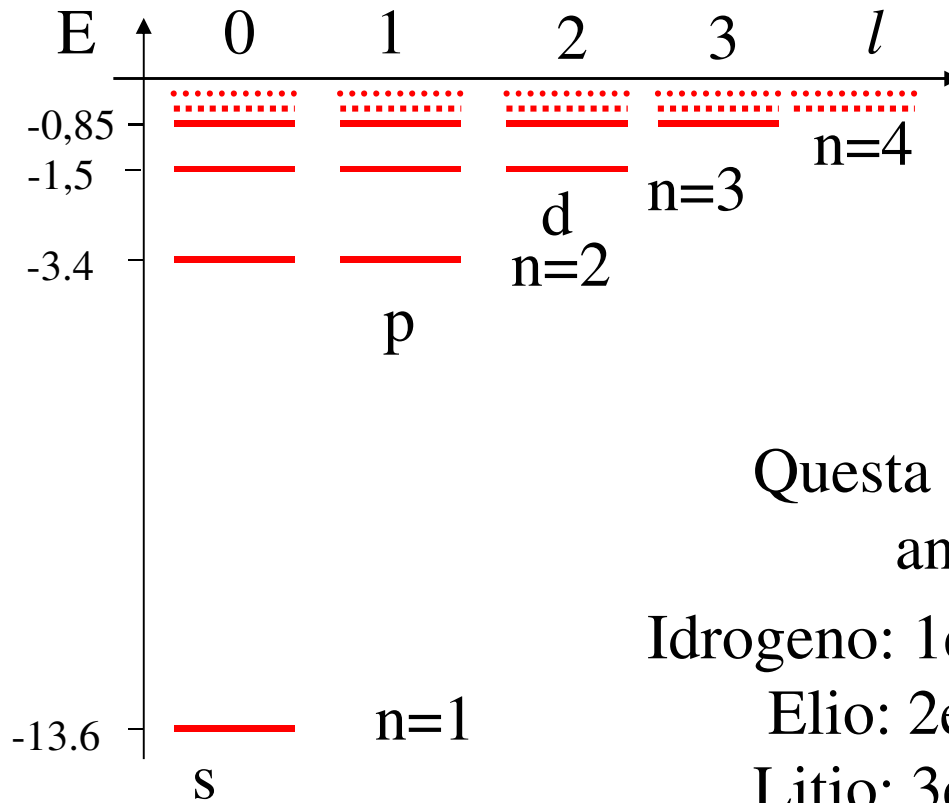
$$r_{medio} = a_0 n^2 \quad \left(\langle r^2 \rangle = \langle x^2 + y^2 + z^2 \rangle = a_0^2 n^4 \right)$$

Stato fondamentale: $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \psi_{1,0,0}(r, \vartheta, \varphi) = R_1(r)Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$

Livelli energetici

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad E_1 = -13.6 \text{ eV}$$

$$l = 0, \dots, n-1$$

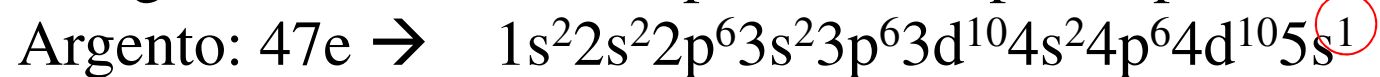
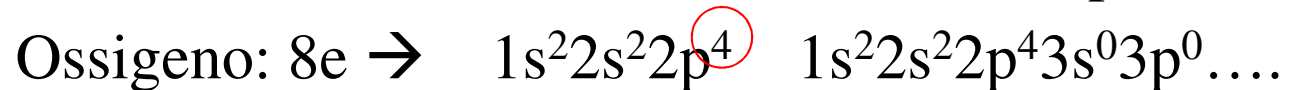
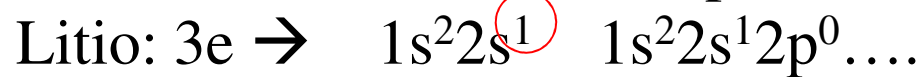
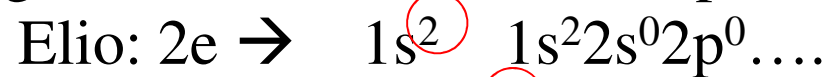
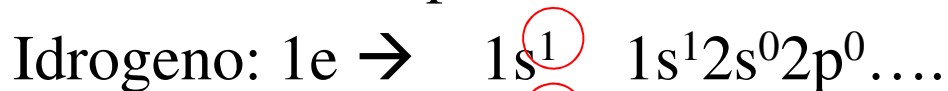


Notazione spettroscopica

$l =$	0	1	2	3	4	5
Lettera:	s	p	d	f	g	h
capienza e ⁻ :	2	6	10	14	18	22

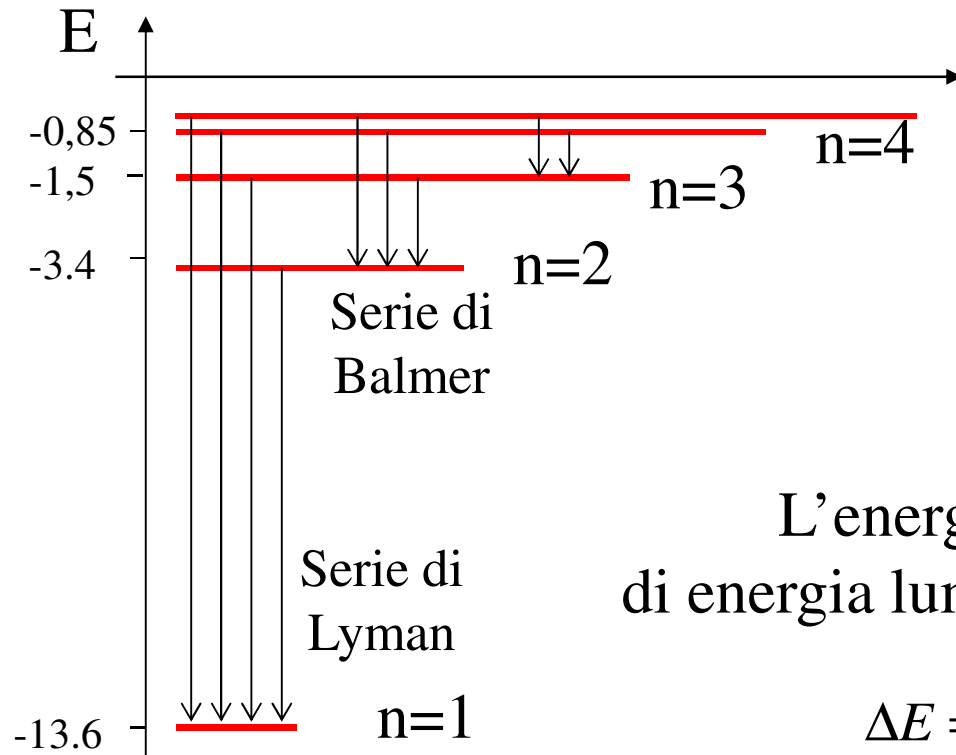
Questa struttura di base rimane anche per altri atomi

$$U = -k \frac{Ze^2}{r}$$



Le proprietà chimiche dipendono solo dall'ultimo livello occupato

Transizioni tra livelli



Perdita di energia
per passaggio tra due stati
(transizione)

$$\Delta E = E_i - E_f = R_\infty \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

L'energia è emessa sotto forma
di energia luminosa: 1 fotone di energia ΔE

$$\Delta E = \hbar \omega = \frac{hc}{\lambda}$$

La serie di Balmer dà luce visibile

Le transizioni tra livelli possono comportare emissione o assorbimento di fotoni

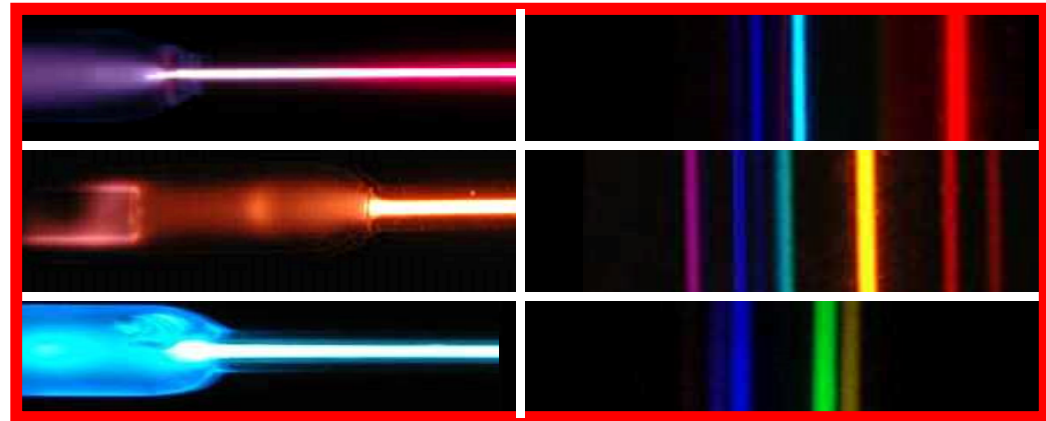
Spettri di elementi

Spettri di emissione

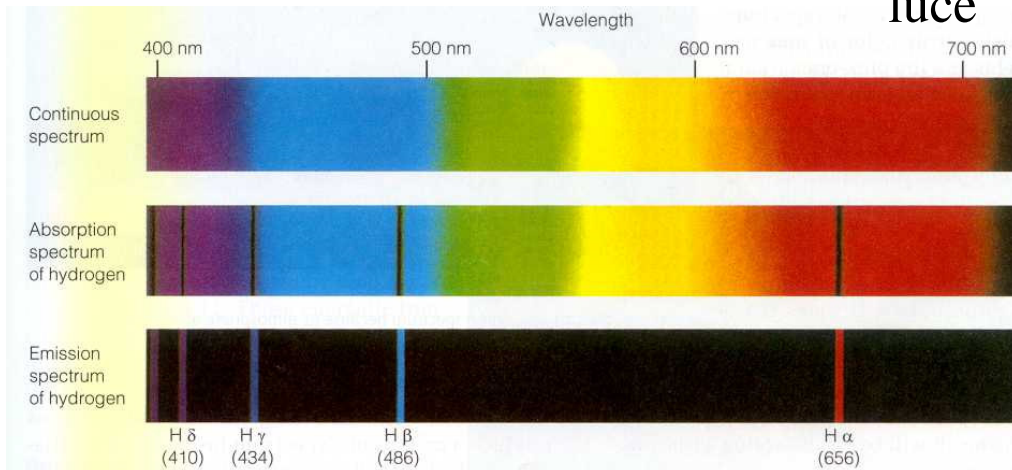
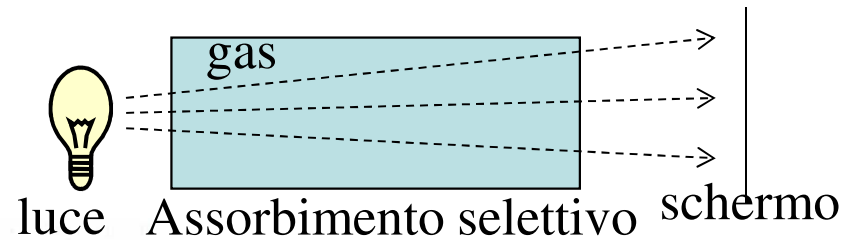
Idrogeno (1e):

Elio (2e):

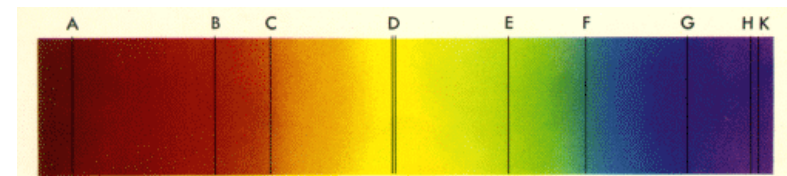
Mercurio (80e):



Spettri di assorbimento



Spettro del Sole



Lo spettro solare è di assorbimento!

Emissione spontanea e stimolata di fotoni

- Le transizioni tra stati possono essere dovute a: urti atomici/molecolari, modifica di legami chimici; spontanee e stimulate da radiazioni elettromagnetica.

La probabilità di emissione di un fotone di energia $E = \hbar\omega$ con impulso $\vec{p} = \hbar\vec{k}$ vale:

$$P_{emissione}(1 \text{ fotone}, E = \hbar\omega, \vec{k}) = P_0(1 + n_{\omega, \vec{k}})$$

Emissione spontanea

Emissione stimolata

Probabilità di assorbimento:

$$P_{assorbimento}(1 \text{ fotone}, E = \hbar\omega, \vec{k}) = n_{\omega, \vec{k}} P_0$$

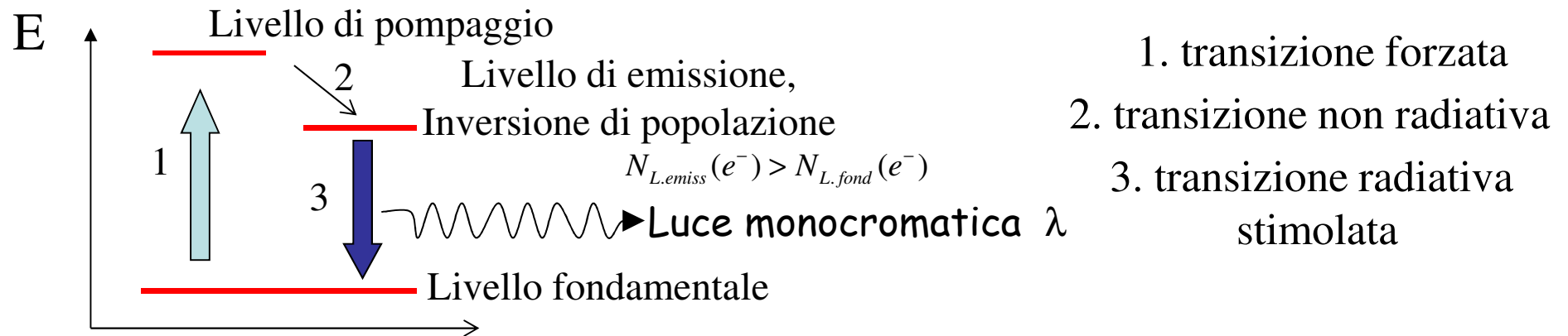
Assorbimento stimolato

$n_{\omega, \vec{k}}$ è il numero di fotoni che hanno pulsazione pari a ω e impulso pari a $\vec{p} = \hbar\vec{k}$

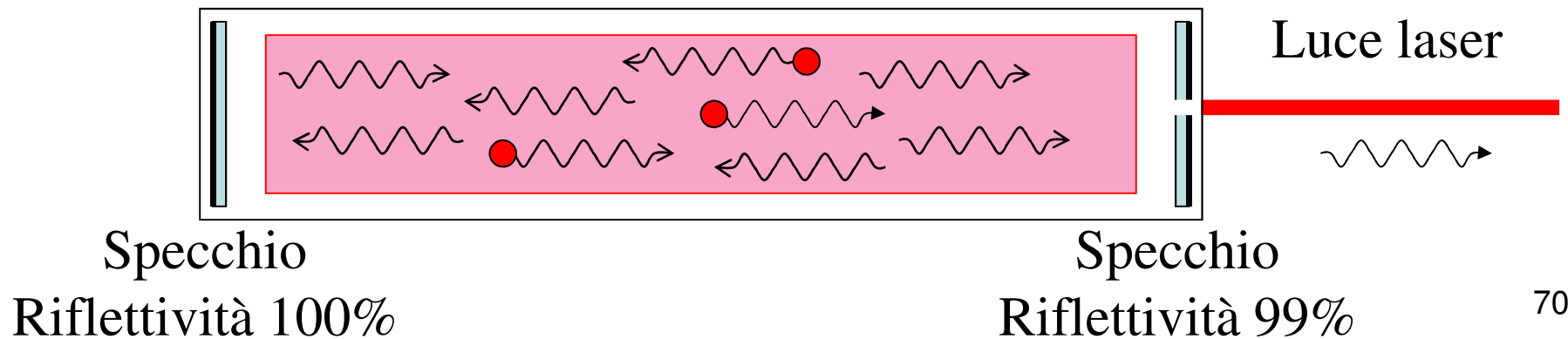
Emissione stimolata: LASER

- Sistema quantistico dove l'emissione è principalmente stimolata

Principio di funzionamento: inversione di popolazione + stimolazione

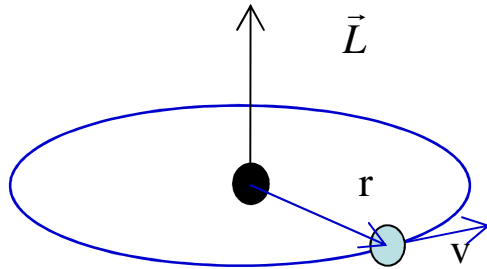


Stimolazione: $P_{emissione} = P_0(1 + n_\omega)$



Aspetto storico: atomo di Bohr (1913)

- Ipotesi: forza coulombiana, orbite circolari (classiche)



$$\vec{F}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \hat{r}, \quad \vec{F} = m\vec{a}, \quad \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

$$v^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m}$$

- Impulso: $p = mv = \frac{h}{\lambda}$

- Lunghezza dell'orbita: $2\pi r$

Ipotesi di Bohr: in un'orbita l'elettrone fa un numero intero di lunghezze d'onda

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n \rightarrow n = \frac{2\pi r p}{h} \rightarrow L = r p = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar$$

Da cui: $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} n^2 = a_0 n^2$ $E_n = -\frac{m e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2}$

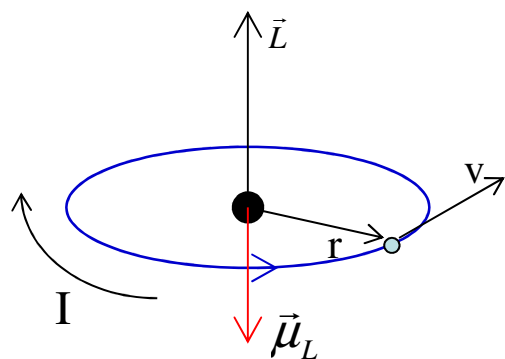
Eccezionale potere predittivo con tale ipotesi!

Parte IV: Spin e fisica atomica

- Atomo in un campo magnetico
- Esperienza di Stern e Gerlach
- Spin dell'elettrone
- Interazione spin orbita e doppietti spettrali
- Spin e statistica

Atomo in un campo magnetico

Effetto classico: precessione di Larmor

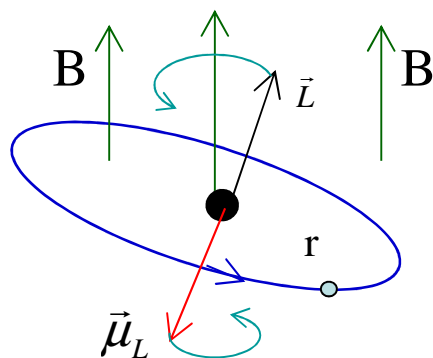


Corrente: $I = \frac{e}{T} = \frac{e}{2\pi r/v}$

Momento magnetico: $\mu = IA = \frac{e}{2\pi r/v} \pi r^2 = \frac{evr}{2} = \frac{e}{2m_e} L$

Momento di dipolo magnetico (orbitale) di un elettrone: $\vec{\mu}_L = -\frac{|e|}{2m_e} \vec{L}$

Momento della forza: $\vec{M} = \vec{\mu}_L \wedge \vec{B}$



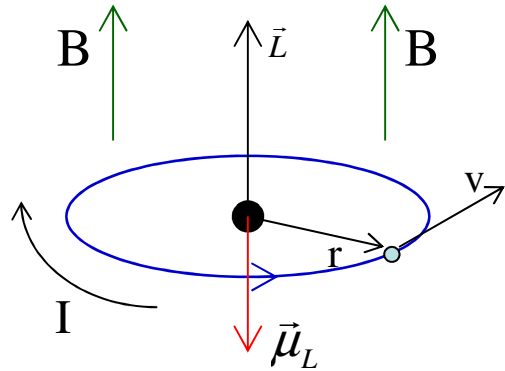
$$\vec{M} = \vec{\mu}_L \wedge \vec{B} \rightarrow \frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{B} \wedge \frac{e}{2m_e} \vec{L} = \vec{\omega} \wedge \vec{L}$$

$$\vec{\omega} = \frac{e\vec{B}}{2m_e}$$

Precessione responsabile del diamagnetismo di alcuni materiali

Atomo in un campo magnetico II

Effetto classico: precessione di Larmor



$$\text{Corrente: } I = \frac{e}{T} = \frac{e}{2\pi r/v}$$

$$\text{Momento magnetico: } \mu = IA = \frac{e}{2\pi r/v} \pi r^2 = \frac{evr}{2} = \frac{e}{2m_e} L$$

Momento di dipolo magnetico (orbitale) di un elettrone: $\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$

Stesso risultato (ma molti più conti) nella **Numero quantico magnetico**

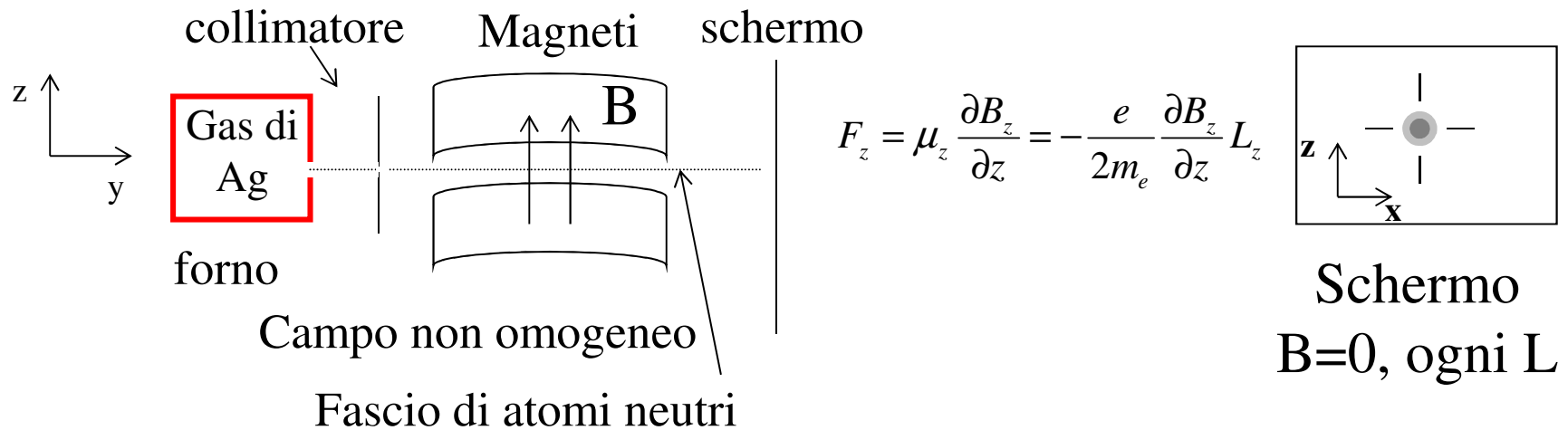
Potenziale dell'interazione momento-campo magnetico: $U = -\vec{\mu}_L \cdot \vec{B}$

Forza: $\vec{F} = -\nabla U = \nabla(\mu_x B_x + \mu_y B_y + \mu_z B_z) \rightarrow F_z \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z}$

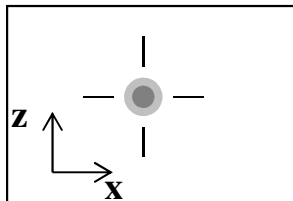
Quantizzazione della forza: $F_z \approx \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = \left(-\frac{e}{2m_e} L_z\right) \frac{\partial B_z}{\partial z} = \left(-\frac{e}{2m_e} m\hbar\right) \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\frac{eh}{2m_e} \frac{\partial B_z}{\partial z}$

Esperienza di Stern e Gerlach

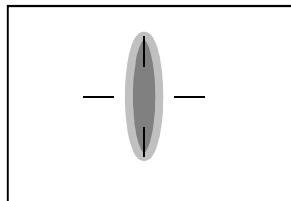
E' possibile osservare la quantizzazione della forza?



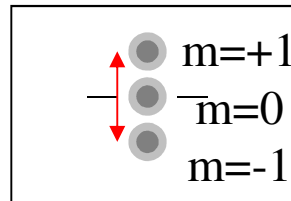
$dB/dz > 0$, risultati attesi



L=0

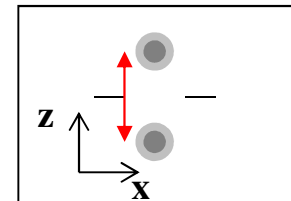


L=1,
classico



L=1,
quantistico

$dB/dz > 0$, risultato ottenuto



L=0

con Ag
e H



Spin dell'elettrone

- Si ha lo stesso risultato dell'esperienza di Stern-Gerlach con idrogeno e argento ($L=0$) anche con elettroni isolati!
Interpretazione. L'effetto è dovuto ad una nuova proprietà degli elettroni: lo spin

Lo spin si comporta come un momento angolare intrinseco delle particelle. Gli elettroni hanno spin $1/2$:

$$\vec{s}_e : \quad s_z = \pm \frac{1}{2} \hbar, \quad |\vec{s}_e|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{1}{2}\right) \hbar^2 = \frac{3}{4} \hbar^2 \quad \vec{\mu}_s \cong -2 \frac{e}{2m_e} \vec{s}$$

Anche protoni e neutroni hanno spin $1/2$.

Gli spin degli elettroni, dei protoni, dei neutroni si compongono con il momento angolare orbitale per dare il momento angolare totale dell'atomo (J).

Struttura fine ed iperfine dei livelli degli atomi

- I livelli energetici con stesso n e diverso l sono degeneri solo in prima approssimazione

Le proprietà relativistiche del sistema aggiungono due termini di potenziale legato allo spin delle particelle:

Interazione dei dipoli magnetici orbitali ed intrinseci $\vec{\mu}_L = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$

Interazione spin-orbita: $U_{LS} = k \vec{L} \cdot \vec{s}_e$ (struttura fine, 0,02%)

Rimuove la degenerazione in L

Interazione spin-spin: $U_{SS} = k \vec{s}_e \cdot \vec{s}_p$ (struttura iperfine, più piccola)

Rimuove la degenerazione su un dato livello

Nella soluzione completa dell'atomo di idrogeno
NON si hanno livelli degeneri

Interazione spin-orbita e doppietti del sodio

Sodio: Na $11e^-$: Struttura atomica $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$ (Ne) $3s^1 3p^0$

Nello stato fondamentale $3s^1$: $l = 0$, $s = \frac{1}{2}\hbar$ $\vec{J} = \vec{s}_e \rightarrow j = \frac{1}{2}$

Momento angolare totale: $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}_e \rightarrow |\vec{J}|^2 = j(j+1)\hbar^2$, $J_z = j_z\hbar$, $-j \leq j_z \leq +j$

Nel primo stato eccitato $3p$: $l = 1$, $s = \frac{1}{2}\hbar$

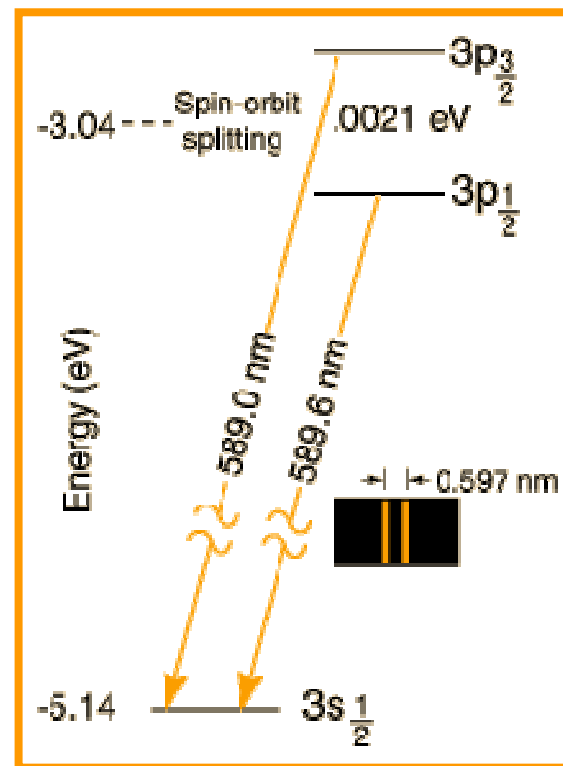
$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}_e$ Le direzioni dei vettori sono importanti!

In generale, si hanno 2 soluzioni:

$$j = l - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}, \quad j = l + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$$

L'interazione spin-orbita $U_{LS} = k\vec{L} \cdot \vec{s}_e$ differenzia l'energia di questi due livelli

Si parla allora di orbitali nX_j : $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$



Negli spettri di emissione le righe diventano doppietti, tripletti...⁷⁸

Particelle identiche

Perché tutti gli elettroni di un atomo non stanno nel livello fondamentale 1s?

Osservazione: per un osservatore esterno gli atomi e le particelle sono indistinguibili. Es: non posso distinguere tra loro due elettroni

Se ho un sistema quantistico con due elettroni, la probabilità dovrà essere simmetrica per lo scambio dei due elettroni.

$\psi(x_1, x_2) \rightarrow P(x_1, x_2) = |\psi(x_1, x_2)|^2$ in generale non simmetrica per $x_1 \leftrightarrow x_2$

Simmetrizzazione: $\psi_S(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) + \psi(x_2, x_1) = \psi_S(x_2, x_1)$

$\rightarrow P(x_1, x_2) = |\psi_S(x_1, x_2)|^2$ è simmetrica

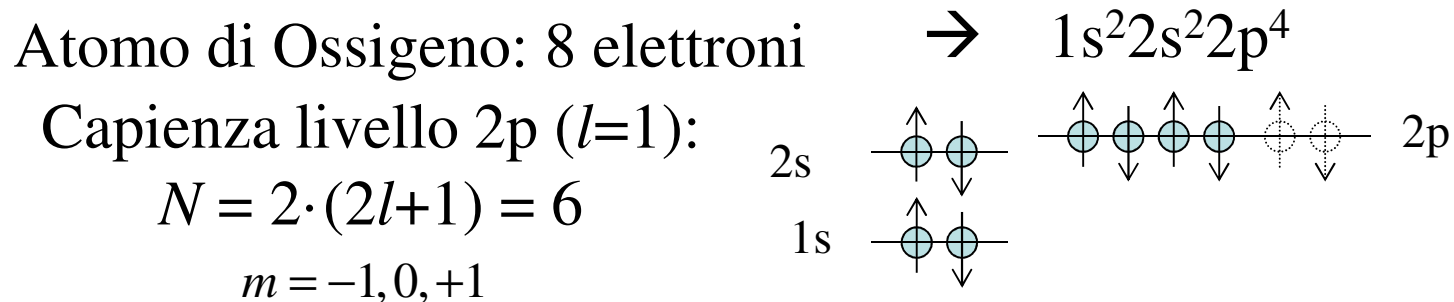
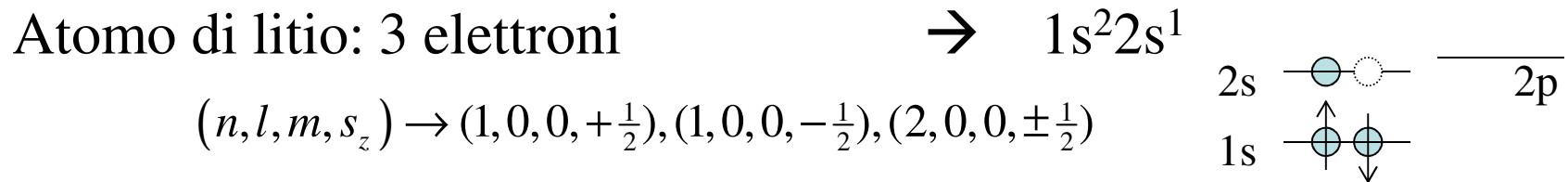
Antisimmetrizzazione: $\psi_A(x_1, x_2) = \psi(x_1, x_2) - \psi(x_2, x_1) = -\psi_A(x_2, x_1)$

$\rightarrow P(x_1, x_2) = |\psi_A(x_1, x_2)|^2$ è simmetrica

Teorema spin e statistica

Teorema spin e statistica: per avere una teoria coerente (...) occorre che più particelle identiche a **spin** $\frac{1}{2}$ (semintero, fermioni) abbiano una funzione d'onda **antisimmetrica**.
(per completezza: spin intero, bosoni \rightarrow funzione simmetrica)

Conseguenze: in ogni stato quantico posso mettere *uno ed un solo fermione*. Se nella descrizione dello stato quantico trascuro lo spin, allora posso mettere 2 elettroni per stato quantico.



Teorema spin-statistica: conseguenze

- Gli elettroni in un atomo si collocano su livelli energetici diversi; ogni singolo livello (n,l,m) può ospitare solo due elettroni con spin opposti;
- I protoni ed i neutroni sono fermioni; in un nucleo ogni livello energetico (n,l,m) può ospitare solo due fermioni identici
- Due fermioni possono accoppiarsi in un sistema a spin intero (bosone) \rightarrow superconduttività.

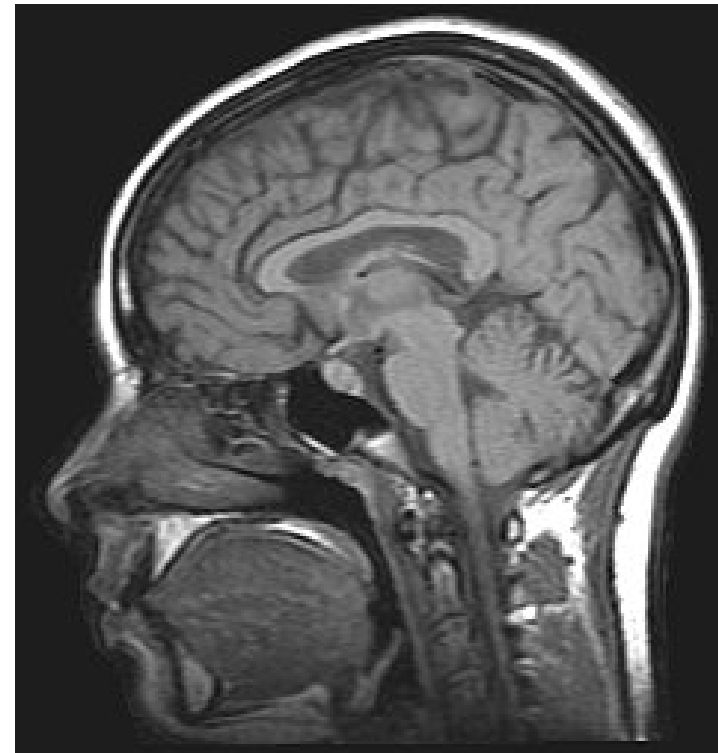
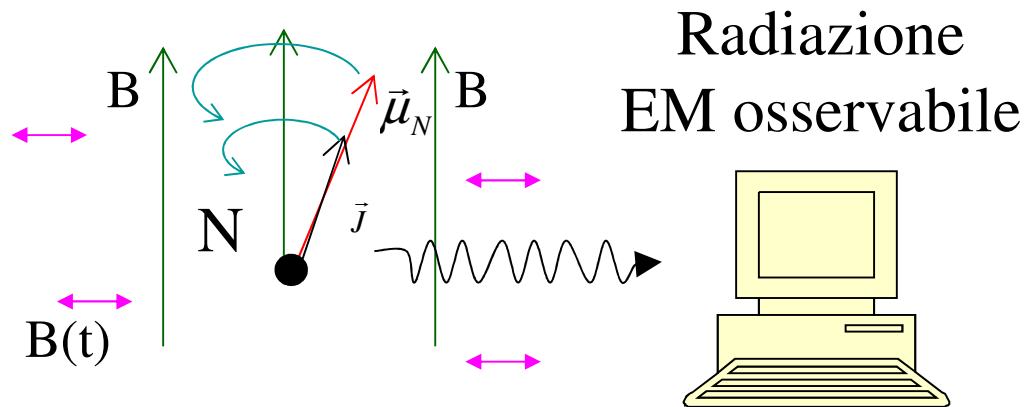
Applicazioni dello spin

- I protoni, i neutroni e gli elettroni hanno tutti spin $1/2$.
- Allo spin è associato un momento magnetico: $\vec{\mu}_s \cong -g \frac{e}{2m} \vec{s}$

L'eccitazione del momento magnetico di un protone tramite un campo magnetico esterno ne può rivelare la presenza.

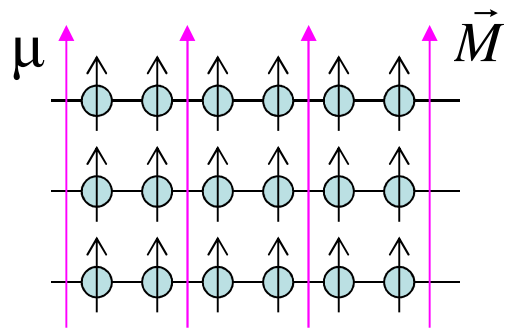
Risonanza magnetica nucleare

In un campo magnetico intenso B_1 ,
si mette un campo B oscillante $B(t) \rightarrow$

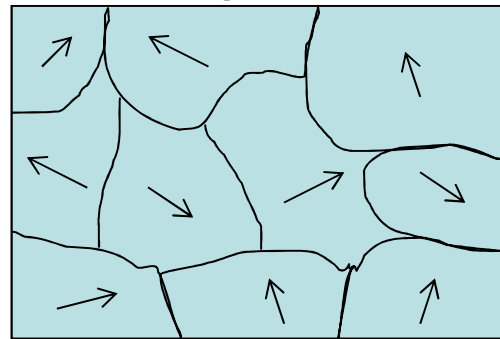


Effetti di spin: ferromagnetismo e magneti naturali

- Ogni atomo è dotato globalmente di un momento angolare totale e di un momento magnetico totale.
- L'interazione spin-spin nel ferro è tale da allineare i momenti angolari totali degli atomi vicini e quindi i momenti magnetici
- Si ha allora una magnetizzazione macroscopica!



Domini magnetici nel Fe



$\sim 100\mu\text{m}$

Nei magneti naturali (magnetite: Fe_3O_4) un dominio magnetico corrisponde a tutto il metallo

Riassumendo per concetti la Meccanica Quantistica:

- Si perde il determinismo della Meccanica Classica
- Entra l'indeterminazione e l'interpretazione probabilistica
- Tutti i sistemi fisici (particelle, corpi estesi, onde elettromagnetiche) sono descritti da funzioni d'onda prive (in generale) di significato intrinseco e non sono osservabili.
- Vi è causalità e determinismo sulla funzione d'onda, che soddisfa un'equazione fondamentale: l'eq. di Schrödinger
- Tutte le quantità misurabili sono ottenute come medie di operatori sulle funzioni d'onda. La loro interpretazione (e la loro osservazione in laboratorio) è probabilistica.
- La meccanica classica è una condizione limite della meccanica quantistica e vale sempre in media. La MQ (non relativistica) è una ottima descrizione della realtà fino al livello atomico.
- Le particelle quantistiche (elettroni, fotoni...) sono puntiformi ed indivisibili, ma si propagano come onde estese!

Effetti quantistici intorno a noi (elenco minimale) I

- Lampadina ad incandescenza, sole → emissione di corpo nero
- Lampada al neon, al mercurio, al sodio → emissione per righe, luce fredda
- Lettori ottici, laser (supermercato, CDROM, DVD)
→ emissione focalizzata di fotoni monocromatici
- Fotografia tradizionale/digitale; occhio, visione del colore
 - Assorbimento per righe spettrali; sensibilità primaria a 3 colori: rosso, verde, blu
- Chimica → tutta la chimica è legata a effetti quantistici
 - stabilità atomica, struttura atomica, legami molecolari
- Magnetismo, ferromagnetismo → effetti di spin

Effetti quantistici intorno a noi (elenco minimale) II

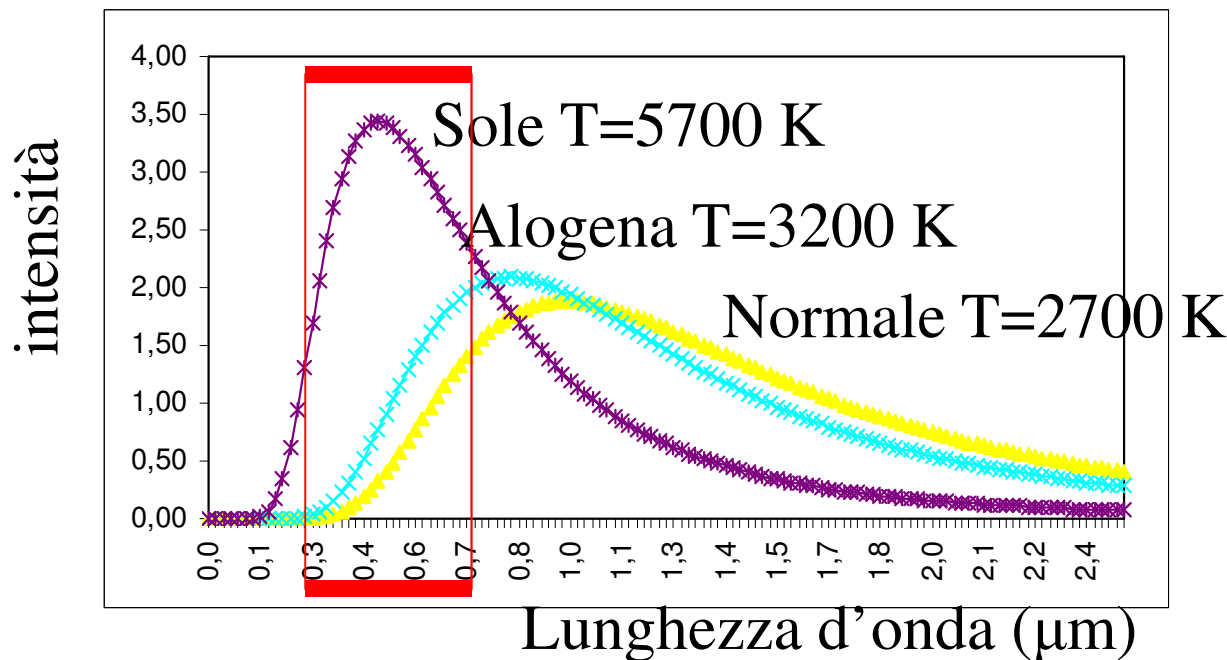
- Medicina nucleare
 - Radiografia, Mammografia, Risonanza magnetica nucleare (RMN), Positron Emission Tomography (PET), Tomografia Assistita da Calcolatore (TAC), Densitometria ossea, Radioterapia, Adroterapia...
- Radiodatazioni
- Analisi non distruttiva di campioni
- Energia elettrica → fotovoltaica (0.03%), nucleare (18%); pannelli/celle solari
- Superconduttività

Radiazione di Corpo Nero

Legge della radiazione di Planck: $E(\lambda, T) = \frac{8\pi hc}{\lambda^5} \frac{1}{\exp\left(\frac{hc}{\lambda kT}\right) - 1}$
 (densità di energia radiante nella cavità, per unità di lunghezza d'onda).

Legge di spostamento di Wien:

$$\lambda_{\max} T = C_0 = 0,2014 \frac{hc}{k} \text{ cm K} = 0,289 \text{ cm K}$$



Fine corso