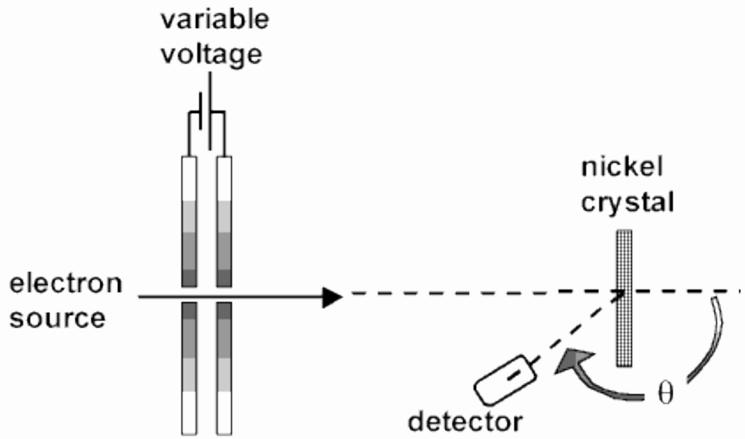
Programma della I parte

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

Elettroni e onde: **Esperimento di Davisson e Germer (https://phet.colorado.edu/it/simulation/legacy/davisson-germer)**



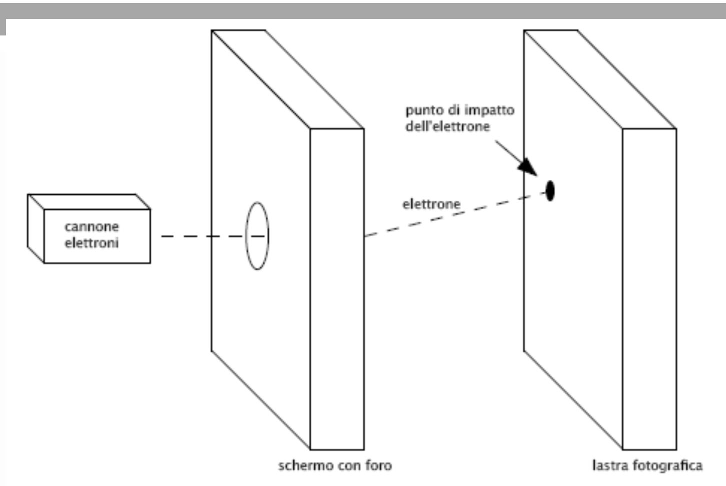
<u>Cosa ci si aspettava</u>: che il sottile cristallo di nickel diffondesse in modo uniforme gli elettroni

<u>Cosa si trovo'</u>: che spostando il detector si trovano dei punti in cui il conteggio degli elettroni aumenta (picchi) e altri in cui diminuisce (valli)

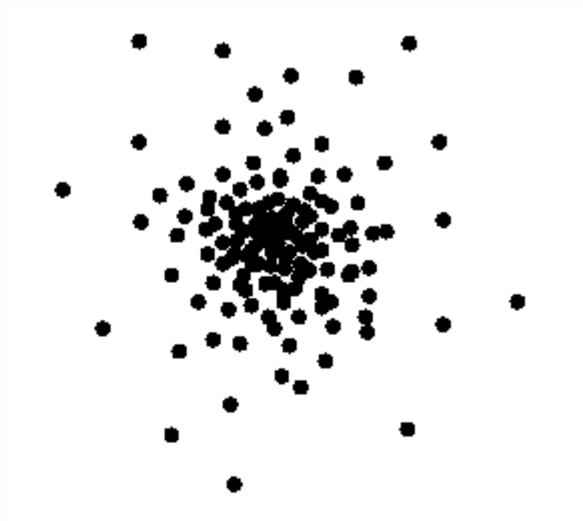
Come se….gli elettroni fossero diffratti come onde luminose (interferenza costruttiva – distruttiva)

Allora anche l'elettrone ha proprieta' ondulatorie!

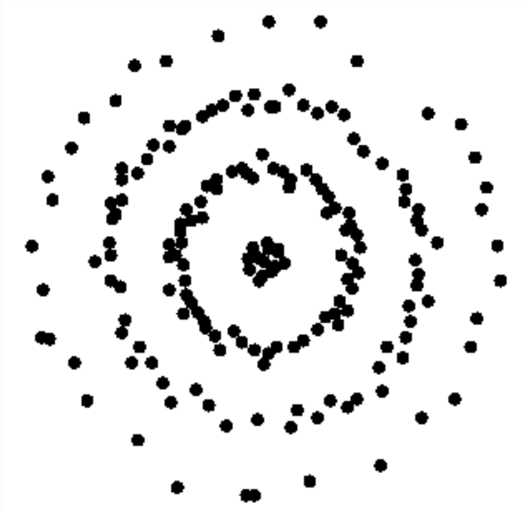
Elettroni e onde: **Esperimento di Davisson e Germer**



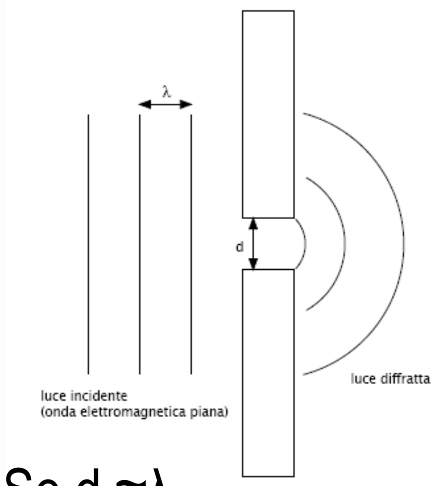
Cosa ci si aspettava:



Cosa si trovo':



Come si comporta la luce:



Se d ≈λ

Elettroni e onde: **Esperimento delle due fenditure**

https://phet.colorado.edu/it/simulation/legacy/wave-interference

http://vsg.quasihome.com/interf.htm

https://phet.colorado.edu/en/simulation/legacy/quantum-wave-interference

Questo famoso esperimento (virtuale) costituisce una sorta di sintesi di come si comportano gli elettroni quando mostrano il loro carattere ondulatorio.

Elettroni e onde: **Ipotesi di De Broglie**

De Broglie ipotizzo' che il dualismo ondulatorio-corpuscolare non riguardasse solo la luce, ma tutte le particelle materiali.

$$\mathbf{p} = \frac{\mathbf{Ev}}{\mathbf{c}^2} \text{ che per i fotoni diventa:}$$

$$E = p \cdot c$$

$$\text{ma vale anche } \mathbf{E} = \mathbf{h\nu} \text{ con } \boldsymbol{\nu} = \frac{\mathbf{v}}{\boldsymbol{\lambda}} = \frac{\mathbf{c}}{\boldsymbol{\lambda}} \text{ per i fotoni}$$

$$\text{da cui } \mathbf{E} = \mathbf{h}\frac{\mathbf{c}}{\boldsymbol{\lambda}}$$

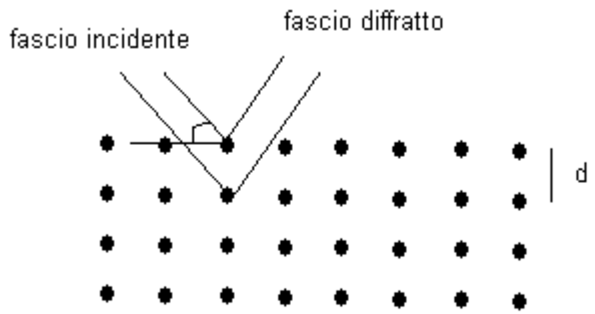
$$\text{Dal confronto con } E = p \cdot c \text{ si ricava che:}$$

$$\boldsymbol{\lambda} = \frac{\mathbf{h}}{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{h}}{\mathbf{mv}}$$

Elettroni e onde: **Ipotesi di De Broglie**

Percio', ad una particella di Energia E, si puo' associare una frequenza d'onda pari a $v = E/h$ e, nota la quantita' di moto, p, la quantita' h/p e' pari alla sua lunghezza d'onda.

Alla luce di questa ipotesi, riesaminando i risultati dell'esperimento di Davisson e Germer, ci si rese conto che i massimi nel conteggio degli elettroni ottenuti dall'esperimento, corrispondevano ad angoli di incidenza del fascio di elettroni θ, definiti dalla seguente relazione:



$$2\mathbf{d}\sin\theta = \mathbf{n}\lambda$$

Con d pari alla distanza tra piani reticolari del cristallo.

Analoga alla relazione di interferenza costruttiva per le onde luminose

Elettroni e onde: **Ipotesi di De Broglie**

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 che viaggia ad una velocità prossima a quella della luce, la lunghezza d’onda è pari a 0,258·10-11 m. Questo giustifica il fatto che per gli oggetti macroscopici, l’aspetto ondulatorio non sia mai percepibile (provate a calcolare la vostra lunghezza d’onda!!!)
L’ipotesi delle onde materiali coinvolse anche i modelli atomici. L’elettrone legato al nucleo atomico è visto come un’onda che staziona intorno al nucleo. Solo su orbite ben definite, l’onda associata all’elettrone “si chiude”, rimanendo in fase. In poche parole la circonferenza dell’orbita deve essere un multiplo della lunghezza d’onda dell’elettrone.

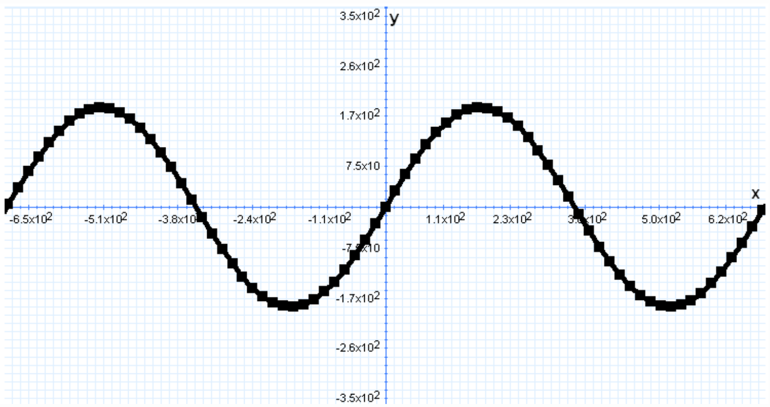
Funzione d'onda per gli elettroni

A questo punto un elettrone puo' essere rappresentato come una particella, di quantita' di moto p ed energia E, oppure come un'onda.

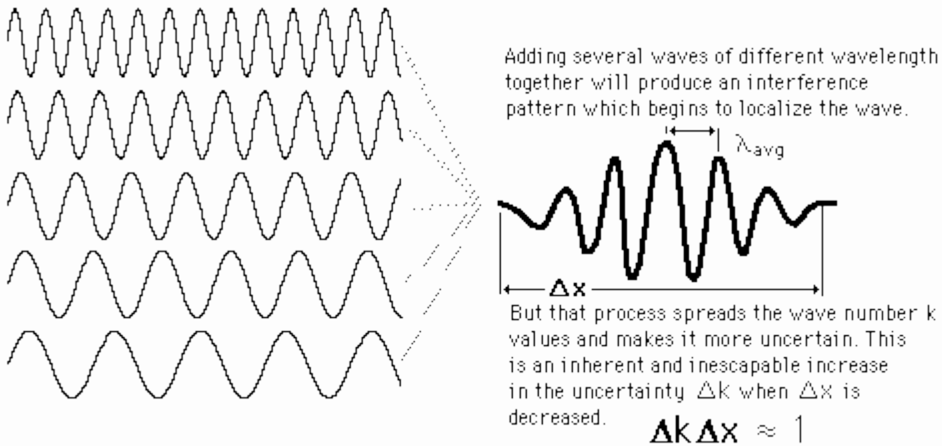
Ma come si descrive un'onda? E qual e' il suo significato fisico?

Un'onda qualunque puo' essere descritta come una combinazione di onde sinusoidali pure (sviluppo di Fourier)

Vediamo i due esempi in figura:



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



$$\psi(\mathbf{x},\mathbf{t}) = \sum_{\mathbf{i}} \mathbf{A}_{\mathbf{i}} \sin(\mathbf{k}_{\mathbf{i}}\mathbf{x} - \boldsymbol{\omega}_{\mathbf{i}}\mathbf{t})$$

Principio di indeterminazione di Heisemberg

Dunque una sinusoide pura, avente numero d'onda pari a k, e' uniformemente distribuita in tutto lo spazio percio' la posizione di una particella ad essa associata non e' determinata, (puo' essere ovunque nello spazio monodimensionale). Al contrario, la particella confinata entro lo spazio Δx e' data da una composizione di sinusoidi con diversi k. Dunque e' proprio delle funzioni sinusoidali e delle loro composizioni di non poter essere descritte contemporaneamente da un unico valore di k e localizzate entro Δx = 0.

Questo, che e' una pura conseguenza matematica della natura ondulatoria dell'elettrone, e' noto come principio di indeterminazione di Heisemberg

$$\Delta x \Delta p \geq \hbar \qquad (\Delta \mathbf{E} \Delta \mathbf{t} \geq \mathbf{h})$$

Il principio di indeterminazione non e' legato alla precisione degli strumenti di misura ma e' una conseguenza della natura ondulatoria dell'elettrone!

Elementi di 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 e' piu' rappresentato dai parametri tipici delle particelle (posizione, velocita', accelerazione, quantita' di moto, Energia) ma da una funzione "complessiva", dipendente da posizione e tempo:

$$\psi = \psi\left(x_{1,} x_{2,} \ldots . y_{1,} y_{2,} \ldots . z_{1,} z_{2,} t\right)$$

Funzione d'onda, a valori complessi

Qual e' il suo significato fisico? Max Born attribui' alla funzione d'onda un significato probabilistico.

$$\psi\psi^{*} dxdydz = |\psi|^{2} dxdydz$$

Rappresenta la probabilita' di trovare la particella nel volume dxdydz

$$\Rightarrow \int_{tuttolospazio} |\psi|^{2} dxdydz = 1$$

Elementi di Meccanica Quantistica

Percio' secondo la meccanica quantistica si devono usare termini probabilistici per descrivere lo stato di un sistema: "la particella ha probabilita' pari a $|\psi|^2 \mathbf{dxdydz}$ di trovarsi nel volume $\mathbf{dxdydz}$ ".
La definizione di funzione d'onda e' il Primo Postulato della Meccanica Quantistica.
A questo punto sorge la domanda: come si descrivono adesso le variabili fisiche delle particelle in termini di funzione d'onda?
Ad ogni grandezza fisica misurabile viene associato un operatore matematico, definito a partire dalle seguenti regole:

x, y, z, t	Moltiplicazione per x,y,z,t
p	$-\mathbf{i}\hbar\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}}\right)$

Elementi di Meccanica Quantistica

Da cui si deducono le altre grandezze fisiche, come ad esempio, per l'atomo di idrogeno (soggetto ad un potenziale elettrico centrato nel nucleo):

$$\mathbf{E_{cin}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mathbf{m}} = \frac{\mathbf{p_x}^2 + \mathbf{p_y}^2 + \mathbf{p_z}^2}{2\mathbf{m}} \rightarrow -\frac{\mathbf{h}^2}{2\mathbf{m}}\nabla^2$$

$$\mathbf{E_{pot}} = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathbf{e}^2}{\mathbf{r}} \rightarrow -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathbf{e}^2}{\mathbf{r}}$$

$$\mathbf{E_{tot}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mathbf{m}} - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathbf{e}^2}{\mathbf{r}} \rightarrow -\frac{\mathbf{h}^2}{2\mathbf{m}}\nabla^2 - \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\mathbf{e}^2}{\mathbf{r}} = \mathbf{H}$$

H e' detto operatore Hamiltoniano e descrive l'energia totale di una particella.
La definizione degli operatori (che e' una possibile scelta, arbitraria) e' oggetto del <u>Secondo Postulato della Meccanica Quantistica.</u>

Elementi di Meccanica Quantistica

Quando un sistema fisico e' 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:

$$\mathbf{S\psi = s\psi}$$

Ovvero sono gli autovalori dell'operatore S (e ψ e' la sua autofunzione). s rappresenta il valore misurabile sperimentalmente per la grandezza fisica associata a S. Questo concetto e' oggetto del Terzo Postulato della Meccanica Quantistica.

Il Quarto Postulato riguarda l'evoluzione temporale della funzione d'onda, che e' stata studiata dal fisico tedesco E. Schroedinger.

Elementi di Meccanica Quantistica

$$\mathbf{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \mathbf{t}} \boldsymbol{\psi} = \mathbf{H}\boldsymbol{\psi}$$

Equazione di Schroedinger

H e’ l’operatore hamiltoniano ovvero l’operatore quantistico assegnato all’espressione classica dell’energia totale del sistema. Questa e’ l’equazione fondamentale della Meccanica Quantistica.

In taluni casi, l’equazione e’ semplificabile. Ad esempio, per i sistemi conservativi, l’energia si conserva e percio’ non dipende dal tempo. Come conseguenza 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 e’ separabile). Ad esempio l’equazione di Schroedinger stazionaria (ovvero con H indipendente da t) e’ soddisfatta dalla funzione:

$$\boldsymbol{\psi} = \psi e^{-iEt/\hbar}$$

con E pari all'energia totale costante del sistema descritto da ψ

Elementi di Meccanica Quantistica

In sintesi:

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