

## Meccanica Quantistica II

Prof. Mauro Villa

1

## Dettaglio del corso - II

- Stati liberi e stati legati
  - Eq. di Schroedinger con potenziale
  - Casi unidimensionali:
    - Stati stazionari;
    - buca di potenziale infinita
    - buca di potenziale finito
    - Oscillatore armonico
  
    - 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
- Spin e fisica atomica
  - Spin ed elettroni in un campo B
  - Spin e statistica
  - Interazione spin orbita e doppietti spettrali

2

## Materiale didattico e testi

- Quanto già presentato dal Prof. Massa
- Halliday-Resnik, *Meccanica Quantistica*, CEA
- Max Born, *Fisica Atomica*, Boringhieri
  
- Lucidi ed altro materiale in ISHTAR:
- <http://ishtar.df.unibo.it/Uni/bo/ingegneria/all/villa/stuff/2005/LS/FisicaModerna.html>

## 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

4

## 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* 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

$$\left. \begin{aligned} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \hbar\omega \\ p = \hbar k \end{aligned} \right\} \Rightarrow (K \equiv) \frac{p^2}{2m} = E$$

che rispecchia la proprietà della particella libera (non soggetta a forze, e quindi senza energia potenziale).

5

## 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** ( $\Psi$ ) è determinato sulla base dell'equazione di Schrödinger: trovare la  $\Psi(x,y)$  conoscendo la  $U(x)$

6

## 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  $\psi(x)\varphi(t)$ :

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

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:  $\varphi(t) = Ae^{-i(C/\hbar)t}$

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!

8

### 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:  $\Delta E \Delta t > \hbar / 2$

9

### 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!)

10

### Normalizzazione delle funzioni d'onda

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

- Probabilità di trovare la particella in un intervallo di ampiezza  $dx$ :

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

- Certezza di trovare la particella da qualche parte:

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

L'eq definisce la costante moltiplicativa della funzione d'onda. Solitamente si tratta di un numero definito a meno di una fase ininfluente. Se  $\psi(x)$  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 ( $V$ )

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

11

### 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  $C_0$ ,  $\rightarrow \psi''(x)$  è continua,  $\psi(x)$  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  $\psi(x)$

12

## 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  $x < 0$

$$\text{per } x > 0: \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (u - E)\psi(x) \rightarrow \psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

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

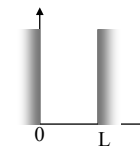
$$\text{per } x > 0: \psi(x) = A \sin(kx) \text{ con } k = \sqrt{2m(E-u)}/\hbar$$

13

## Esempio I: buca di potenziale infinita (I)

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

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



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

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  $x > L$

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

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

14

## 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  $x=0$ :

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

Richiedo la continuità per  $x=L$ :

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

$$\rightarrow A=0 \quad \text{oppure} \quad kL = \pi n \quad \text{con } n \text{ intero}$$

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

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

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

15

## Esempio I: buca di potenziale infinita (III)

- Soluzione completa all'eq. Indipendente da  $t$ :

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

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

Reintroduciamo il tempo:

$$\Psi_n(x, t) = \text{sen}(k_n x) e^{-iE_n t / \hbar} \sqrt{2/L} \quad \text{Soluzione con energia } E_n \text{ definita}$$

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

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

I coefficienti  $c_n$  sono determinati dalle condizioni iniziali.

16

## 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  $\Psi_n(x,t)$

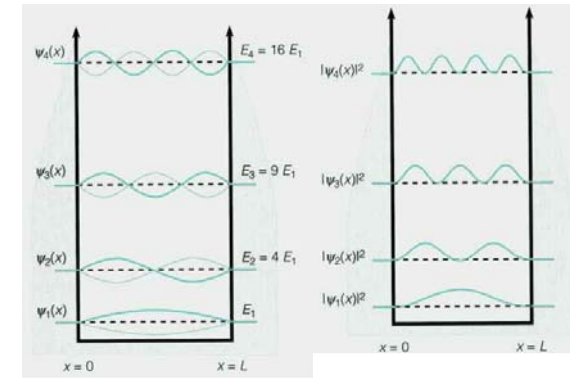
7) Come ottenere la soluzione più generale

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

17

## Buca di potenziale infinita

Primi stati stazionari:



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

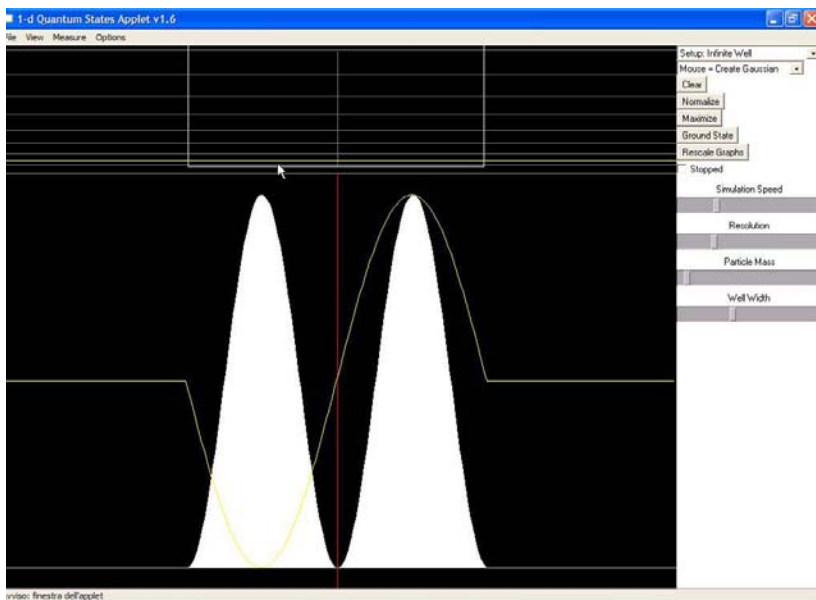
$$\Psi_1(x,t) = \text{sen}(\pi x / L) e^{-iE_1 t / \hbar} \sqrt{2/L} \quad E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}$$

Secondo livello energetico (n=2):

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

18

## Applet Java



19

## 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*:

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

20

## Incertezze

### Stati stazionari:

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

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

$(U(x) = U_0 + U_1 x + U_2 x^2 + U_3 x^3 \dots)$

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

Incertezza 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  $t$

21

## Generalizzando....

Possiamo facilmente generalizzare per funzioni generiche della posizione:  $f(x) = f_0 + f_1 x + f_2 x^2 + f_3 x^3 \dots$

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

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.

22

## Principali osservabili fisiche

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

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

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

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  $\bar{O} = E = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$

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

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

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

23

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

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

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

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

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

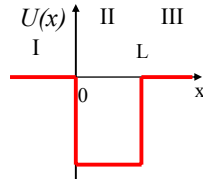
Principio di indeterminazione:  $\Delta x \cdot \Delta p = 0.568\hbar$

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

## 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:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi(x) \rightarrow \psi(x) = Ce^{\alpha x} + De^{-\alpha x} \text{ con } \alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \quad 25$$

Soluzione non normalizzabile:  $D=0$

## Buca di potenziale finita (II)

• Ricerchiamo una soluzione nella forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ce^{+\alpha x} & x < 0 \quad (I) \\ A \sin(kx) + B \cos(kx) & 0 < x < L \quad (II) \\ Ge^{-\alpha x} & x > L \quad (III) \end{cases} \text{ con } \begin{cases} \alpha = \sqrt{-\frac{2mE}{\hbar^2}} \\ k = \sqrt{\frac{2m(U_0 + E)}{\hbar^2}} \end{cases}$$

Imponiamo la continuità di  $\psi$  e di  $\psi'$  in 0 e in L

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

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

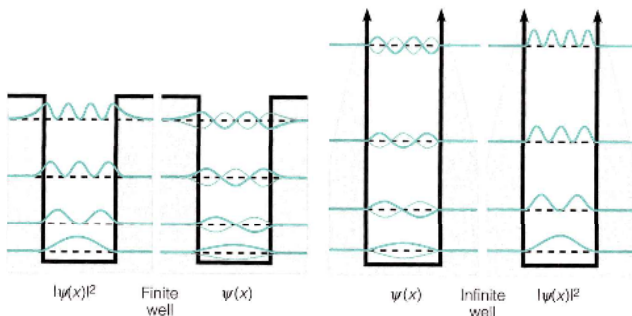
$$\psi'_{II}(L) = \psi'_{III}(L) \rightarrow Ak \cos(kL) - kB \sin(kL) = -\alpha Ge^{-\alpha L}$$

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

*E' una relazione di quantizzazione!*

26

## 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  $\delta$ :  $\psi(x) = e^{-\alpha x}$   $\delta = \frac{1}{\alpha} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m(U-E)}} \quad 27$

## Esempio III: Forza elastica / Oscillatore armonico

Caso classico:

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

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

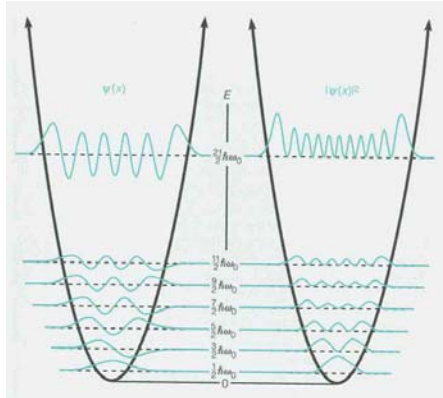
$$E = \hbar\omega_0(n + \frac{1}{2}) \text{ con } \omega_0 = \sqrt{k/m}, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

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

28

## Le soluzioni per l'oscillatore armonico

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



$H_n(bx)$ : 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

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2}$$

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

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

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

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

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

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

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.**

30

## Sovrapposizione di stati

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

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_0(x, t) + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi_1(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{b}{\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2 - \frac{1}{2} i \omega_0 t} + \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{\frac{b}{2\sqrt{\pi}}} (2bx) e^{-\frac{1}{2} b^2 x^2 - \frac{3}{2} i \omega_0 t}$$

Determiniamo l'osservabile posizione:

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

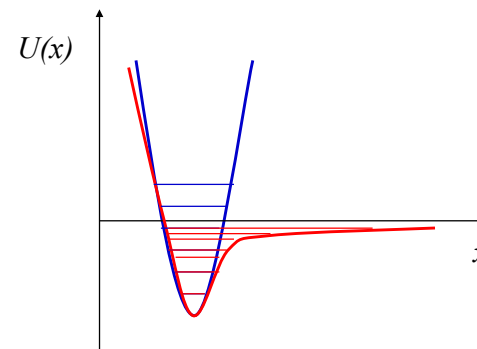
La sovrapposizione degli stati produce il moto nel sistema! Applet →

31

## 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



32



## Principio di Corrispondenza MQ ↔ 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:  $\langle O \rangle(t) = \int \Psi^*(x,t) O \Psi(x,t) dx$

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

34

### Esercizio 1: 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

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

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

35

### 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:

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

36

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

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

37

### 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:

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

38

### 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

39

### 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

40

## 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 ( $\langle p \rangle = +k\hbar$ )

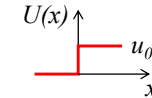
$\Psi(x,t) = e^{i(-kx-\omega t)}$  è un'onda piana regressiva ( $\langle p \rangle = -k\hbar$ )

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....

41

## 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:  $A+B=C$ ,  $k(A-B)=k'C$

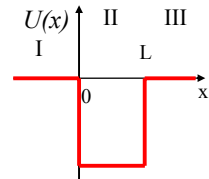
In generale:  $B \neq 0 \rightarrow$  ho SEMPRE un'onda riflessa dal salto di potenziale  
 $C \neq 0 \rightarrow$  ho un'onda trasmessa dopo il salto di potenziale ( $E > u_0$ )

42

## 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:

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



Le soluzioni ad  $E$  fissata sono:

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

Condizioni al contorno in 0 e in L  $\rightarrow$  4 relazioni: fisso B,C,D,F

**Non ho alcuna relazione di quantizzazione!**

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

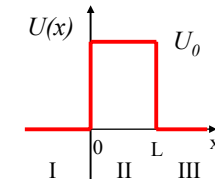
Probabilità di **trasmissione**  $T = |F|^2 / |A|^2 = f_2(k, L, U_0)$

43

## Barriera finita di potenziale

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

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



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:  $-U_0 \rightarrow +U_0$

$\Psi_{II}(x) = Ce^{+ik'x} + De^{-ik'x}$  con  $k' = \sqrt{2m(E-U_0)} / \hbar$  ( $\in \mathbb{C}$  se  $E < U_0$ )

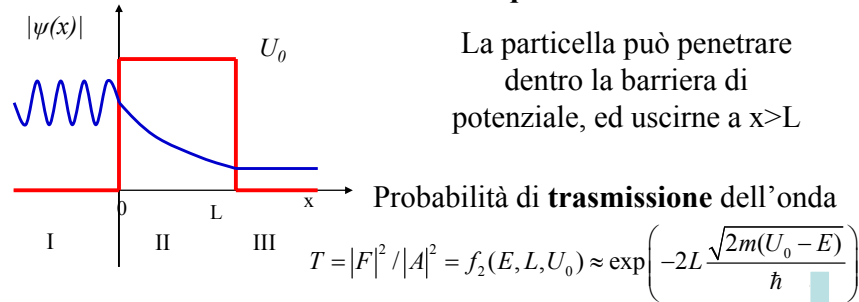
44

## Effetto tunnel: riflessione e trasmissione

Soluzione generale per  $E < U_0$ :

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

Condizioni al contorno in 0 e in L  $\rightarrow$  4 relazioni: fisso B,C,D,F  
**Non ho alcuna relazione di quantizzazione!**



## 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:

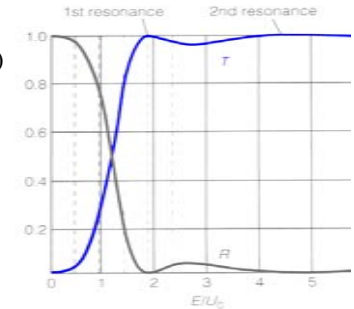
posto  $\beta = \sin^2\left[\frac{\sqrt{2m(E-U_0)}L}{\hbar}\right]$  e  $\gamma = 4\frac{E}{U_0}\left(\frac{E}{U_0}-1\right)$

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

Nota bene: quando

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

**Trasmissione risonante**



## Effetto tunnel: microscopia ad effetto tunnel

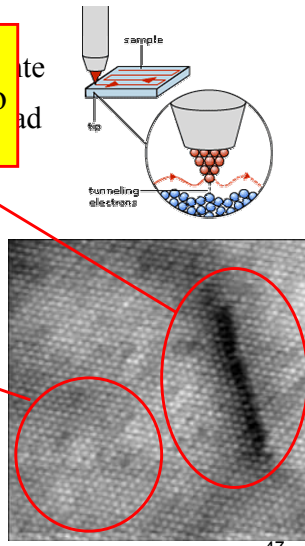
L'effetto tunnel (T) dipende dall'ampiezza della z...  
 Questa sensibilità e' s...  
 effetto tunnel.

**Difetto nel reticolo**

Car...  
 cor...  
 dis...  
 Gl...  
 punta al campione per effetto tunnel.

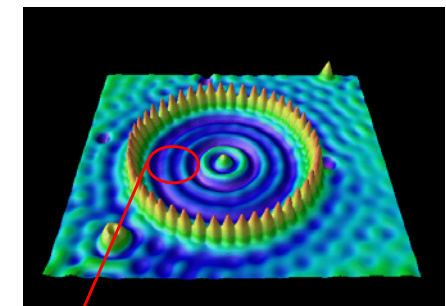
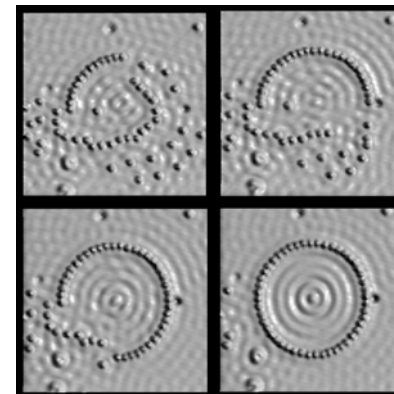
**Reticolo atomico regolare**

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

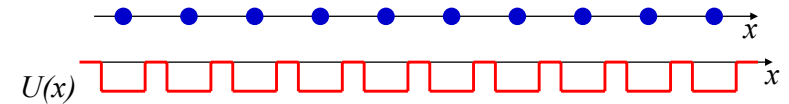
L'effetto tunnel ha un ruolo in un numero notevole di situazioni tra cui:

- Decadimenti radiattivi dei nuclei
- Fusione nucleare
- Semiconduttori

49

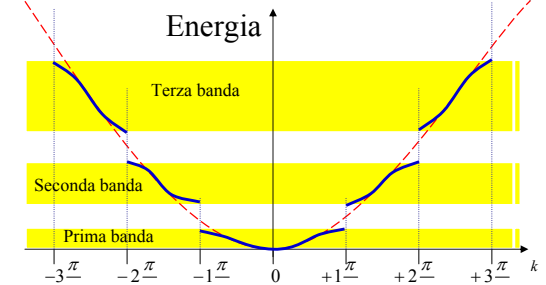
## Livelli energetici nei conduttori

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  $U(x)$ )



## 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

51

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

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

52

## 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:  $\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\phi(t)$

Troverò in questo modo le soluzioni stazionarie ad energia definita:

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

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

eq. di Schrödinger in 3d indipendente dal tempo

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

Proprietà di continuità analoghe al caso 1D

53

## Buca di potenziale infinita in 3D

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

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

L'eq di Schrödinger diventa:

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

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

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

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

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

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

54

## Forze (e potenziali) centrali

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

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

Nel moto si conserva il momento angolare  $\vec{L}$ :  $\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{0}$

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

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

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

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

$m$ : 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  $L_x, L_y, L_z$

55

## Eq di Schrödinger in coordinate polari

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

$$\begin{cases} x = r \sin \theta \cos \varphi \\ y = r \sin \theta \sin \varphi \\ z = r \cos \theta \end{cases} \quad \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left( \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right)$$

Le variabili angolari compaiono solo in un termine...

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

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

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

56

## Momenti angolari

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

$C = l(l+1)$   $l$  intero  
 $-l < m < l$ ,  $m$  intero

$P_{0,0}(\theta) = 1$ ,  $P_{1,0}(\theta) = \cos \theta$ ,  $P_{1,1}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \theta$ ,  
 $P_{2,0}(\theta) = \frac{3}{2} \cos^2 \theta - \frac{1}{2}$ ,  $P_{2,1}(\theta) = -\sqrt{\frac{3}{2}} \sin \theta \cos \theta$ ,  
 $P_{2,2}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{8}} \sin^2 \theta$ ,

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

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

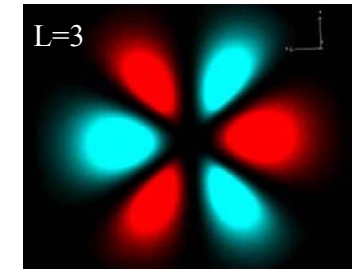
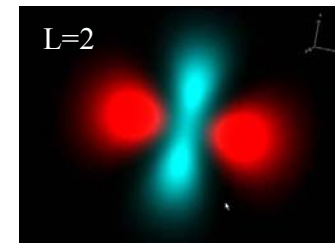
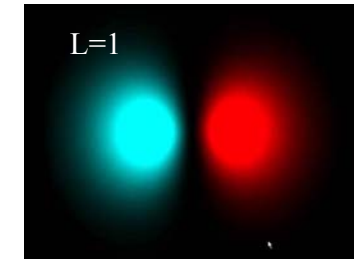
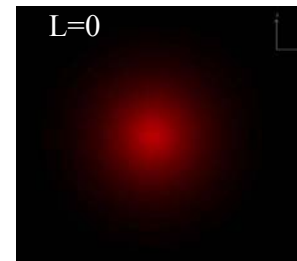
$L_z Y_l^m(\theta, \varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta, \varphi)$

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

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

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



58

## Funzione spaziale

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

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

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

**Degenerare per m**

Una generica soluzione di stato legato sarà:

$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_n \sum_l \sum_{m=-l}^{+l} c_{n,l,m} \psi_{n,l,m}(r, \theta, \varphi) = \sum_n \sum_l \sum_{m=-l}^{+l} c_{n,l,m} R_n(r) Y_l^m(\theta, \varphi)$

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

59

## Atomo di idrogeno

Sistema protone-elettrone tenuto insieme dalla forza elettromagnetica

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

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

L'energia è quantizzata:  $E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2}$   $n = 1, 2, 3, \dots$   $E_1 = -13.6 \text{ eV}$   
 $E_l = R_\infty$

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

60

## Soluzioni radiali

Le soluzioni all'equazione

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

Sono dette funzioni di Laguerre:

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

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

Distanza media elettrone-protone:

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

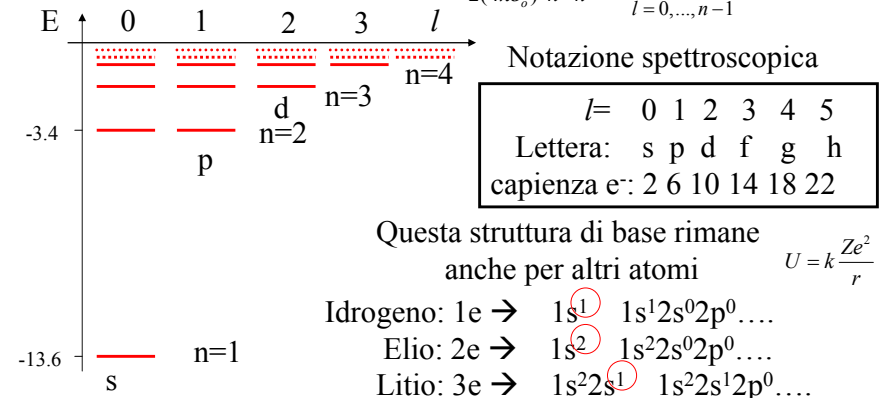
Stato fondamentale:  $\psi_{n,l,m}(r, \vartheta, \varphi) = \psi_{1,0,0}(r, \vartheta, \varphi) = R_1(r)Y_0^0(\vartheta, \varphi) = \sqrt{\frac{1}{\pi a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$

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

61

## Livelli energetici

$$E_n = -\frac{me^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad E_1 = -13.6 \text{ eV} \quad l = 0, \dots, n-1$$

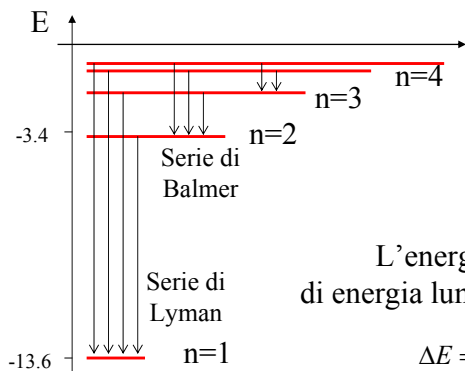


Questa struttura di base rimane anche per altri atomi  $U = k \frac{Ze^2}{r}$

- Idrogeno: 1e → 1s<sup>1</sup> 1s<sup>1</sup>2s<sup>0</sup>2p<sup>0</sup>....
- Elio: 2e → 1s<sup>2</sup> 1s<sup>2</sup>2s<sup>0</sup>2p<sup>0</sup>....
- Litio: 3e → 1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup> 1s<sup>2</sup>2s<sup>1</sup>2p<sup>0</sup>....
- Ossigeno: 8e → 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup> 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>4</sup>3s<sup>0</sup>3p<sup>0</sup>....
- Argento: 47e → 1s<sup>2</sup>2s<sup>2</sup>2p<sup>6</sup>3s<sup>2</sup>3p<sup>6</sup>3d<sup>10</sup>4s<sup>2</sup>4p<sup>4</sup>4d<sup>10</sup>5s<sup>1</sup>

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  $\Delta E$

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

La serie di Balmer dà luce visibile

Le transizioni tra livelli possono comportare emissione o assorbimento di fotoni

63

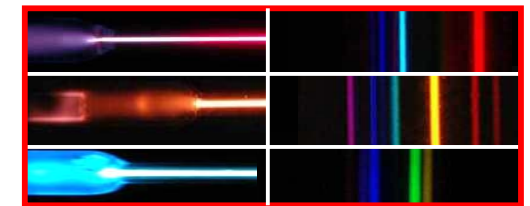
## Spettri di elementi

### Spettri di emissione

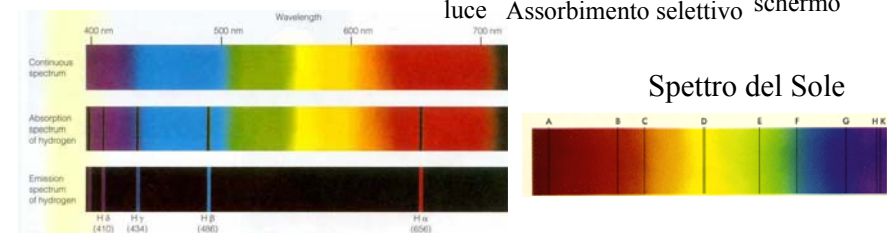
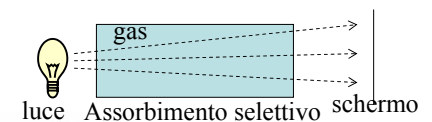
Idrogeno (1e):

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  $E = \hbar\omega$  vale:

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

Probabilità di assorbimento:

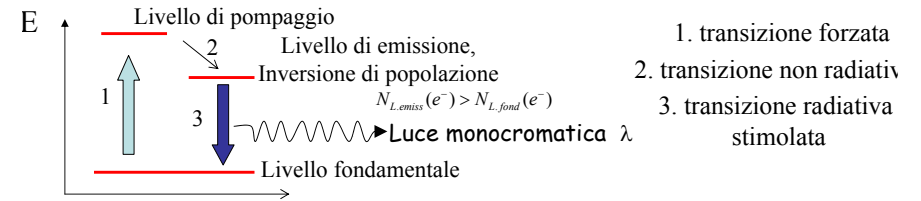
$$P_{assorbimento}(1\text{ fotone}, E = \hbar\omega) = n_\omega P_0$$

$n_\omega$  È il numero di fotoni che hanno pulsazione pari a  $\omega$

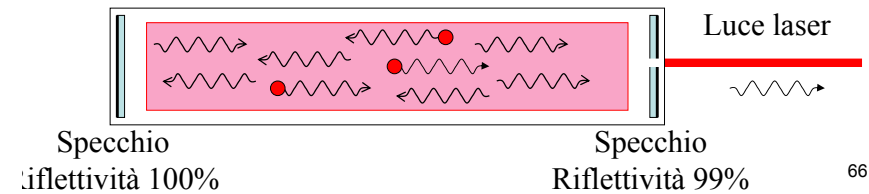
65

## Emissione stimolata: LASER

- Sistema quantistico dove l'emissione è principalmente stimolata
- Principio di funzionamento: inversione di popolazione + stimolazione



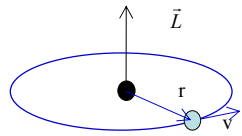
Stimolazione:  $P_{emissione} = P_0(1 + n_\omega)$



66

## 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:  $r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m e^2} n^2 = a_0 n^2$        $E_n = -\frac{m e^4}{3(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{R_\infty}{n^2}$

Eccezionale potere predittivo con tale ipotesi!

67

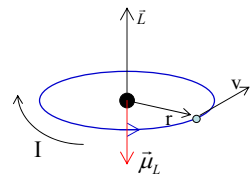
## Parte IV: Spin e fisica atomica

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

68

## Atomo in un campo magnetico

Effetto classico: precessione di Larmor

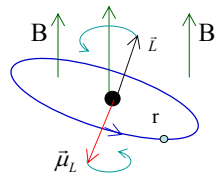


$$\text{Corrente: } I = \frac{e}{T} = \frac{e}{2\pi r/v}$$

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

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

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



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

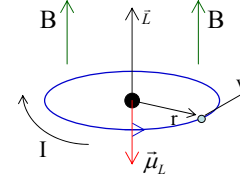
$$\vec{\omega} = \frac{e\vec{B}}{2m_e}$$

Precessione responsabile del diamagnetismo di alcuni materiali

69

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

## Esperienza di Stern e Gerlach

E' possibile osservare la quantizzazione della forza?

collimatore Magneti schermo

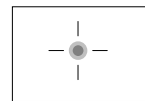
Gas di Ag

forno

Campo non omogeneo

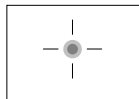
Fascio di atomi neutri

$$F_z = \mu_z \frac{\partial B_z}{\partial z} = -\frac{e}{2m_e} \frac{\partial B_z}{\partial z} L_z$$

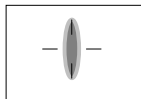


Schermo  
B=0, ogni L

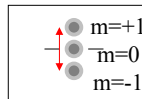
$dB/dz > 0$ , risultati attesi



L=0

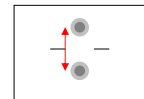


L=1,  
classico



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 e' 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:

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

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

73

## 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!

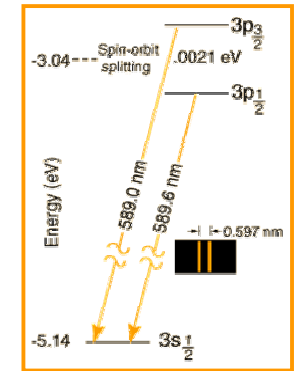
In generale, si hanno 2 soluzioni:

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

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...74



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

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

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

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

75

## Teorema spin e statistica

**Teorema spin e statistica:** per avere una teoria coerente (...)

occorre che più particelle a spin  $\frac{1}{2}$  (semintero, fermioni)

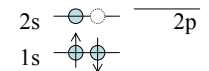
abbiano una funzione d'onda **antisimmetrica**.

(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.

Atomo di litio: 3 elettroni  $\rightarrow 1s^2 2s^1$

$(n, l, m, s_z) \rightarrow (1, 0, 0, +\frac{1}{2}), (1, 0, 0, -\frac{1}{2}), (2, 0, 0, \pm\frac{1}{2})$

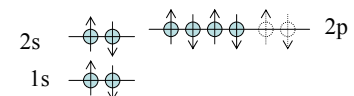


Atomo di Ossigeno: 8 elettroni  $\rightarrow 1s^2 2s^2 2p^4$

Capienza livello 2p ( $l=1$ ):

$N=2(2l+1)=6$

$m = -1, 0, +1$



76

## Teorema spin-statistica: conseguenze

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

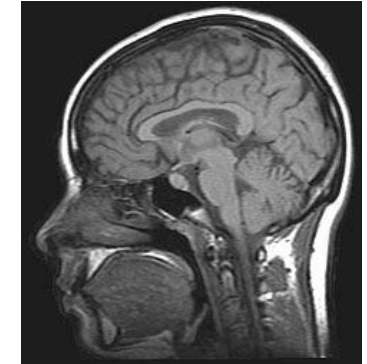
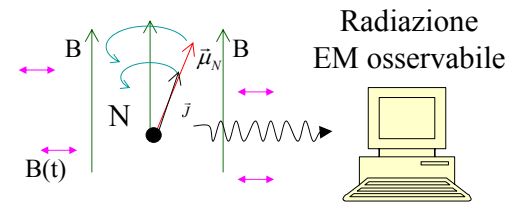
77

## Applicazioni dello spin

- I protoni, i neutroni e gli elettroni hanno tutti spin  $\frac{1}{2}$ .
- Allo spin e' 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 puo' rivelare la presenza.

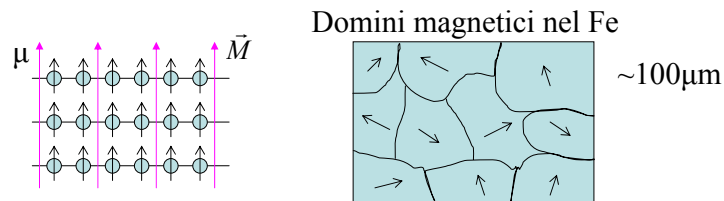
### Risonanza magnetica nucleare

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



## Effetti di spin: ferromagnetismo e magneti naturali

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



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

79

## 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 e' 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!

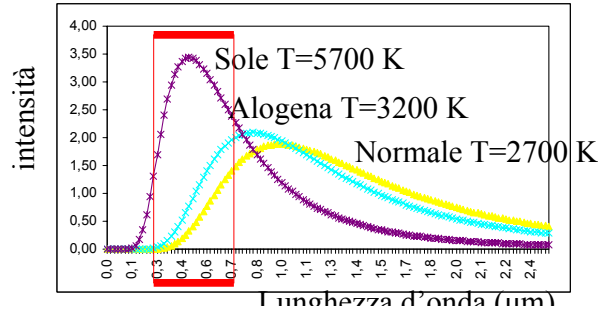
80

## 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:

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



81

## 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

82

## 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...
- Radiodazioni
- Analisi non distruttiva di campioni
- Energia elettrica → fotovoltaica (0.03%), nucleare (18%); pannelli/celle solari
- Superconduttività

83

## Fine corso

84