

Electronica dei Dispositivi

Piero Cosseddu Ph. D.

Dept. Of Electrical and Electronic Engineering
University of Cagliari (Italy)

email: piero.cosseddu@diee.unica.it

url: <http://people.unica.it/pierocosseddu/>
<http://sites.unica.it/dealab>

1) Proprietà fisiche dei semiconduttori

- **Cenni alla meccanica quantistica: il modello energetico di un atomo**
- Dall'atomo ai cristalli: il modello a bande di energia, popolazione delle bande, livello di Fermi, statistica di Fermi-Dirac
- Classificazione dei materiali in base alla loro conducibilità: metalli, semiconduttori, isolanti
- Semiconduttori intrinseci ed estrinseci; mobilità, legge dell'azione di massa - Diffusione, Legge di Einstein

La crisi della fisica classica

Verso la fine del XIX secolo, la fisica aveva raggiunto un eccezionale livello di sviluppo teorico e sperimentale, permettendo di poter giustificare in maniera chiara tutti i fenomeni naturali al momento conosciuti.

- Meccanica newtoniana ha raggiunto un eccezionale livello di rigore matematico. La termodinamica viene ricondotta, tramite la meccanica statistica, alla meccanica stessa.
- Equazioni di Maxwell hanno permesso di unificare effetti elettrici e magnetici

Alla ricerca della grande teoria unificatrice

La crisi della fisica classica

Purtroppo, questo quadro è destinato ad essere messo in crisi ben presto!

Una serie di nuovi fenomeni non potevano essere in alcun modo descritti dalle leggi classiche della meccanica, elettromagnetismo, ottica e termodinamica.

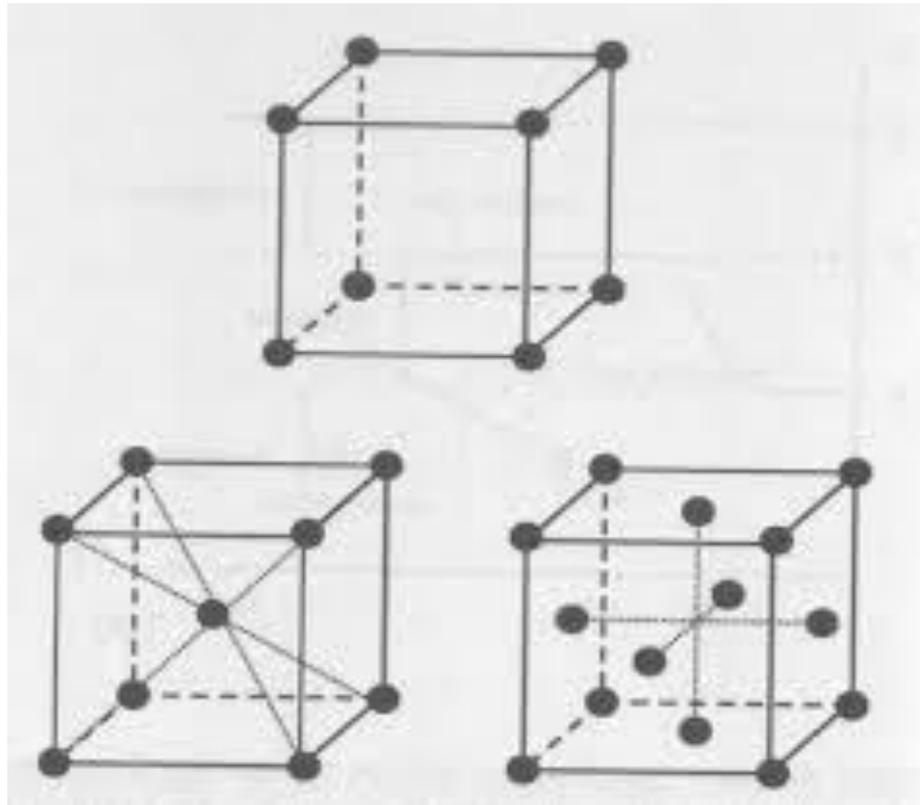
Essi risultavano tutti correlati alle proprietà fisiche del mondo microscopico

Elaborazione della meccanica quantistica

Il calore specifico nei solidi

Un solido può essere visto come una distribuzione ordinata e periodica di atomi: reticolo cristallino

Gli atomi sono vincolati al reticolo cristallino, per cui non sono liberi di muoversi nello spazio



Esempi di reticoli cristallini:

- *crystallo cubico semplice*
- *cubico a corpo centrato*
- *cubico a facce centrate*

Il calore specifico nei solidi

Gli atomi non sono liberi di muoversi, ma possono oscillare attorno alla loro posizione di equilibrio.

L'ampiezza di tali oscillazioni dipende dalla temperatura

È necessario ipotizzare l'esistenza di un qualche cosa che confini gli atomi stessi. Una *forza di confinamento*

Se tale forza di confinamento non esistesse gli atomi non potrebbero rimanere confinati all'interno del sito reticolare

Il calore specifico nei solidi

Ogni atomo è vincolato da un potenziale di richiamo elastico di tipo armonico

$$\mathbf{F} = -k\mathbf{r}$$

Dove F è la forza elastica di richiamo, k è la costante elastica che dipenderà dal materiale, r è il vettore spostamento dal sito reticolare

Possiamo scrivere la sua energia totale come:

$$E_{\text{Tot}} = \frac{1}{2}mv_x^2 + \frac{1}{2}mv_y^2 + \frac{1}{2}mv_z^2 + \frac{1}{2}kx^2 + \frac{1}{2}ky^2 + \frac{1}{2}kz^2 \quad (1)$$

Somma dell'energia cinetica e delle energia potenziale elastica.

Il calore specifico nei solidi

Principio di equipartizione dell'energia:

Ad ogni atomo compete un'energia media pari a

$E = \frac{1}{2}K_B T$ per ogni suo grado di libertà (*a cui sia associato un termine quadratico nelle velocità e/o nelle posizioni*)

Con K_B costante di Boltzmann e T temperatura

Se consideriamo un sistema di N atomi, la sua energia interna sarà

$$U = 3NK_B T \quad (2)$$

N.B. abbiamo 6 gradi di libertà, 3 energia cinetica e 3 energia potenziale elastica

Il calore specifico nei solidi

In termodinamica il calore specifico, ad una data T , rappresenta il calore che è necessario fornire ad una massa unitaria affinché la sua temperatura si innalzi di un grado Kelvin.

Se questo avviene a volume costante, cosa che avviene in un solido, allora possiamo definire il *calore specifico a volume costante*.

Il calore ceduto è proporzionale alla variazione di temperatura, secondo la legge:

$$Q = C_v \Delta T$$

Il calore specifico nei solidi

$Q=W+ \Delta U$, in cui W è il lavoro prodotto dal sistema, ma se il volume non cambia è $=0$, e ΔU è l'energia interna

$$\Delta U=C_v \Delta T$$

In altre parole $C_v= \Delta U/ \Delta T$ (3)

Dalla (2) ricaviamo:

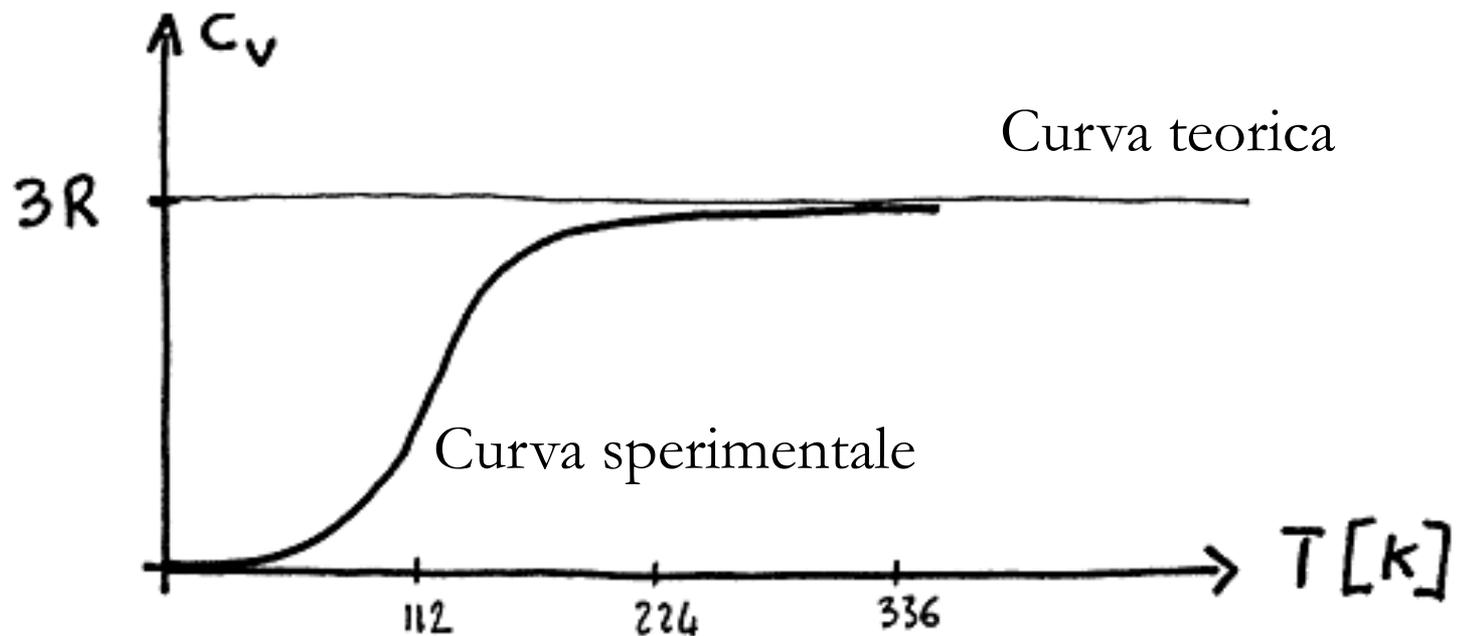
$$C_v=3NK_B \quad (K_B=R/N_A =1.3807 \times 10^{-23} \text{ J/K}) \quad (4)$$

Il calore specifico nei solidi

Legge di Dulong e Petit

In un solido cristallino armonico si arriva a dimostrare che il suo calore specifico, per una mole ($N=N_A$) è pari a:

$$C_V = 3R \quad (5)$$



Il calore specifico nei solidi

Dal grafico precedente, si evince chiaramente che tale legge è approssimata in maniera soddisfacente solo a temperature medio-alte

Per basse temperatura, la discordanza è evidente
 C_V si annulla per $T=0$

La fisica classica non è in grado di spiegare e giustificare il calore specifico nei solidi

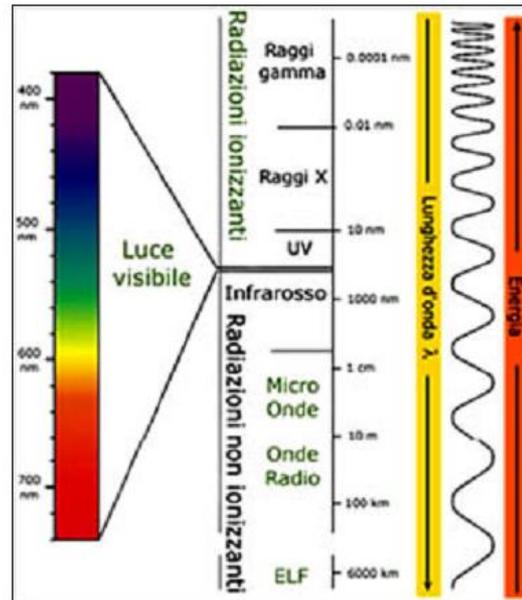
Dall'oscillatore armonico semplice, ad un concetto di oscillatore che segue le leggi della meccanica quantistica

Spettro del corpo nero

Se riscaldo un corpo, questo irraggia calore → radiazione termica

Qualsiasi corpo si trovi ad una temperatura superiore allo zero assoluto emette radiazione elettromagnetica. Spesso denominata radiazione termica perché associata alla temperatura

La radiazione termica è distribuita su tutto lo spettro delle frequenze



Spettro del corpo nero: radiazione termica

- L'intensità aumenta all'aumentare della temperatura
- La distribuzione spettrale presenta un picco di massimo in corrispondenza di una determinata frequenza ν_{\max}
- ν_{\max} aumenta all'aumentare della temperatura del corpo

Esperienza quotidiana:

se ci limitiamo a quella regione spettrale sensibile all'occhio umano, chiamata range della luce visibile, se riscaldiamo un corpo a temperature via via più elevate il suo colore passa dal rosso, all'arancione al bianco

Spettro del corpo nero: radiazione termica

Come possiamo caratterizzare la radiazione termica emessa da un corpo?

Tramite il suo *potere emissivo spettrale* e_ν o *brillanza spettrale*

Quantità di energia elettromagnetica emessa nell'unità di tempo, dall'unità di superficie, nell'intervallo di frequenze $[\nu, \nu + d\nu]$

Il potere emissivo spettrale è inoltre legato alla densità di energia elettromagnetica u_ν emessa

$$e_\nu = c/4u_\nu \tag{6}$$

c è la velocità della luce

Spettro del corpo nero: radiazione termica

Un corpo, oltre che emettere, può anche assorbire radiazione elettromagnetica

Potere assorbente spettrale o assorbanza spettrale a_ν

Quantità di energia elettromagnetica assorbita nell'unità di tempo, dall'unità di superficie, nell'intervallo di frequenze $[\nu, \nu + d\nu]$

Ci si aspetta che presi singolarmente brillanza e assorbanza spettrale dipendano dalla natura chimico fisica del materiale (confronto plastica con metallo) e dalle proprietà superficiali del corpo (una superficie lucida assorbe meno di una opaca)

Spettro del corpo nero: radiazione termica

È possibile dimostrare che il rapporto tra le due grandezze è indipendente dalle proprietà intrinseche ed estrinseche del materiale, ma è funzione della sola temperatura!

Legge di Kirchoff:

$$\Sigma_{\nu}(T) = e_{\nu} / a_{\nu} \quad (7)$$

$\Sigma_{\nu}(T)$ è una funzione universale che non dipende in alcun modo dalle proprietà del solido considerato

Il corpo nero

Per corpo nero si intende quel corpo capace di assorbire tutta la radiazione elettromagnetica incidente su di esso, per qualunque frequenza e per qualunque temperatura

Un corpo nero non trasmette e non riflette la radiazione incidente

Si pensi ad una cavità ricavata dentro un corpo dalle pareti interne riflettenti. La radiazione elettromagnetica che entra al suo interno, difficilmente riuscirà ad uscirne

In buona approssimazione può essere considerato un corpo nero



Il corpo nero

Un corpo nero ha di conseguenza potere assorbente $a_\nu = 1$

Di conseguenza, la legge di Kirchoff può essere interpretata come segue:

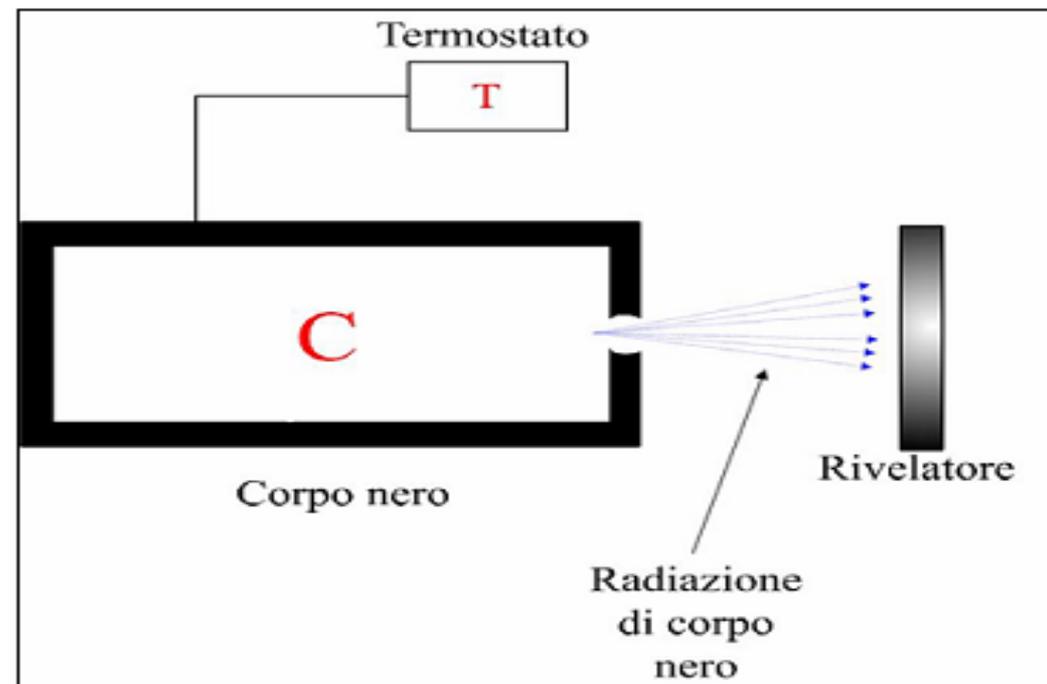
Il rapporto tra potere emissivo e potere assorbente di un corpo qualsiasi ad una certa frequenza e temperatura è sempre uguale al potere emissivo del corpo nero a quella frequenza e temperatura

Se conosciamo lo spettro di emissione del corpo nero, siamo in grado di risalire, tramite la legge di Kirchoff, alle caratteristiche di assorbimento ed emissione di un qualsiasi altro oggetto.

Il corpo nero: esperimenti e teoria classica

Per i motivi detti in precedenza, lo spettro del corpo nero è stato oggetto di studio intensivo tra il XIX e XX secolo.

Un esperimento estremamente semplice consiste nel considerare un corpo C e riscaldarlo fino ad una temperatura nota, misurata tramite un termostato accoppiato con il corpo nero



Il corpo nero: esperimenti e teoria classica

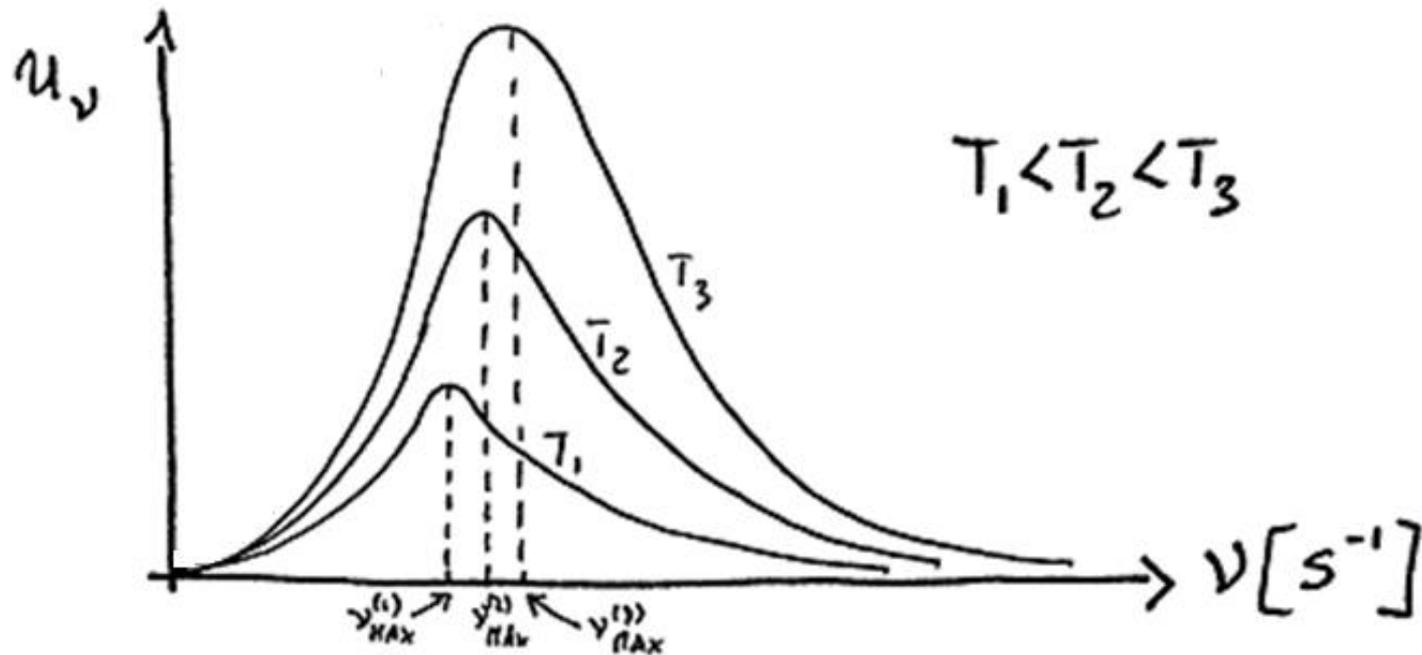
La materia di cui è costituito il corpo nero emette radiazione termica, che rimane intrappolata all'interno della cavità.

Se si pratica un orifizio O , tale radiazione può di conseguenza fuoriuscire dalla cavità, ed essere raccolta e analizzata da un opportuno rivelatore R (intensità e distribuzione spettrale)

A questo punto si può valutare u_ν in relazione alla temperatura T e alla frequenza ν

Da tali analisi è stato possibile ricavare delle leggi fenomenologiche, come la *legge di Stefan*

Il corpo nero: esperimenti e teoria classica



Curve sperimentali

- u_ν presenta un picco che aumenta all'aumentare della temperatura
- Anche ν_{max} aumenta all'aumentare della temperatura

Il corpo nero: esperimenti e teoria classica

legge di Stefan (1879):

l'energia elettromagnetica totale u_{tot} irradiata per unità di tempo dall'unità di area l'area sottesa dalle curve riportate nel grafico precedente

$$u = \int_0^{\infty} u_{\nu} d\nu = \sigma T^4$$

è proporzionale alla quarta potenza della temperatura T del corpo nero:

$$u_{\text{tot}} = \sigma T^4 \quad (8)$$

dove $\sigma = 5.67 \times 10^{-8} \text{ Wm}^{-2}\text{K}^{-4}$ è detta costante di Stefan;

legge di Wien (1893):

la frequenza ν_{max} alla quale si ha il massimo della densità spettrale della radiazione di corpo nero dipende in modo direttamente proporzionale dalla temperatura:

$$\nu_{\text{max}}/T = \text{costante} \quad (9)$$

Il corpo nero: esperimenti e teoria classica

Come venne spiegato tale risultato dalla fisica classica?

Quando la radiazione di corpo nero presente nella cavità è in equilibrio termico con la materia che costituisce le pareti di quest'ultima, deve esserci *corrispondenza tra la distribuzione di energia della radiazione e quella degli atomi che formano il materiale delle pareti.*

Se assumiamo che gli atomi funzionino come degli oscillatori armonici di massa m , frequenza ν e ampiezza di oscillazione R

$$E_{\text{osc.arm.class}} = 2\pi^2 m \nu^2 R^2$$

$$E_{\text{osc.arm.class}} = \frac{1}{2} m \omega^2 R^2$$

$$\nu = \omega / 2 \pi$$

$$\omega = 2 \pi \nu$$

$$E_{\text{osc.arm.class}} = 2 \pi^2 m \nu^2 R^2 \quad (10)$$

Radiazione di corpo nero

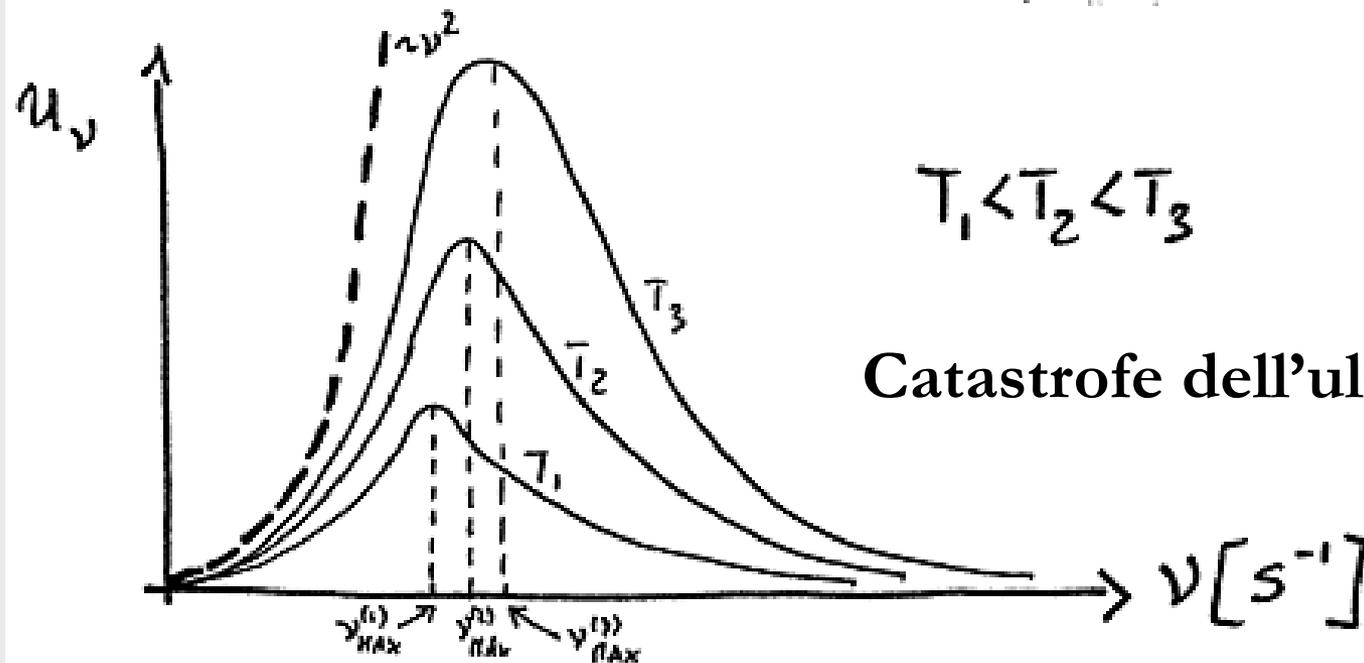
- Distribuzione continua di frequenza

Il corpo nero: esperimenti e teoria classica

Si può dimostrare che, la densità di energia vale:

$$u_\nu = (8\pi/c^3)\nu^2 K_B T \quad (11)$$

Legge di Rayleigh-Jeans



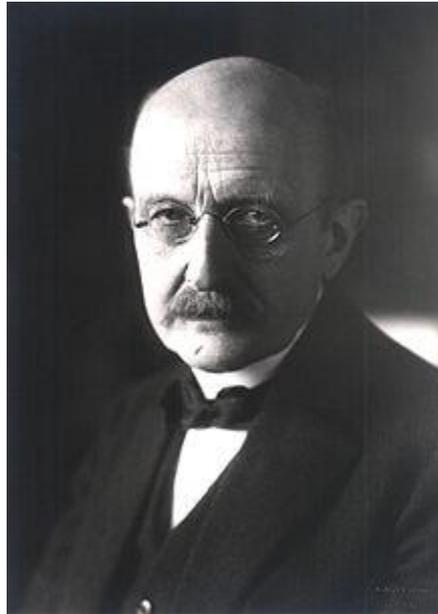
Il corpo nero: esperimenti e teoria classica

- La legge di R-J ha un buon accordo con i dati sperimentali SOLO per basse frequenze
- Non prevede un massimo per u_ν
- Diverge per frequenze elevate
- Contrasta con il principio di conservazione dell'energia
- Non permette di spiegare la Legge di Stefan
- Non consente di giustificare il valore numerico della costante di Stefan σ

La fisica classica non riesce a spiegare lo spettro di radiazione del corpo nero!

Teoria quantistica di Plank

Tale problema venne superato nel 1900, quando uno studioso tedesco fece un'assunzione rivoluzionaria



Max Plank nato a Kiel nel 1858

Fisico tedesco, padre della teoria dei quanti

Premio Nobel per la Fisica nel 1918

Teoria quantistica di Plank

Assunzione di Plank:

Ciascun oscillatore armonico può emettere, e assorbire energia SOLO in quantità proporzionali alla sua frequenza ν

L'energia è quantizzata, ovvero non è più una grandezza continua, ma può assumere solo valori discreti!

$$E_{\text{osc.arm.class.}} = 2\pi^2 m \nu^2 R^2 \quad (10)$$

$$E_{\text{osc.arm.quant.}} = n h \nu \quad (12)$$

n è un numero intero, h una costante da determinare sperimentalmente e ν la frequenza

Teoria quantistica di Plank

Facendo tale assunzione si arriva a dimostrare che la energia di oscillazione vale

$$u_\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{K_B T}\right) - 1} \quad (13)$$

Legge di Plank per il corpo nero

Sperimentalmente si è trovato che

$$h = 6.62 \times 10^{-24} \text{ Js} \quad (14)$$

h costante di Plank

Teoria quantistica di Plank

$$u_\nu = \frac{8\pi h}{c^3} \cdot \frac{\nu^3}{\exp\left(\frac{h\nu}{K_B T}\right) - 1}$$

- limite per frequenze infinite è zero;
- limite per frequenza nulla è zero;
- limite per frequenze piccole è $u_\nu \sim \nu^2$, in accordo con la teoria di Rayleigh–Jeans;
- L'eq.(13) ammette un massimo per una certa frequenza ν^{\max} che dipende linearmente dalla temperatura;
- il grafico dell'eq.(13) per ogni data temperatura è indistinguibile dalle curve sperimentali su tutto lo spettro di frequenze.

Teoria quantistica di Plank

Tale approccio venne utilizzato anche da Albert Einstein per risolvere il problema del calore specifico dei solidi visto in precedenza.

Se si considerano gli N atomi all'interno di un reticolo cristallino come degli oscillatori armonici quantizzati

$$U = 3N \cdot \frac{h\nu}{\exp\left(\frac{h\nu}{K_B T}\right) - 1} \quad (15)$$

Ricordiamo che se non vi è variazione di volume, il lavoro svolto W è nullo, per cui possiamo scrivere:

$$C_V = \Delta U / \Delta T$$

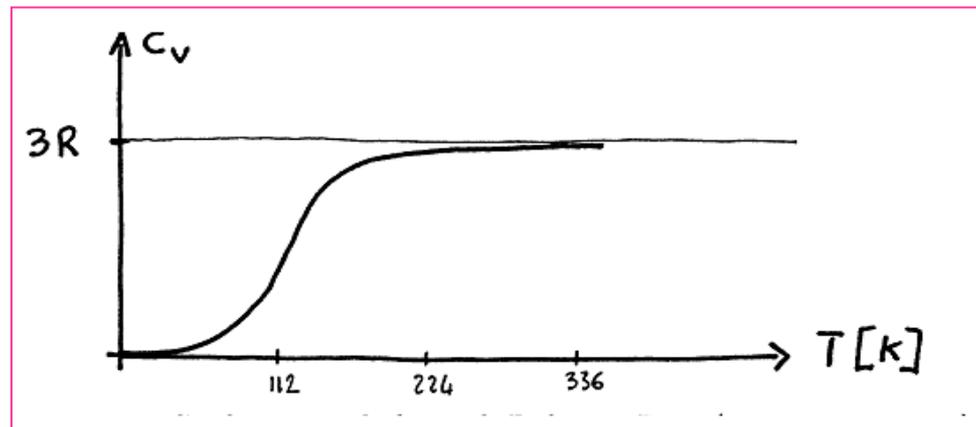
Derivata di U rispetto a T , da cui.....

Teoria quantistica di Plank

$$C_V = \frac{dU}{dT} = 3R \cdot \left[\frac{\frac{h\nu}{K_B T}}{\exp\left(\frac{h\nu}{K_B T}\right) - 1} \right]^2 \exp\left(\frac{h\nu}{K_B T}\right) \quad (16)$$

N.B. Abbiamo considerato una mole $N=N_A$ ($K_B=R/N_A$)

- il limite per temperatura nulla è zero
- il limite per temperatura infinita è $3R$



Teoria quantistica di Plank

Le leggi della fisica classica non sono in grado di descrivere ciò che avviene nel mondo microscopico

Il concetto di quantizzazione, è fondamentale per descrivere tutti quei fenomeni che avvengono su scala atomica

Dalla fisica classica alla meccanica quantistica

Teoria quantistica di Plank

Le leggi della fisica classica non sono in grado di descrivere ciò che avviene nel mondo microscopico

Il concetto di quantizzazione, è fondamentale per descrivere tutti quei fenomeni che avvengono su scala atomica

Dalla fisica classica alla meccanica quantistica

Cos'è un atomo? Evoluzione storica

Cos'è un atomo? Evoluzione storica

Il concetto di atomo risale agli antichi Greci

Solo alla fine dell'800 furono formulati dei modelli della struttura degli atomi.



Nel 1808 John Dalton (Eaglesfield, 1766 – Manchester, 1844) l'atomo è visto come una particella indivisibile (qui rappresentata come una sfera)

Cos'è un atomo? Evoluzione storica

Numerose evidenze sperimentali (Faraday, Thompson) dimostrarono che:

-l'atomo non è una porzione continua di materiale ma è composto a sua volta di altre particelle (però non è divisibile a meno di non somministrargli un'energia sufficiente)

-Le particelle che compongono l'atomo sono elettricamente cariche

-Le cariche positive sono riunite al centro in una struttura detta NUCLEO

-La carica negativa ruota continuamente intorno al nucleo

Cos'è un atomo? Evoluzione storica

Verso la fine del XIX secolo (precisamente nel 1897), il fisico britannico **J.J. Thomson** (Cheetham, 1856 – Cambridge, 1940), studiando il passaggio della corrente elettrica nei gas rarefatti (utilizzando *tubi di Crookes*), dimostra che:

[..\Esperimento di Thompson.mp4](#)

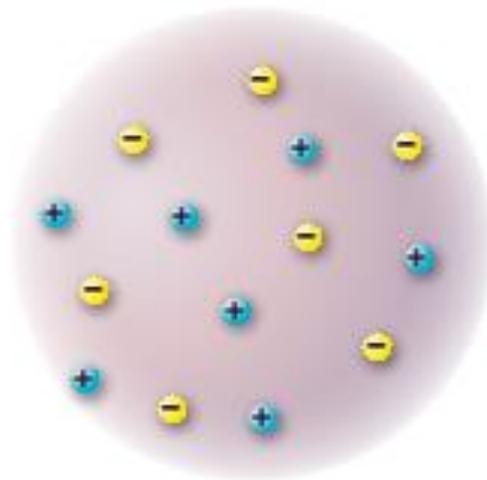
I raggi emessi dal catodo (raggi catodici) sono particelle di carica negativa.

Gli atomi si comportano come particelle neutre!

La presenza di particelle dotate di carica negativa può essere spiegata solamente ipotizzando che esistano nell'atomo anche particelle positive.

Modello «a panettone» di Thomson

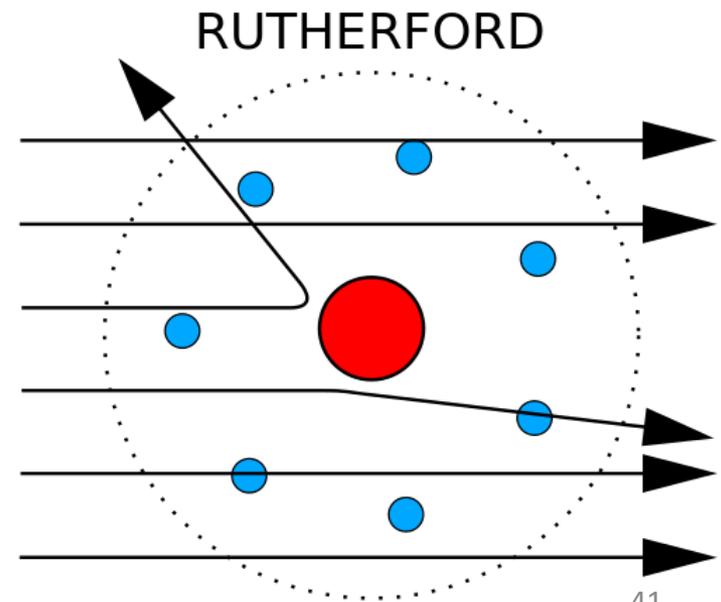
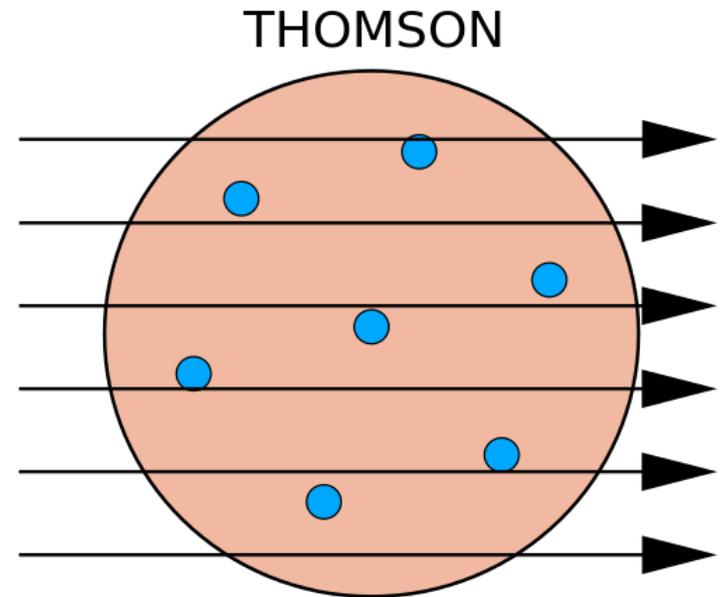
Thomson propone perciò un modello di atomo che prevede **un'omogenea distribuzione di particelle positive e negative**, parse come le uvette e i canditi nel panettone (modello atomico “**a panettone**” o “plum pudding model”, visto che il dolce natalizio inglese con le uvette è il pudding e non il nostro panettone).



Esperimento di Rutherford

Esperimento di diffusione di un fascio di particelle α attraverso una sottile lamina metallica.

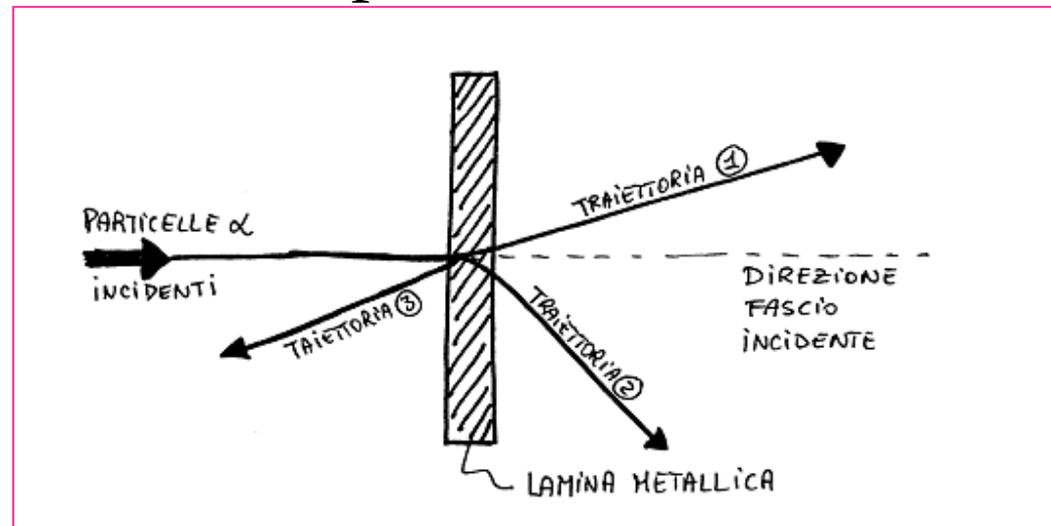
Se fosse valido il modello “uvetta nel panettone” le particelle α , cariche positivamente e pesanti, dovrebbero subire delle deflessioni molto piccole, attraversando sostanzialmente indisturbati la lamina.



Esperimento di Rutherford

Esperimento di diffusione di un fascio di particelle α attraverso una sottile lamina metallica.

L'analisi delle traiettorie delle particelle diffuse dimostrava che si davano tre casi possibili:



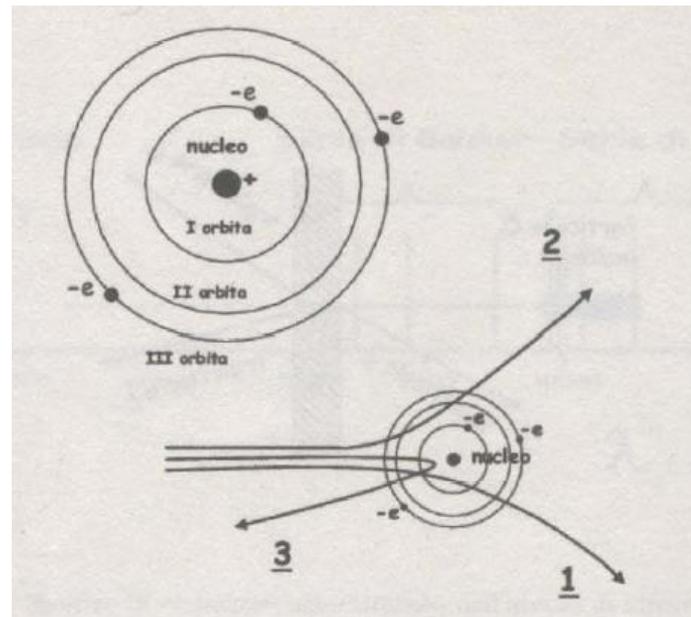
- alcune particelle vengono solo leggermente deviate durante l'attraversamento della lamina
- altre particelle vengono deviate fortemente
- infine alcune particelle venivano addirittura retrodiffuse

Esperimento di Rutherford

Conclusione:

gli atomi devono avere una struttura costituita da **nuclei carichi positivamente** (visto che sono in grado di respingere le cariche positive delle particelle alfa)

di massa relativamente grande e molto concentrata, circondati da carica negativa dispersa, con molto spazio vuoto.



Gli spettri atomici

Gli spettri atomici

Lo studio dello spettro caratteristico di un corpo è oggetto di una branca della fisica detta **spettroscopia**;

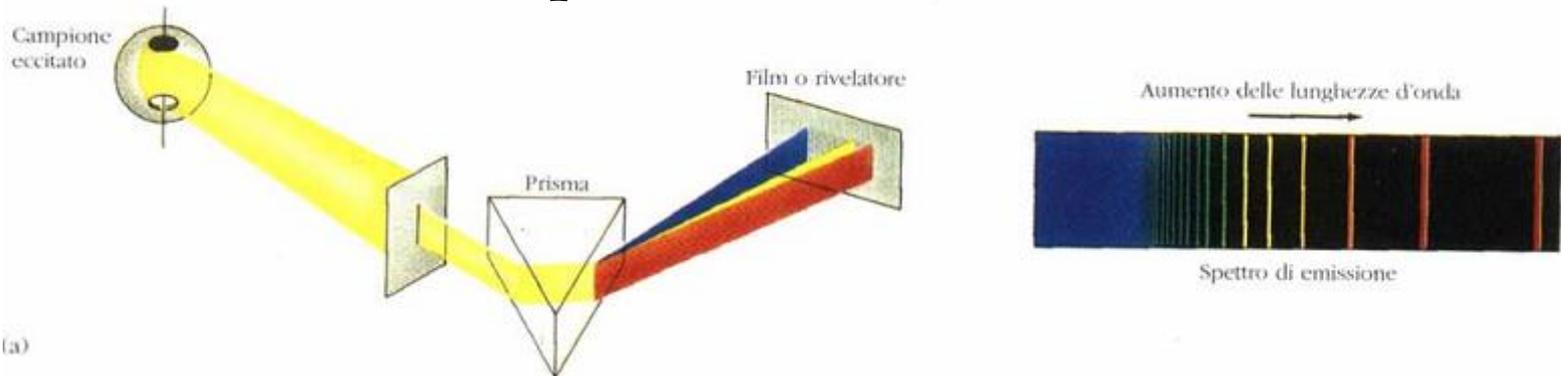
Prendiamo in considerazione il caso più semplice ed immediato da analizzare, ovvero quello **dell'atomo di idrogeno**.

Uno spettro di emissione (detto anche *spettro atomico*) si ottiene proiettando la radiazione emessa da un campione eccitato (per esempio tramite riscaldamento) in un prisma.

Gli spettri atomici

La luce passando attraverso un prisma (più realisticamente ad un insieme di prismi) si decompone nelle sue componenti.

Si ottiene il cosiddetto **Spettro di Emissione**



- *La radiazione emessa da un atomo possiede solamente alcune lunghezze d'onda determinate*
- *Lo spettro di emissione è discreto*

Tali lunghezze d'onda si raggruppano inoltre in sequenze di righe (Serie di Rydberg)

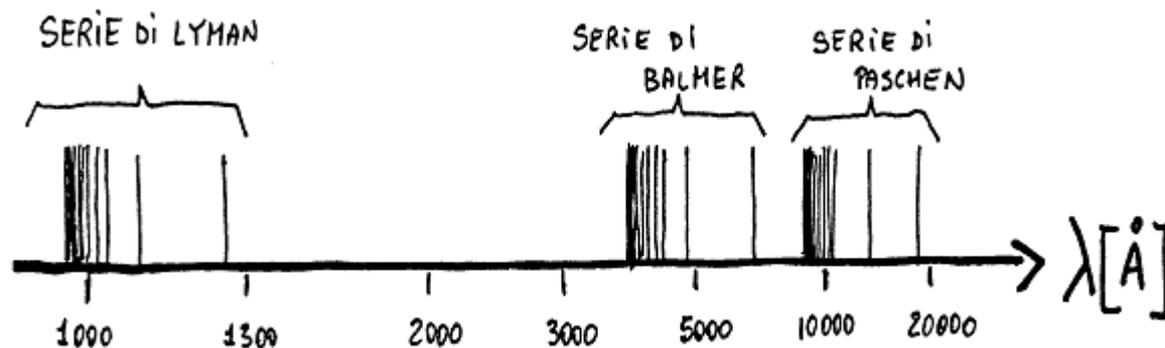
$$\frac{1}{\lambda} = \mathcal{R} \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

Gli spettri atomici

R è la costante di Rydberg e vale 109677 cm^{-1}

I numeri n_1 ed n_2 sono numeri interi positivi che individuano le diverse serie secondo le seguenti relazioni:

- $n_1 = 1$ e $n_2 = 2, 3, 4, \dots$ serie di Lyman
- $n_1 = 2$ e $n_2 = 3, 4, 5, \dots$ serie di Balmer
- $n_1 = 3$ e $n_2 = 4, 5, 6, \dots$ serie di Paschen
- $n_1 = 4$ e $n_2 = 5, 6, 7, \dots$ serie di Brackett
- $n_1 = 5$ e $n_2 = 6, 7, 8, \dots$ serie di Pfund



Il modello energetico dell'atomo

Se si prende in considerazione il modello di Rutherford, l'interpretazione degli spettri passa dalla radiazione emessa dagli elettroni che orbitano attorno al nucleo, e soggetti alla forza di attrazione coulombiana

$$F = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (18)$$

dove abbiamo indicato con $e = 1.6 \times 10^{-19}$ C la carica elettrica (positiva) del protone formante il nucleo e dell'elettrone (negativa); r indica il raggio dell'orbita circolare percorsa

Il modello energetico dell'atomo

Si sa che $r=0.529 \text{ \AA} = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$, allora ne segue che i moduli della velocità di rotazione v e della corrispondente accelerazione a valgono rispettivamente:

$$v = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m r}} = 2.19 \times 10^6 \text{ m/s} \quad (19)$$

$$a = \frac{v^2}{r} = 9.02 \times 10^{22} \text{ m/s}^2 \quad (20)$$

$m = 9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$ è la massa dell'elettrone

La potenza irradiata da una particella e che si muove con accelerazione a è (Legge di Larmor):

$$P = \frac{e^2 a^2}{6\pi\epsilon_0 c^3} = 4.72 \times 10^{11} \text{ eV/s} \quad (21)$$

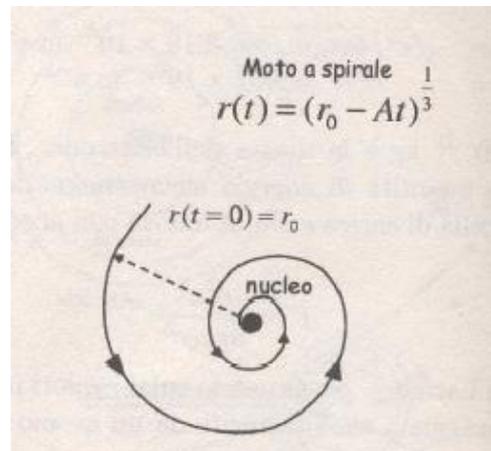
Il modello energetico dell'atomo

L'energia di ionizzazione, ovvero l'energia necessaria per strappare un elettrone da un atomo e portarlo a distanza infinita vale, per l'atomo di idrogeno 13.6 eV.

Questa energia rappresenta la l'energia immagazzinata sotto forma di interazione elettrostatica da un atomo di idrogeno nel suo stato fondamentale.

Se venisse dissipata secondo la legge (21) un atomo dovrebbe **implodere in se stesso dopo circa 10^{-11} s**

Un elettrone che irraggia perde energia, riduce il suo raggio orbitale seguendo un moto a spirale



Il modello energetico dell'atomo

Durante questo moto, il suo raggio $r(t)$ varia nel tempo con continuità secondo una legge del tipo:

$$r(t) = (r_0 - At)^{1/3}$$

con r_0 pari al valore iniziale della distanza elettrone-nucleo e A costante opportuna.

Durante questo moto di rivoluzione, l'elettrone dovrebbe emettere radiazione elettromagnetica con frequenza variabile con continuità.

In altre parole, classicamente:

- **gli spettri dovrebbero essere continui**
- **e la materia non dovrebbe esistere!!!**

Il modello di Bohr

Il modello energetico dell'atomo: Bohr

Niels Bohr, nel 1913 fece la seguente serie di ipotesi:

- l'elettrone ruota su orbite circolari intorno al nucleo e possiede un'energia il cui valore può solo appartenere ad un insieme discreto di valori possibili
- Ogni stato energetico si distingue per il valore del **momento angolare dell'elettrone** che è pari al multiplo intero di una quantità base, chiamata \hbar (costante di Plank, $= h/2\pi$ con $h = 6.6 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$) $= n \hbar$
- Ogni variazione energetica dell'elettrone può avvenire solo per il passaggio da uno stato con un certo n ad un altro con m diverso da n .

Il modello energetico dell'atomo: Bohr

In sostanza, sono permesse solo transizioni tra stati caratterizzati da n intero.

Perciò, ad esempio, l'elettrone può cambiare orbita solo se riceve energia pari almeno alla differenza tra due stati permessi.

PRIMO POSTULATO: L'elettrone percorre solo quelle orbite per le quali il momento angolare $\mathbf{l} = \mathbf{r} \times m_e \mathbf{v}$ ha modulo dato da un multiplo intero della grandezza $h/2\pi$

$$l = m_e v r = n \frac{h}{2\pi} = n\hbar \quad (22)$$

$n \rightarrow$ numero quantico

Il modello energetico dell'atomo: Bohr

L'elettrone si muove su tali orbite non irraggia

Le orbite sono stazionarie **stati energetici stazionari**

Deve esistere un perfetto bilanciamento, equilibrio, delle due forze, centrifuga e coulombiana

$$\frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} \quad (23)$$

$$v = n \frac{h}{2\pi r m_e}$$

$$r = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} n^2 = a_0 n^2 \quad (24)$$

$$a_0 = \frac{h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2} = 0.529 \text{ \AA}$$

Raggio di Bohr

in accordo con i dati
sperimentali

Il modello energetico dell'atomo: Bohr

Le orbite elettroniche sono effettivamente quantizzate per ciò che concerne il raggio.

a_0 raggio fondamentale a cui corrisponde lo stato energetico fondamentale.

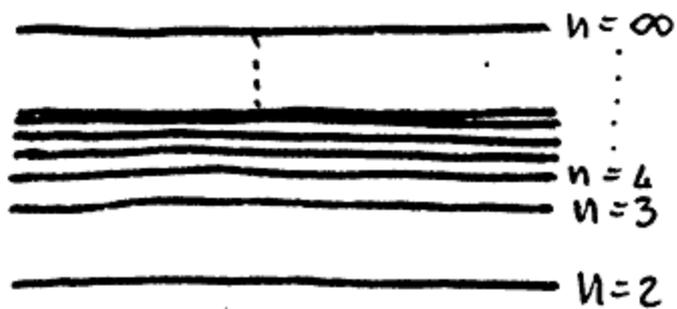
L'energia totale è data dalla somma dell'energia cinetica e di quella potenziale (*negativa, nucleo e elettrone segno opposto*):

$$E_T = E_{cin} + E_{pot} = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (25)$$

$$E_T = -\frac{m_e e^4}{8\epsilon_0^2 h^2} \frac{1}{n^2} = -13.6 eV \frac{1}{n^2} \quad (26)$$

Anche le energie degli stati stazionari sono distribuite discretamente → quantizzate

Il modello energetico dell'atomo: Bohr



$$E_{\infty} = 0$$

$$E_4 = E_1/16$$

$$E_3 = E_1/9$$

$$E_2 = E_1/4$$

STATO SLEGATO

STATI ECCITATI

$$n=1$$

$$E_1 = -13/6 \text{ eV}$$

STATO FONDAMENTALE

Il modello energetico dell'atomo: Bohr

SECONDO POSTULATO: La radiazione elettromagnetica viene emessa o assorbita SOLO quando l'elettrone compie una transizione da uno stato energetico ad un altro.

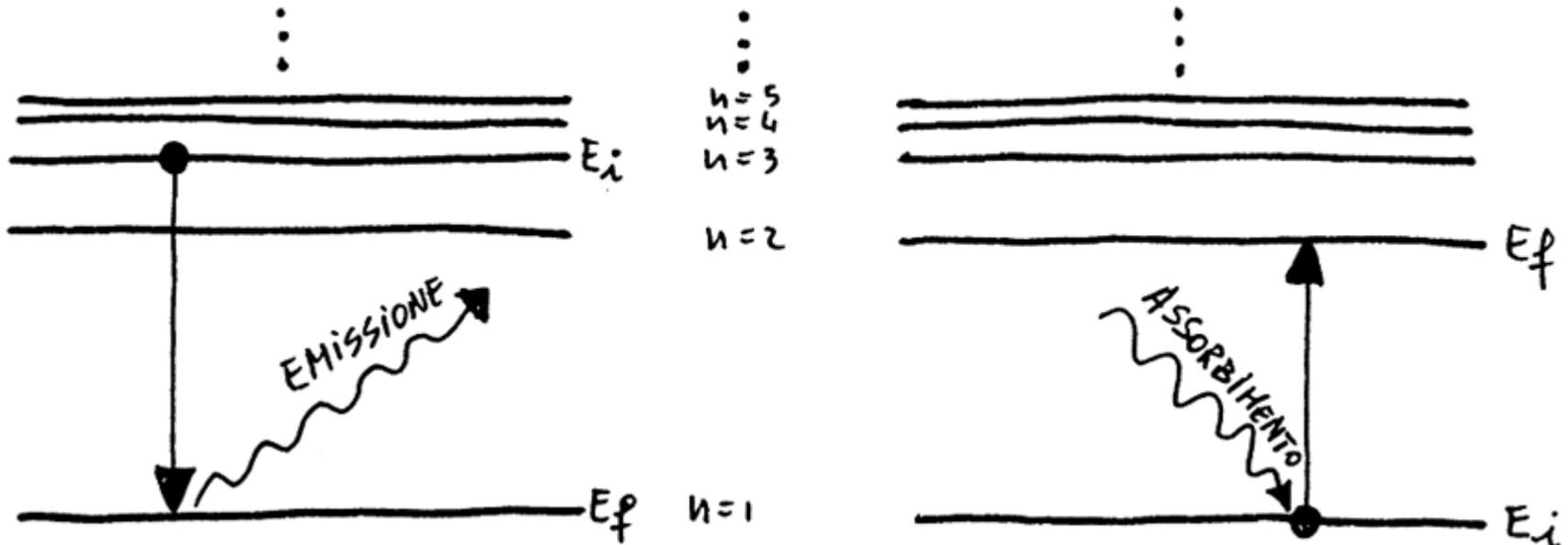
La frequenza ν dipende dalle energie dei due stati tra i quali avviene la transizione:

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (27)$$

$E_i > E_f$ emissione di radiazione

$E_i < E_f$ assorbimento di radiazione

Il modello energetico dell'atomo: Bohr



Il modello energetico dell'atomo: Bohr

Come calcolo la lunghezza d'onda dei fotoni emessi/assorbiti?

Dipenderà anch'essa dall'energia associata agli stati coinvolti nella transizione

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{E_i - E_f}{ch} \quad (28)$$

$$E_i = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^4} \frac{1}{n_i^2}$$

$$E_f = -\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^4} \frac{1}{n_f^2}$$

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^3 c} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (29)$$

Il modello energetico dell'atomo: Bohr

$$\frac{m_e e^4}{8\varepsilon_0 h^3 c} = 109737 \text{ cm}^{-1}$$

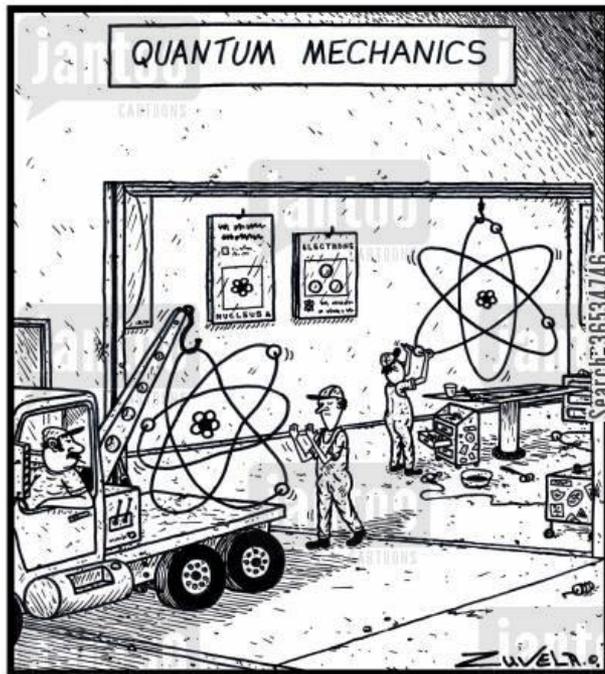
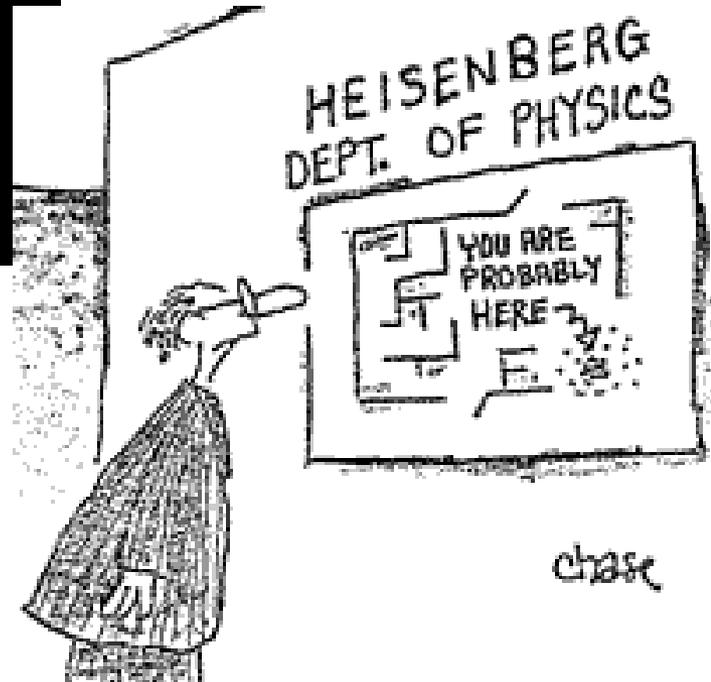
- Il modello di Bohr fornisce una validazione della legge empirica di Rydeberg
- La costante di Rydeberg è in ottimo accordo con quanto calcolato utilizzando l'approccio di Bohr

La Fisica classica non è in grado di giustificare alcune evidenze sperimentali che hanno a che fare con il mondo microscopico:

- Calore specifico dei solidi
- Radiazione del corpo nero
- Modello dell'atomo di idrogeno

Occorre introdurre dei nuovi concetti e fare delle nuove ipotesi:

Meccanica quantistica



Il dualismo onda corpuscolo

Di cosa è fatta la luce?

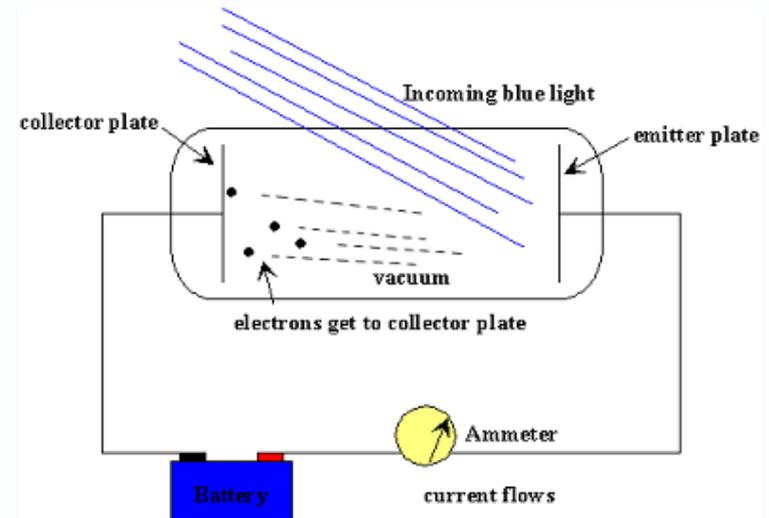
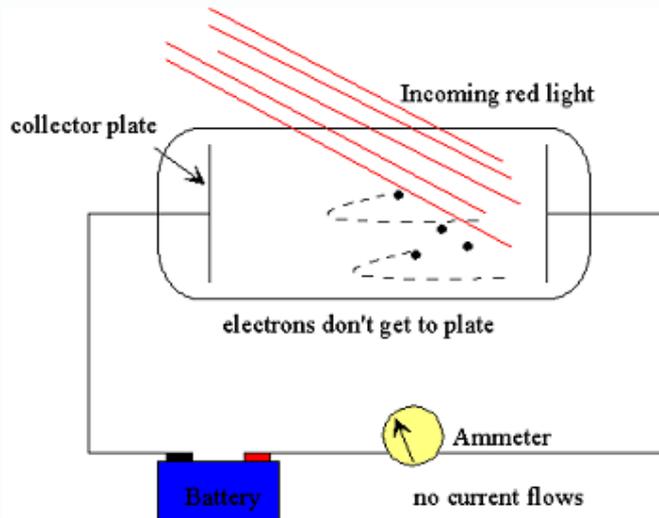


Una volta per tutte voglio sapere per cosa sto pagando!! Solo quando la compagnia elettrica mi dirà se è luce o particelle staccherò l'assegno!

Il dualismo onda-corpuscolo

Effetto Fotoelettrico

Di cosa è fatta la luce?



Supponiamo di avere un tubo **sotto vuoto**, all'interno del quale sono presenti **due elettrodi**

Tali elettrodi sono collegati ad un **generatore di tensione**, e in serie è presente un **amperometro** per misurare la corrente che scorre nel circuito

Il dualismo onda-corpuscolo

Se il metallo viene sottoposto a **radiazione elettromagnetica** **gli elettroni** possono acquistare un'energia cinetica sufficientemente alta da permettere di superare il potenziale di richiamo del metallo e quindi di **”saltare” fuori**.

Se questo avviene è possibile che nel circuito scorra una corrente misurabile → Effetto fotoelettrico

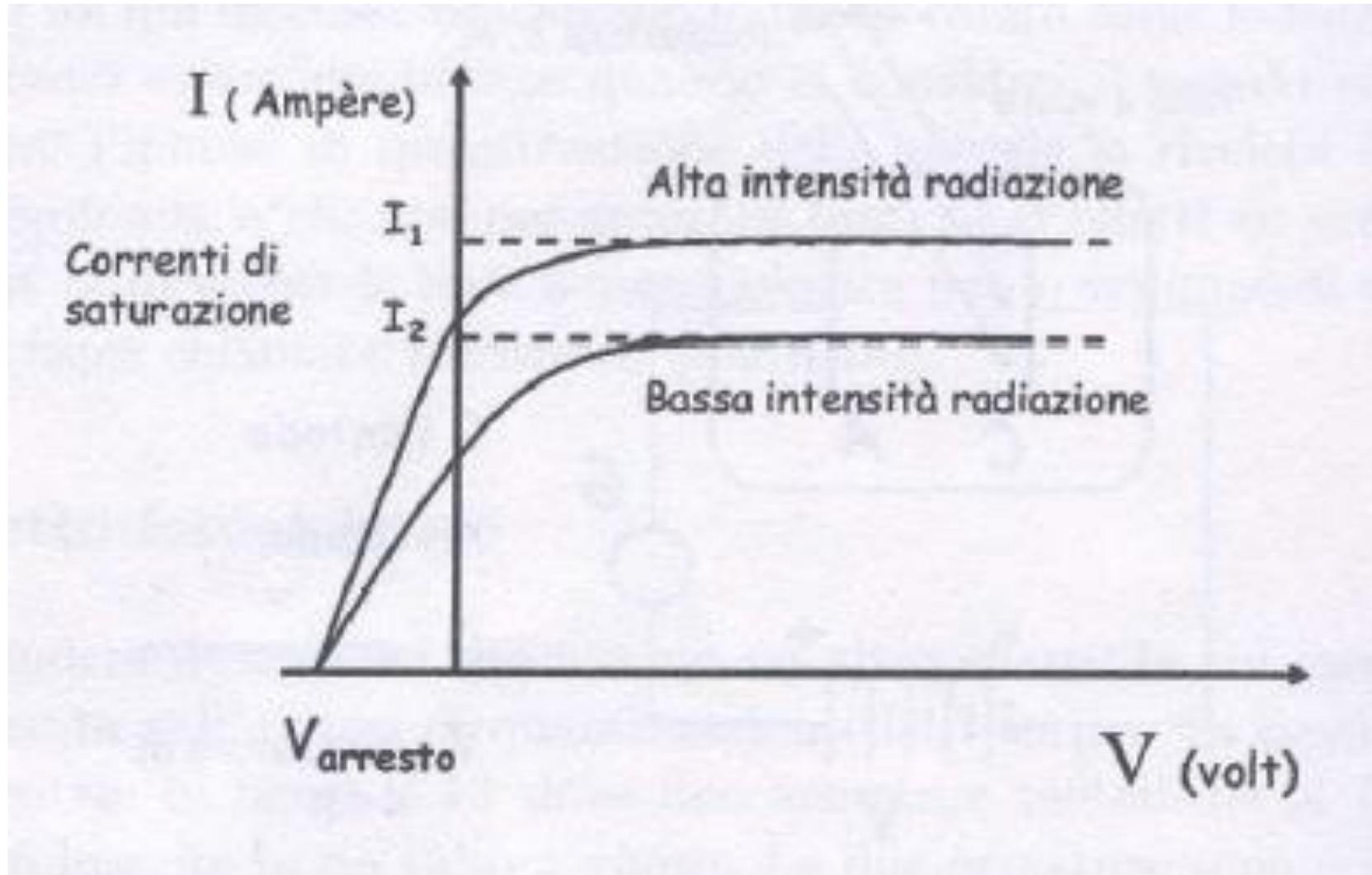
Il dualismo onda-corpuscolo

Come si trasmette l'energia dalla luce agli elettroni?

Secondo l'ottica classica, l'onda porta energia in modo continuo, quindi gli elettroni potrebbero accumulare energia fino ad averne abbastanza da poter uscire dal metallo.

Tale effetto è stato osservato **solo se a radiazione incidente ha una determinata frequenza**, ed in particolare, non è mai stato osservato per frequenze inferiori all'ultravioletto (perché?)

Il dualismo onda-corpuscolo



Il dualismo onda-corpuscolo

Punti chiave:

1. Si misura una corrente se e solo se la radiazione ha una certa frequenza (o colore, ultravioletto per i metalli), qualunque sia l'intensità radiazione incidente
➔ la realizzazione del fenomeno dipende dalla frequenza e non dall'intensità della radiazione)
2. Fissata la frequenza opportuna, il fenomeno dipende anche dall'intensità (grafico precedente)
3. Per $V = 0$, si ha I diverso da 0
4. I satura ad un valore massimo che non aumenta nemmeno aumentando V
5. $I = 0$ per V negativo

Il dualismo onda-corpuscolo

Interpretazione di Einstein nel 1905

L'interazione con la radiazione incidente crea **cariche libere negative nel catodo, elettroni**.

Tali cariche vengono **raccolte dall'anodo** generando una corrente misurabile

La radiazione elettromagnetica incidente ha quindi, sotto opportune condizioni, la capacità di strappare elettroni al metallo!

Il quanto di luce incidente, fotone, trasferisce la sua energia cinetica agli atomi del metallo!

Il dualismo onda-corpuscolo

Einstein assume che la radiazione elettromagnetica abbia un comportamento corpuscolare

La luce è un'onda per quanto riguarda le modalità di propagazione, riflessione, rifrazione e interferenza

Ma

Agisce come un flusso di corpuscoli (i fotoni) quando interagisce con gli elettroni del metallo

Fotoni pacchetti di luce di energia associata

$$E_{\text{fot}} = h\nu \quad (30)$$

Il dualismo onda-corpuscolo

Il fotone incidente interagisce con gli elettroni del metallo, trasferendo loro la sua energia

Se l'energia trasferita supera il lavoro di estrazione del metallo è possibile che l'elettrone fuoriesca dal metallo

Lavoro di estrazione di un metallo W è la minima energia necessaria per rompere il legame tra elettrone e metallo

$$E_{\text{cin}} = h\nu - W \quad (31)$$

$$h\nu > W \quad (32)$$

$$\nu_0 = W/h \quad (33)$$

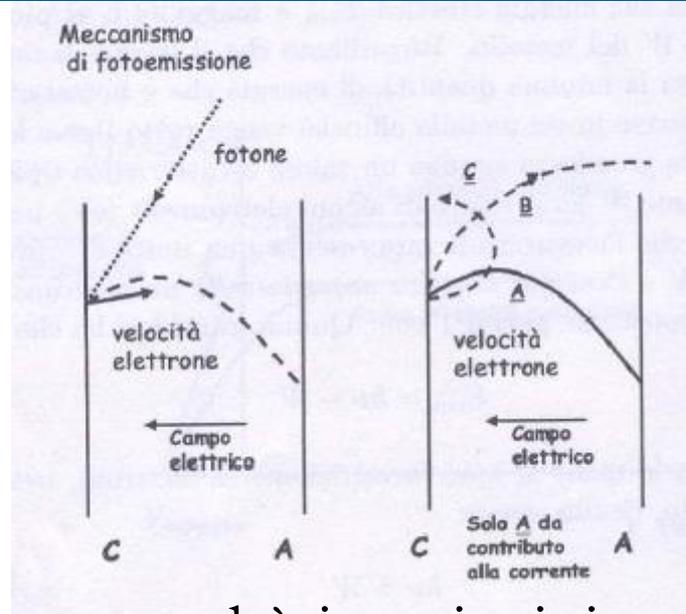
Il dualismo onda-corpuscolo

Questo spiega perché l'andamento della corrente dipende dalla frequenza e perché il fenomeno nei metalli non sia osservabile per frequenze inferiori all'ultravioletto (punto 1)

Aumentare l'intensità della radiazione incidente corrisponde ad aumentare il numero di fotoni incidenti (non la loro energia), e di conseguenza, il numero di elettroni strappati al metallo

Per questo motivo, fissata una frequenza, la corrente dipende dall'intensità della radiazione incidente (punto 2)

Il dualismo onda-corpuscolo



La corrente satura perchè in principio non tutti gli elettroni hanno la traiettoria “giusta” per andare dal catodo all’anodo. Ma **aumentando V** , aumenta la componente orizzontale della velocità, perciò **prima o poi tutti finiscono sull’anodo** e in queste condizioni la corrente è massima.

Invertendo il segno di V , si favorisce una componente orizzontale della velocità diretta verso sinistra, prima o poi la corrente si annulla

Il dualismo onda-corpuscolo

L. De Broglie nel 1924 estese il concetto a tutte le particelle materiali

Se la luce può manifestarsi come un corpuscolo, allora qualsiasi particella può avere un comportamento ondulatorio

Immaginiamo una particella che ha momento p , la sua lunghezza d'onda sarà data da:

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (34)$$

A cui corrisponde una frequenza

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (35)$$

Il dualismo onda-corpuscolo

L'ipotesi di De Broglie è rivoluzionaria: qualsiasi ente materiale possiede un'onda associata.

Dando un'occhiata alla formula, e osservando che h ha un valore bassissimo, è facile prevedere che l'onda associata assume valori considerevoli solo per particelle del mondo microscopico.

Ad esempio, per un elettrone accelerato all'interno di un tubo catodico di una TV ($V = 10^4\text{V}$) che viaggia ad una velocità prossima a quella della luce ha una quantità di moto associata p

$$E_k = \frac{p^2}{2m_e} \Rightarrow p = \sqrt{2m_e eV} \quad (37)$$

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}} \quad \text{Lunghezza d'onda di De Broglie} \quad (38)$$

Il dualismo onda-corpuscolo

Facendo due conti, la lunghezza d'onda è pari a

$$\lambda = 1,23 \cdot 10^{-11} \text{ m.}$$

Questo giustifica il fatto che per gli oggetti macroscopici, l'aspetto ondulatorio non sia mai percepibile

Proviamo a valutare la lunghezza d'onda di una mela di massa $m = 0.2 \text{ kg}$ che viene lanciata ad una velocità di 5 m/s

Dalla relazione di de Broglie si ottiene:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{6.63 \cdot 10^{-34} \text{ Js}}{0.2 \text{ kg} \cdot 5 \text{ m/s}} = 6.63 \cdot 10^{-34} \text{ m}$$

Il dualismo onda-corpuscolo

La lunghezza d'onda dipende dalla tensione applicata (microscopia elettronica a scansione)

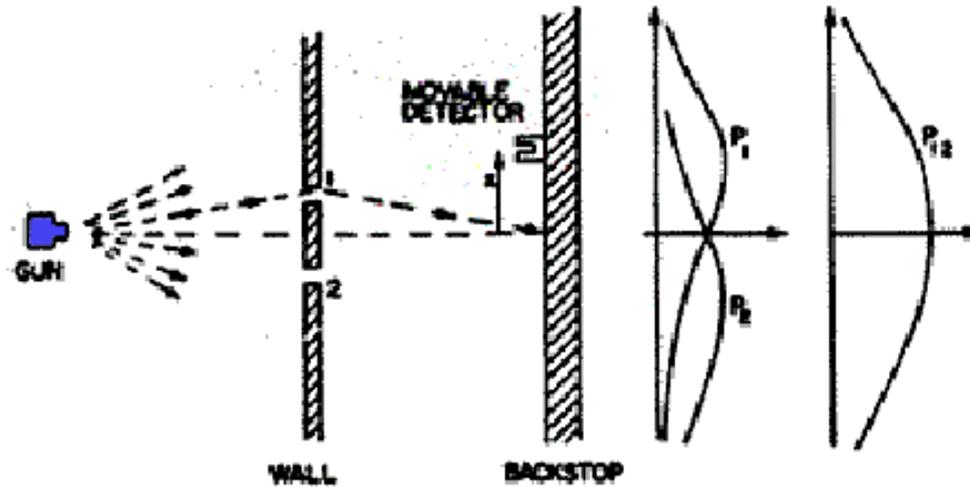
$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} = \frac{h}{\sqrt{2m_e eV}}$$
$$\frac{6.63 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 1.6 \cdot 10^{-19} \cdot 9.1 \cdot 10^{-31} \cdot V}} = \frac{1.23 \cdot 10^{-9}}{\sqrt{V}} m$$

Se la differenza di potenziale applicata è pari a 10^5 V, di conseguenza otteniamo che

$$\lambda = 3.8 \cdot 10^{-12} m$$

Lunghezza d'onda della luce in un microscopio ottico varia tra $4 \cdot 10^{-7}$ a $8 \cdot 10^{-7} m$

Il dualismo onda-corpuscolo

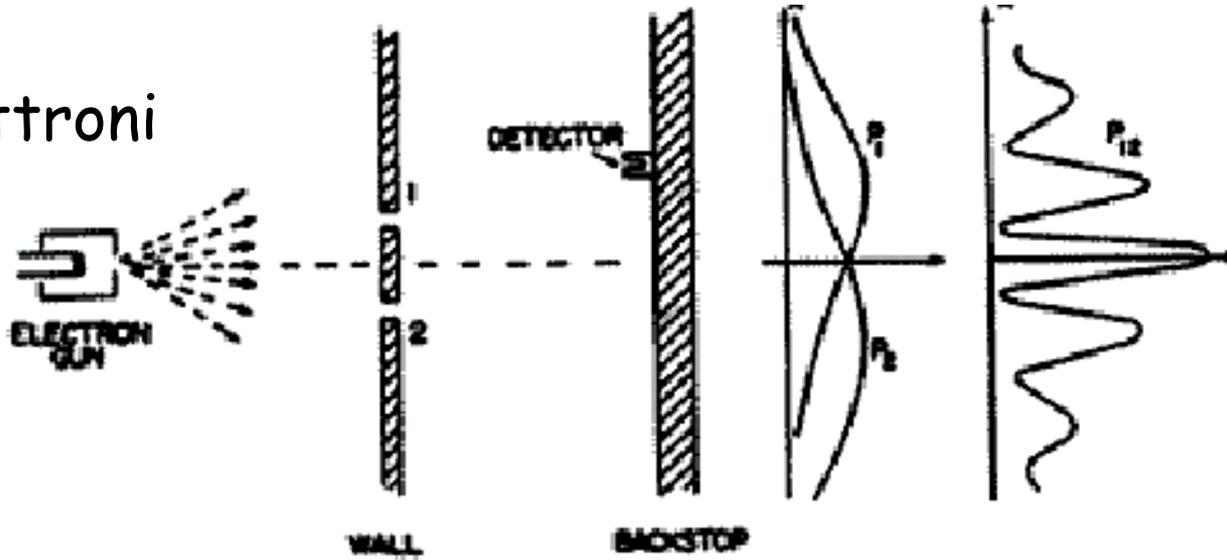


Per gli oggetti classici la probabilità di passaggio attraverso le due fenditure è eguale alla somma delle probabilità di passaggio attraverso ciascuna delle due.



Il dualismo onda-corpuscolo

elettroni



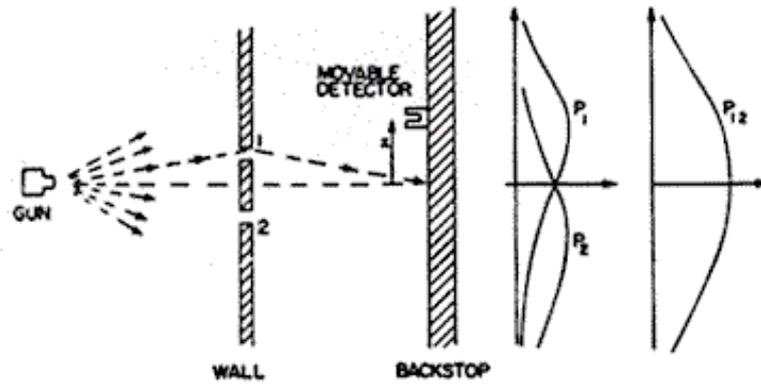
Se una delle due fenditure è chiusa la distribuzione è come per i proiettili.

Ma se entrambe le fenditure sono aperte. . .

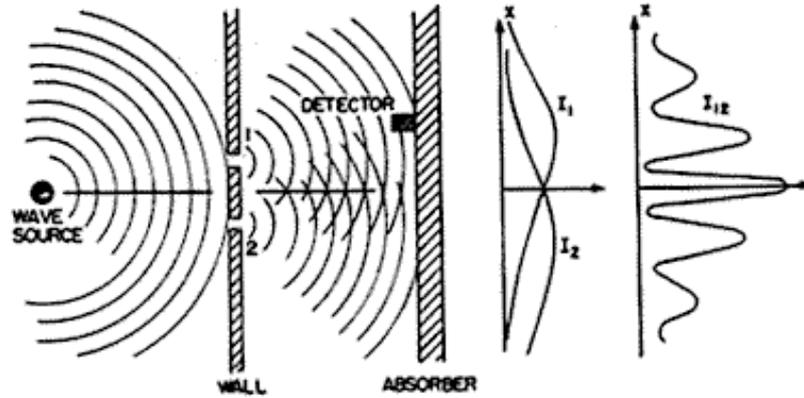
si ottiene una figura d'interferenza come per un'onda!

La figura di interferenza si ottiene anche con un singolo elettrone!

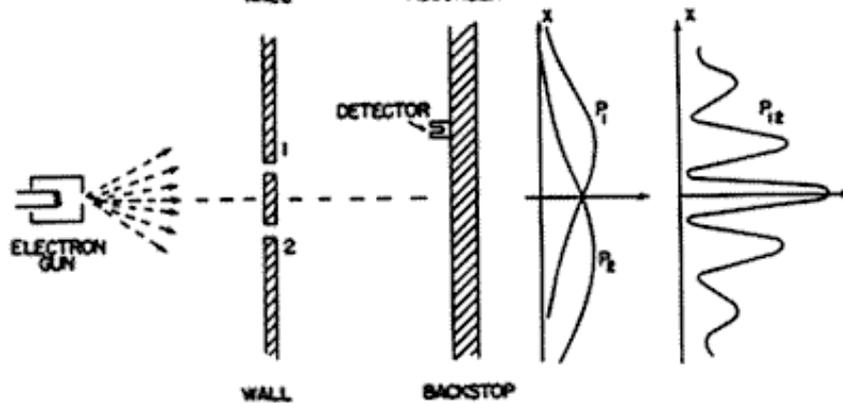
Il dualismo onda-corpuscolo: Davisson e Germer



Particelle “classiche”

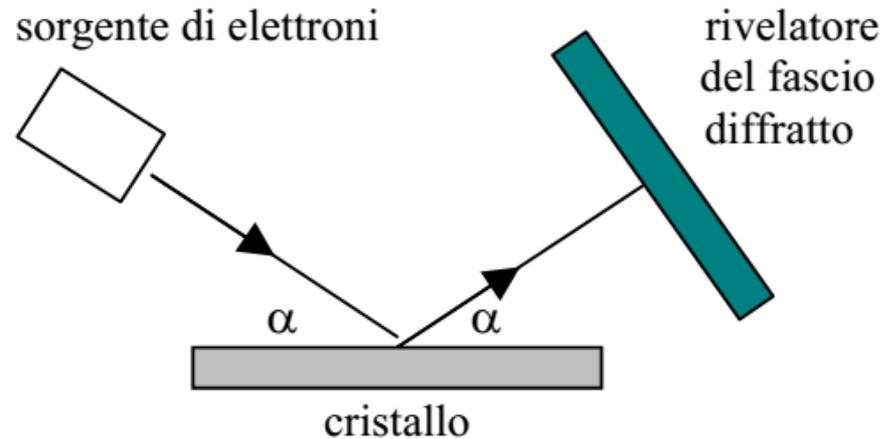


Onde



Particelle “quantistiche”

Il dualismo onda-corpuscolo: Davisson e Germer



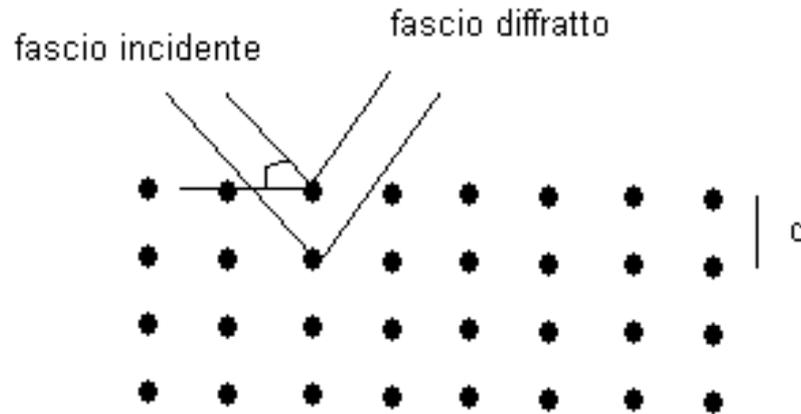
Anche in questo caso, nel rivelatore vengono osservate delle figure di diffrazione

Il fascio diffratto presentava una serie di massimi di intensità quando fosse verificata la seguente relazione tra la lunghezza d'onda di De Broglie λ degli elettroni e la separazione d tra i diversi piani reticolari del cristallo:

$$2d\sin\alpha = n\lambda \quad \text{condizione di Bragg} \quad (36)$$

dove α è l'angolo formato dal fascio di elettroni e la superficie del cristallo, mentre n è un numero intero.

Il dualismo onda-corpuscolo: Davisson e Germer



Consideriamo un fascio di particelle che, riflesse dai diversi piani reticolari, finiscono col creare un fenomeno di interferenza sul rivelatore.

Come noto dall'ottica, quando **due fasci luminosi emessi da due sorgenti coerenti** (cioè a differenza di fase costante e stessa lunghezza d'onda) compiono, per arrivare a un rivelatore, dei **cammini ottici che differiscono per un numero intero di lunghezze d'onda**, allora si manifesta il fenomeno di **interferenza costruttiva**.

Sul rivelatore, cioè, si osservano dei **massimi di diffrazione**. 83

Il dualismo onda-corpuscolo: Davisson e Germer

La condizione di massimo fascio diffratto osservata nell'esperimento di Davisson e Germer corrisponde proprio a quella di interferenza costruttiva nota in ottica (condizione di Bragg).

In altre parole, l'esperimento in questione dimostra che **un fascio di particelle (elettroni) si comporta esattamente come un'onda luminosa, di lunghezza d'onda λ data dalla relazione di De Broglie.**

Il dualismo onda-corpuscolo

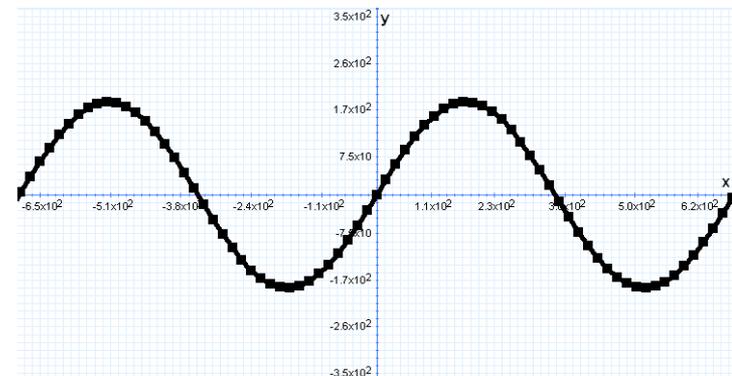
Che tipo di onda rappresenta una determinata particella?

Consideriamo una particella libera, ad essa può essere associata un'onda piana di tipo armonico, che ha ampiezza costante.

Se la particella è libera non esistono potenziali in grado di distorcere l'onda associata.

Conosco la sua lunghezza d'onda, ma no la sua posizione

$$\psi(\mathbf{x}, t) = \sin(\mathbf{kx} - \omega t)$$



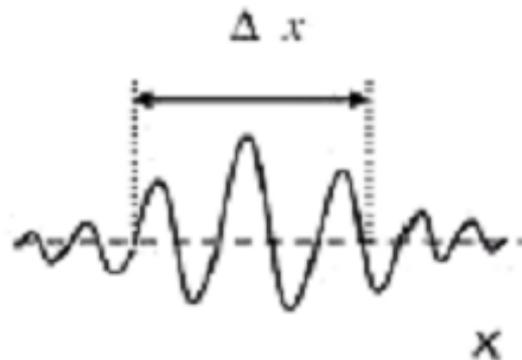
Il dualismo onda-corpuscolo

Se la particella non è libera, ma per esempio **confinata** in una regione di spazio Δx il tutto cambia.

L'ampiezza dell'onda non potrà essere costante!

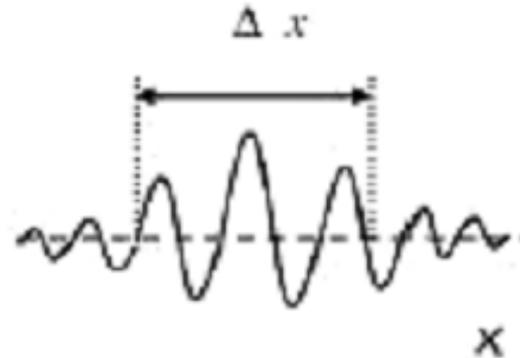
E la sua intensità (legata al quadrato dell'ampiezza)

- sarà massimo all'interno della regione di confinamento
- trascurabile al di fuori della regione di confinamento e non nulla al suo interno



Se la particella è confinata, conosco meglio la sua posizione, ma peggio la sua lunghezza d'onda, ovvero il suo momento!

Il dualismo onda-corpuscolo



Come posso ottenere questo?

Immaginiamo di avere più onde con differenti lunghezze d'onda, queste si combineranno per dare interferenza costruttiva e distruttiva.

In sostanza otteniamo dei **pacchetti d'onde** come quelli riportati in figura.

Ovvero regioni in cui l'onda si sovrappone costruttivamente e regioni in cui l'interferenza è distruttiva.

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Per diminuire Δx , ovvero, per avere maggior localizzazione, devo considerare un maggior numero di lunghezze d'onda \rightarrow momenti differenti!

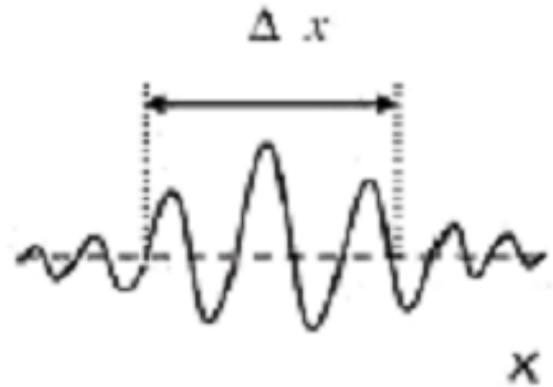
Una particella più è localizzata, maggiore è la probabilità che la sua onda sia caratterizzata da differenti lunghezze d'onda.

In altre parole, è maggiore la probabilità che ad essa siano associati differenti valori di p

Questo risulta direttamente dalla natura corpuscolare-ondulatoria della materia

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Il profilo d'onda riportato in figura è chiamato pacchetto d'onda di ampiezza Δx



Il numero di lunghezze d'onda è legato al confinamento $\Delta x \sim \lambda$ (39)

Considerando la relazione che lega la lunghezza d'onda al numero d'onda, si ottiene:

$$\Delta x \sim \Delta \lambda \quad (\lambda = 2\pi/k) \quad (40)$$

$$\Delta x \Delta k \sim 2\pi \quad (p = \hbar k / 2\pi) \quad (41)$$

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Un pacchetto d'onda di estensione Δx può essere espresso come combinazione lineare, o sovrapposizione, di più onde il cui numero d'onda deve essere compreso all'interno dell'intervallo definito dalla precedente equazione (41)

$$\Delta x \Delta p \geq h \quad (h/4\pi) \quad (42)$$

$$\Delta E \Delta t \geq h/4\pi \quad (43)$$

la precedente equazione in realtà rappresenta un limite superiore di precisione nella determinazione delle incertezze Δx e Δp sulla posizione e sulla quantità di moto della particella

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

A livello microscopico risulta **impossibile determinare contemporaneamente con precisione assoluta** (cioè con incertezza nulla) **la posizione e la quantità di moto** di una particella.

Questo risultato, che **discende direttamente dal dualismo onda-corpuscolo**

Al più, si potrà misurare l'una e l'altra con un certo margine di errore per ciascuna grandezza, essendo gli errori di misura legati dalla relazione di cui sopra.

Alternativamente, potremmo determinare precisamente l'una (incertezza nulla) senza tuttavia poter fare previsione alcuna sull'altra (incertezza infinita).

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

[01-What is the Heisenberg Uncertainty Principle - Chad Orzel.mp4](#)

[02-Heisenberg's Uncertainty Principle Explained.mp4](#)

<https://www.youtube.com/watch?v=TQKELOE9eY4>

<https://www.youtube.com/watch?v=a8FTr2qMutA>

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Esempi:

Sistema costituito a atomi di elio, portato a $T=0$ non solidifica!

Moto di punto zero

Righe spettrali nello spettro di assorbimento, tempo di vita dello stato eccitato, e intervallo di energie associato

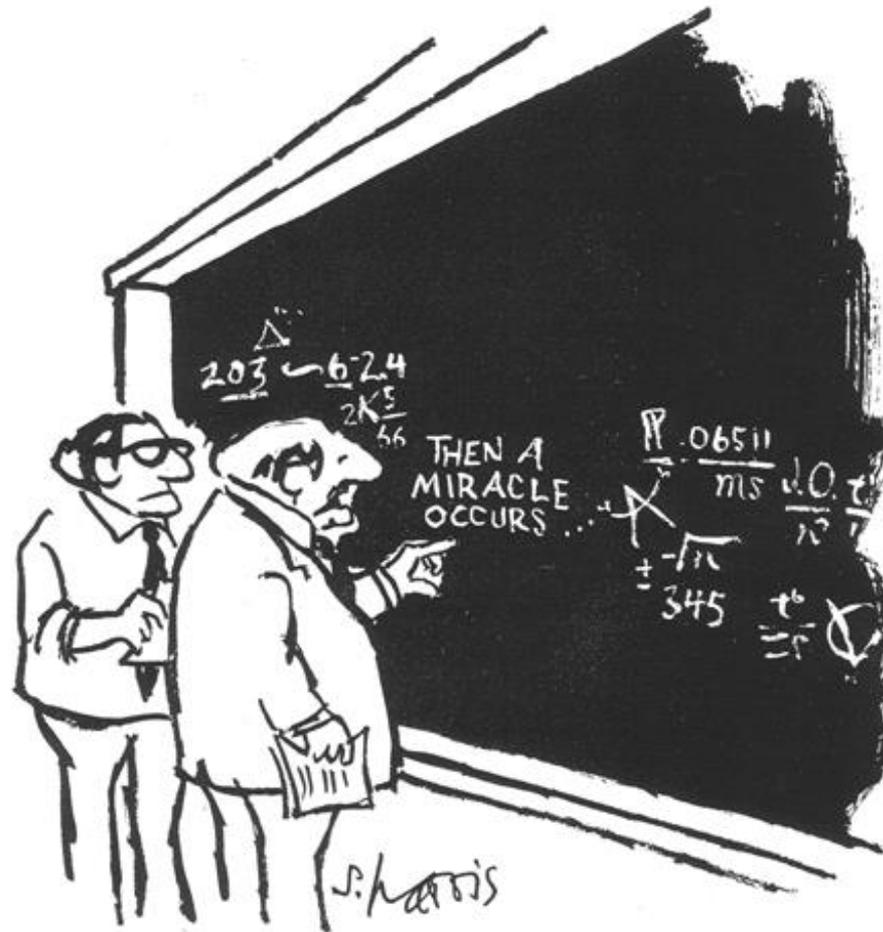
Il dualismo onda-corpuscolo

Determinismo → Probabilità

Meccanica quantistica:

- **Quantizzazione**
- **Formalismo ondulatorio**

La Meccanica Quantistica



Credo che il secondo passaggio vada precisato
meglio

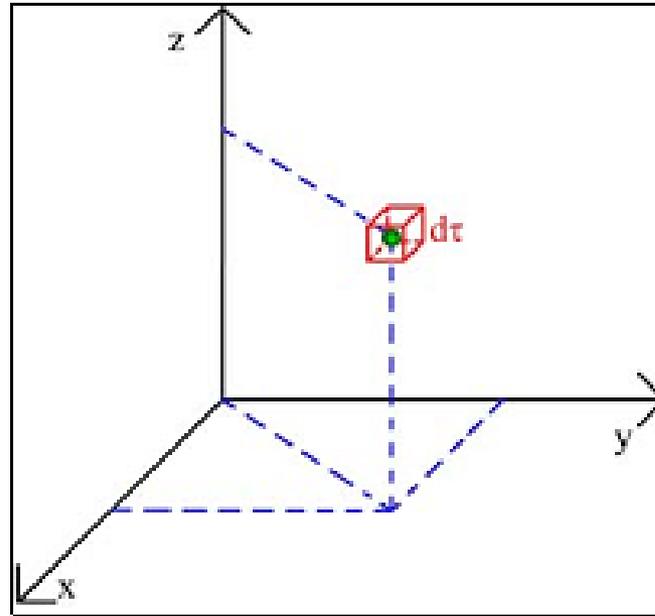
Meccanica Quantistica

A questo punto diventa necessario costruire un formalismo matematico nuovo per descrivere il comportamento ondulatorio dell'elettrone.

Lo stato fisico del sistema non è più **rappresentato** dai parametri tipici delle particelle (*posizione, velocità, accelerazione, quantità di moto, energia*) ma **da una funzione “complessiva”**, dipendente da posizione e tempo.

Lo stato fisico di un sistema è rappresentato da una **FUNZIONE D'ONDA**

Meccanica Quantistica



Consideriamo un sistema fisico con f gradi di libertà associati alle sue coordinate

Primo Postulato: Lo stato fisico di un sistema è descritto da un funzione:

$$\Psi = \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{y}_1, \mathbf{y}_2, \dots, \mathbf{z}_1, \mathbf{z}_2, \mathbf{t})$$

Funzione d'onda a
valori complessi (44)

Meccanica Quantistica

Di tale funzione possiamo definire la sua complessa coniugata e possiamo asserire che

$$\psi\psi^* d\tau = |\psi|^2 d\tau \quad (45)$$

Qual è il suo significato fisico?

Max Born attribuì alla funzione d'onda un *significato probabilistico*.

Rappresenta la **probabilità di trovare il sistema fisico** (per esempio una particella), **all'istante t, all'interno di un elemento infinitesimo di volume $d\tau$**

Meccanica Quantistica

Al modulo quadro della funzione d'onda si è attribuito dunque un risultato probabilistico

essendo la probabilità una funzione che varia con continuità, Ψ è continua, a singolo valore reale e che può essere normalizzata, cioè vale

$$\int_S \psi \psi^* = 1 \quad (46)$$

Non esiste alcun punto dello spazio in cui si può dire con certezza assoluta che in un determinato momento t sia presente una particella

Meccanica Quantistica

La particella è contenuta dentro un volume $d\tau$, centrato in un punto P con una probabilità pari a $|\psi|^2 d\tau$

E la probabilità su tutto lo spazio deve necessariamente essere 1

Condizione di normalizzazione della funzione d'onda

A questo punto sorge la domanda:

Come si descrivono adesso le variabili fisiche delle particelle in termini di funzione d'onda?

Secondo Postulato: Ad ogni grandezza fisica misurabile (chiamata Osservabile) viene associato un operatore quantistico

Tale operatore quantistico viene associato secondo delle regole ben precise:

- Si scrive l'espressione classica della grandezza fisica in termini di coordinate posizionali, di momenti lineari (quantità di moto) e del tempo
- Si costruisce l'operatore quantistico corrispondente in modo che le coordinate posizionali e il tempo intervengano come operatori di moltiplicazione, mentre a ogni componente del momento lineare (in una determinata direzione) viene associato l'operatore $-i\hbar\partial/\partial q$ ($q=x, y, z$)

Meccanica Quantistica

Osservabile Classica	Operatore Quantistico
Posizione: componente x	Moltiplicazione per x
Posizione: componente y	Moltiplicazione per y
Posizione: componente z	Moltiplicazione per z
Tempo t	Moltiplicazione per t
Momento lineare: componente x	Esecuzione di $-i\hbar\partial/\partial x$
Momento lineare: componente y	Esecuzione di $-i\hbar\partial/\partial y$
Momento lineare: c omponente z	Esecuzione di $-i\hbar\partial/\partial z$

Meccanica Quantistica

Facciamo qualche esempio concreto

Consideriamo l'energia cinetica di una particella di massa m e velocità $v = (v_x, v_y, v_z)$

Rappresentazione classica:

$$E_{cin} = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (47)$$

Secondo la meccanica quantistica

$$E_{cin} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (48)$$

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (49)$$

Meccanica Quantistica

Analogamente possiamo ragionare per quel che concerne **l'energia potenziale di interazione nucleo-elettrone**, e determinare di conseguenza l'energia totale:

$$E_{pot} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \rightarrow -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (50)$$

$$E_{tot} = \frac{p^2}{2m} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \rightarrow -\frac{\hbar}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (51)$$

N.B. r rimane invariato con $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$

Dove x , y , z sono le coordinate cartesiane del vettore posizione dell'elettrone

Definiamo H

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (52)$$

Operatore Energia Totale o operatore Hamiltoniano

N.B. La definizione degli operatori è una possibile scelta, arbitraria

Terzo Postulato:

Quando un sistema fisico al tempo t è descritto dalla funzione d'onda Ψ , i valori (s) che possono essere assunti da una qualunque osservabile S descritta da un operatore secondo la descrizione precedente sono il risultato della seguente equazione:

$$S\Psi = s\Psi \quad (53)$$

Equazione agli autovalori per l'operatore S , in cui i valori s sono i valori di aspettazione.

Se Ψ è verificata allora è **un'autostato** di S

Meccanica Quantistica

Spieghiamo meglio

Ho una determinata grandezza fisica (Osservabile) rappresentata da un operatore \mathbf{S} a cui è associata una funzione d'onda Ψ .

s rappresenta il valore misurabile sperimentalmente per la grandezza fisica associata all'operatore \mathbf{S} quando il sistema è descritto dalla equazione d'onda Ψ

L'equazione d'onda non solo mi permette di **calcolare la probabilità con la quale un dato sistema fisico si trovi in un certo punto dello spazio**, ma mi permette anche di calcolare **tutti i valori di tutte le grandezze fisiche ad essa associate**, a patto di conoscere l'operatore corrispondente.

Quando l'equazione (53) è verificata, s è autovalore di S , e Ψ è autostato di S .

In sostanza, l'osservabile S ha valore s !

Meccanica Quantistica

Matematicamente, l'equazione agli autovalori è un'equazione differenziale, da svolgersi in base alle condizioni al contorno che rappresentano il sistema fisico in considerazione inoltre si avrà chiaramente che

$$S\Psi \neq s\Psi$$

Una funzione Ψ , moltiplicata per un suo operatore S , **può non essere una sua autofunzione**, cioè l'equazione non ha soluzioni;

$$S\Psi = s_1 \Psi = s_2 \Psi$$

L'equazione agli autovalori può avere **più di una soluzione**, cioè l'osservabile fisica ha più valori degeneri possibili;

$$\left\{ \begin{array}{l} V\Psi = v\Psi \\ W\Psi = w\Psi \end{array} \right.$$

Una funzione d'onda Ψ **può essere contemporaneamente autostato di due o più differenti operatori.**

Quarto Postulato:

L'evoluzione temporale della funzione d'onda (e dunque del sistema fisico da essa rappresentato) è data dall'equazione:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \mathbf{H}\psi \quad \text{Equazione Di Schrödinger} \quad (54)$$

In cui H è l'operatore Hamiltoniano, ovvero l'operatore quantistico assegnato all'espressione classica dell'energia totale del sistema considerato

Equazione fondamentale della meccanica quantistica, può essere manipolata in maniera conveniente quando si trattano sistemi conservativi, ovvero sistemi in cui l'energia totale è costante nel tempo

Meccanica Quantistica

Per i sistemi conservativi H non dipende dal tempo.

In tal caso la funzione Ψ diventa esprimibile come il **prodotto di una funzione dello spazio per una funzione del tempo** (ovvero è separabile).

Si può dimostrare che l'equazione di Schrödinger stazionaria (ovvero con H indipendente da t) è soddisfatta dalla funzione:

$$\Psi = \psi e^{-iEt/\hbar} \quad (55)$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi = i\hbar \left(-i \frac{E}{\hbar}\right) \psi e^{-iEt/\hbar} = E\Psi$$

$$H\Psi = E\Psi$$

Con E pari all'energia totale del sistema (che non dipende dal tempo) descritto da Ψ

Equazione agli autovalori per l'operatore Hamiltoniano (energia) del sistema: i suoi autovalori rappresentano le possibili energie del sistema considerato!

Meccanica Quantistica

I postulato	Definizione di funzione d'onda
II postulato	Definizione degli operatori
III postulato	Risultati della misura = autovalori degli operatori
IV postulato	Evoluzione temporale del sistema = Equazione di Schroedinger