

Riassunto della puntata precedente

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

Plank

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

$$E_{\text{osc.arm.quant.}} = nh\nu$$

Bohr

Modello Atomo

- **quantizzazione del momento angolare**

$$l = m_e v r = n\hbar$$

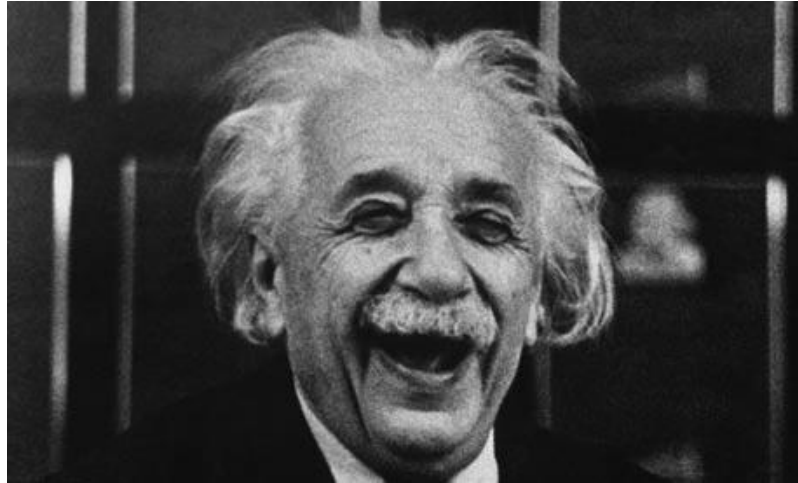
- **La radiazione elettromagnetica viene emessa/assorbita SOLO quando l'elettrone compie una transizione tra stati energetici**

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h}$$

Il dualismo onda-corpuscolo



Il dualismo onda-corpuscolo



Einstein

La radiazione elettromagnetica si comporta come un fascio di corpuscoli

Effetto Fotoelettrico

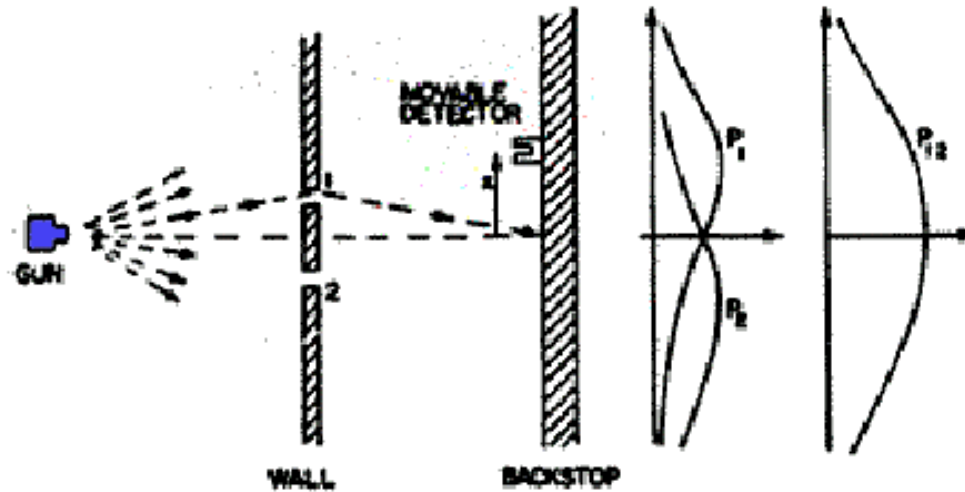


De Broglie

Anche le particelle si comportano come delle onde

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

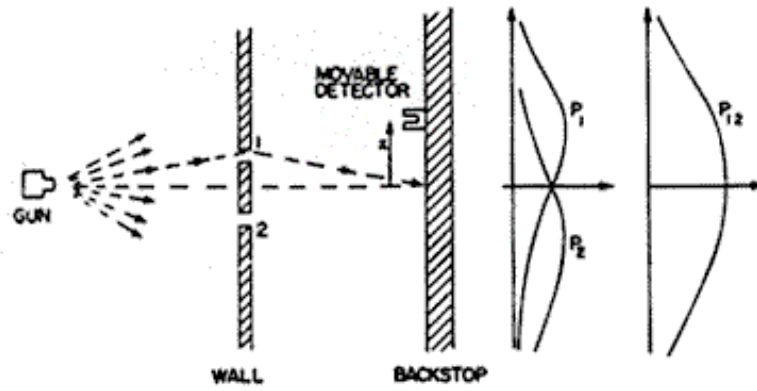
Il dualismo onda-corpuscolo



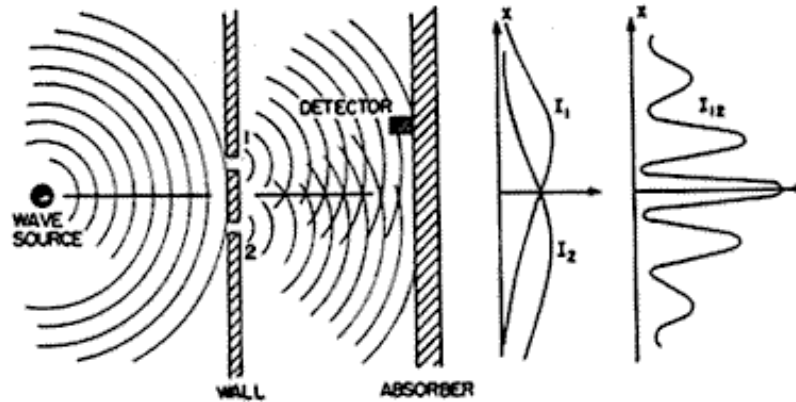
Per gli oggetti classici la probabilità di passaggio attraverso le due fenditure è eguale alla somma delle probabilità di passaggio attraverso ciascuna delle due.



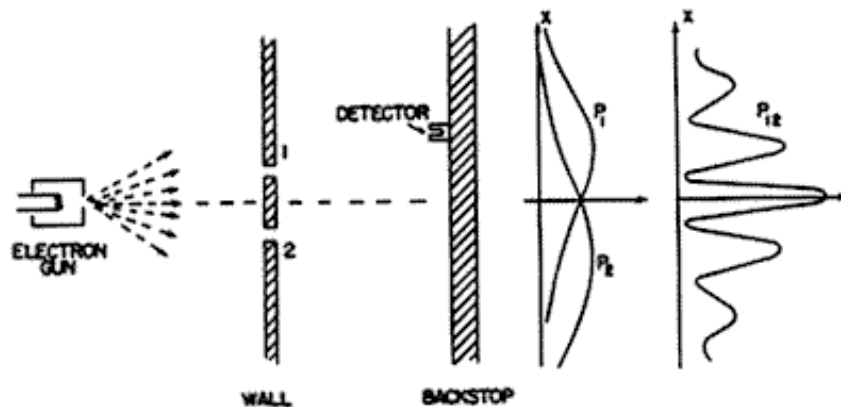
Il dualismo onda-corpuscolo: Davisson e Germer



Particelle “classiche”

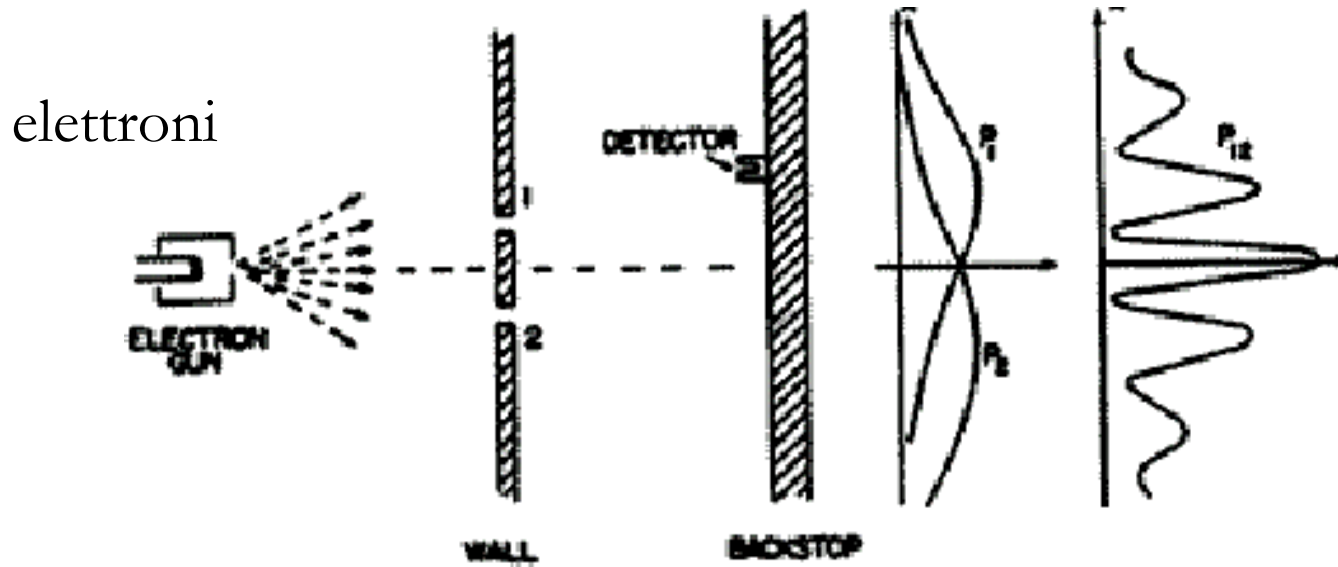


Onde



Particelle “quantistiche”

Il dualismo onda-corpuscolo



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

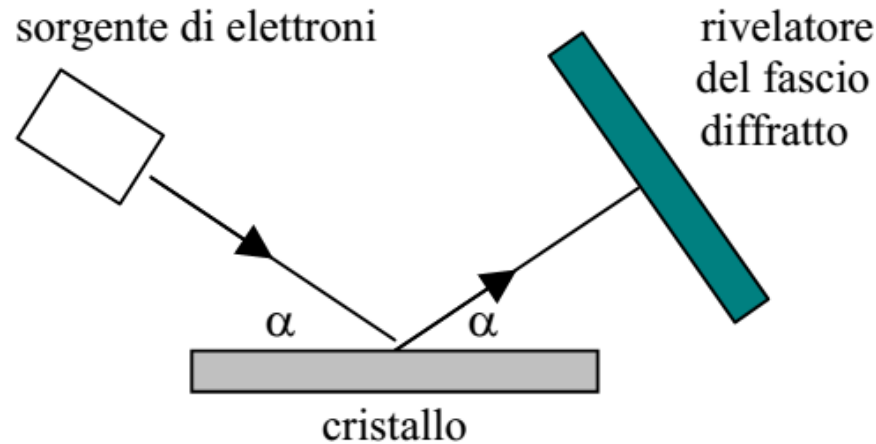
Cosa succede se entrambe le fenditure sono aperte?

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

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

Onde di probabilità, c'è una probabilità non nulla che il singolo elettrone passi in una o nell'altra fenditura

Il dualismo onda-corpuscolo: Davisson e Germer



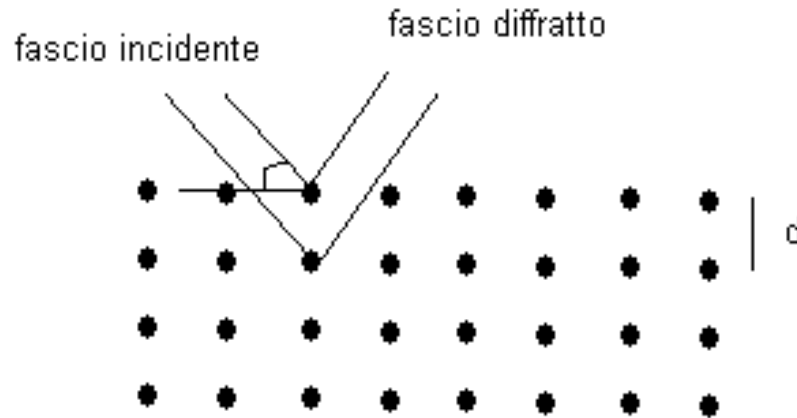
Anche in questo caso, nel rivelatore vengono osservate delle figure di diffrazione

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**.

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?

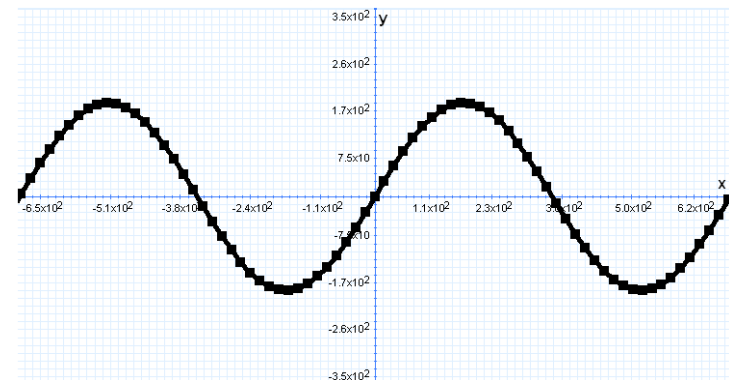
Consideriamo una particella libera, ad essa può essere associata un'onda piana di tipo armonico, che ha ampiezza costante.

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

Conosco la sua lunghezza d'onda, ma non la sua posizione

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

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$



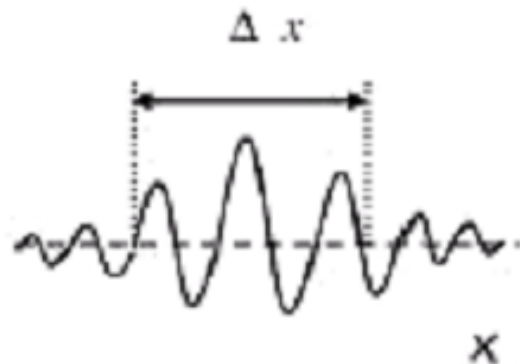
Il dualismo onda-corpuscolo

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!

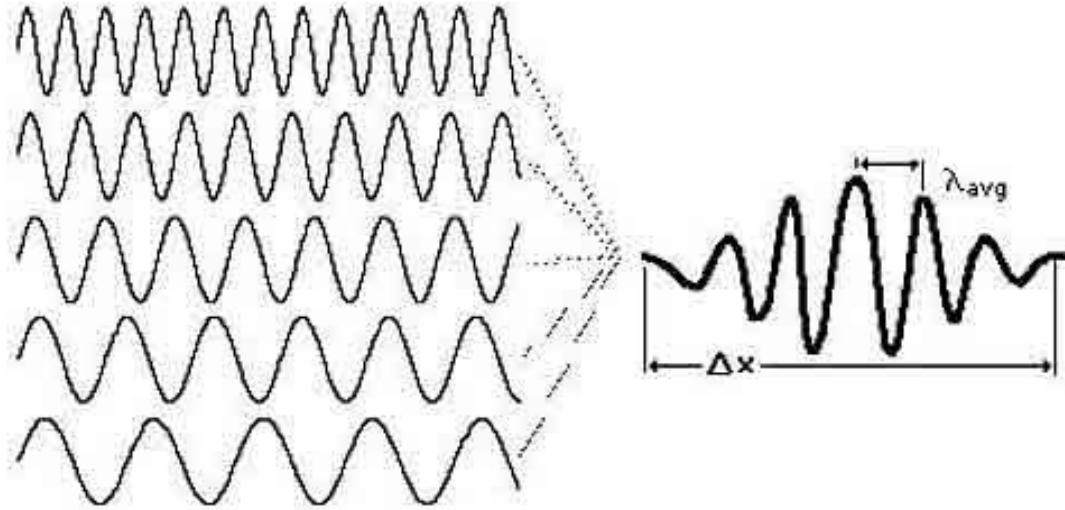
E la sua intensità (legata al quadrato dell'ampiezza)

- 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

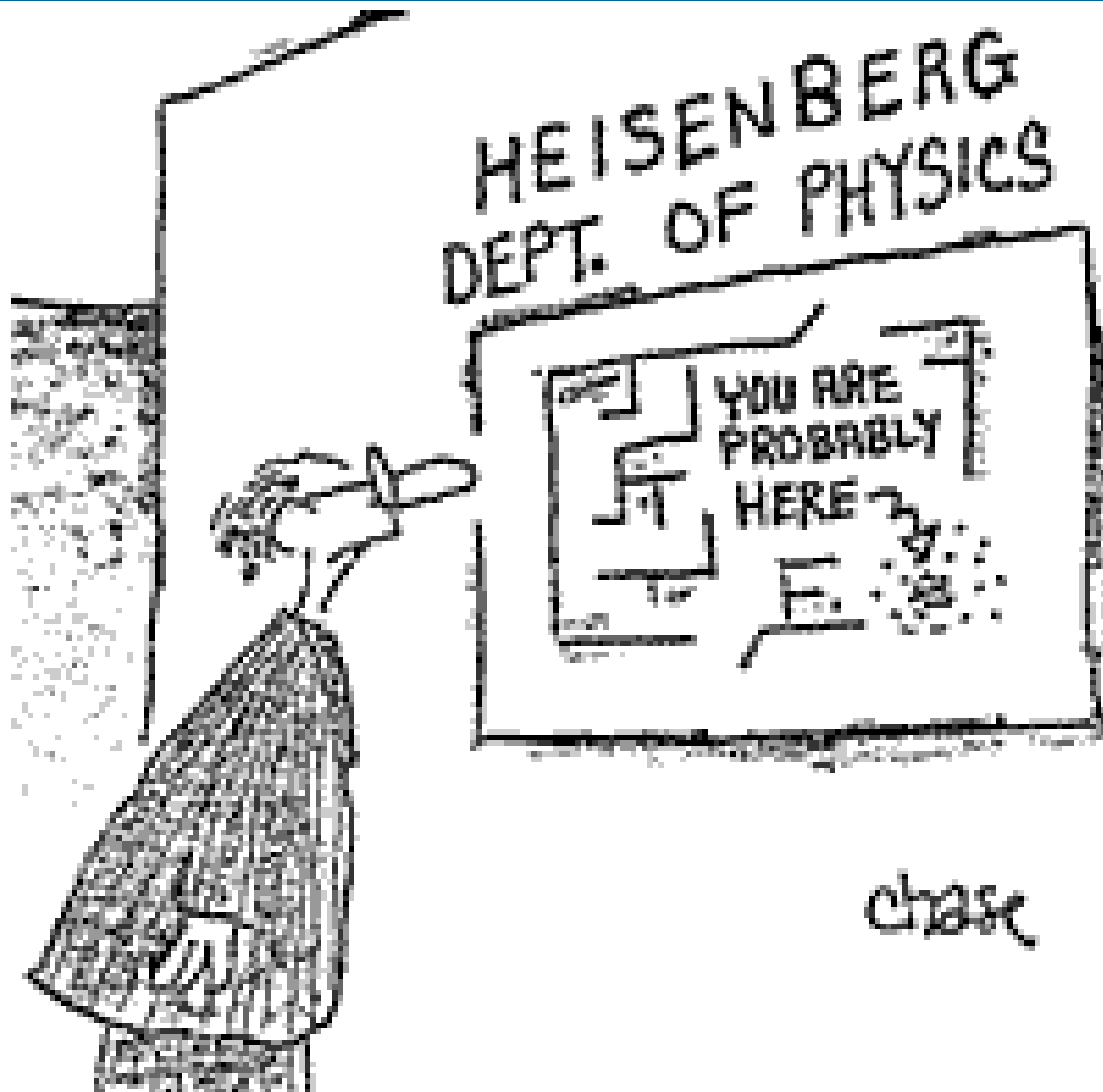
Per diminuire Δx , ovvero, per avere maggior localizzazione, devo considerare un maggior numero di lunghezze d'onda \rightarrow momenti differenti!

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

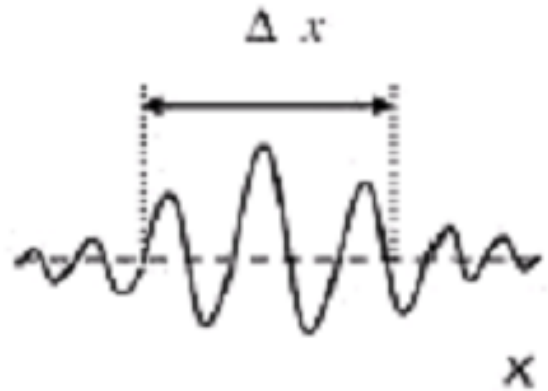
Questo risulta direttamente dalla natura corpuscolare-ondulatoria della materia

Principio di Indeterminazione di Heisenberg



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

Riassumendo:

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

Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Esempi:

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

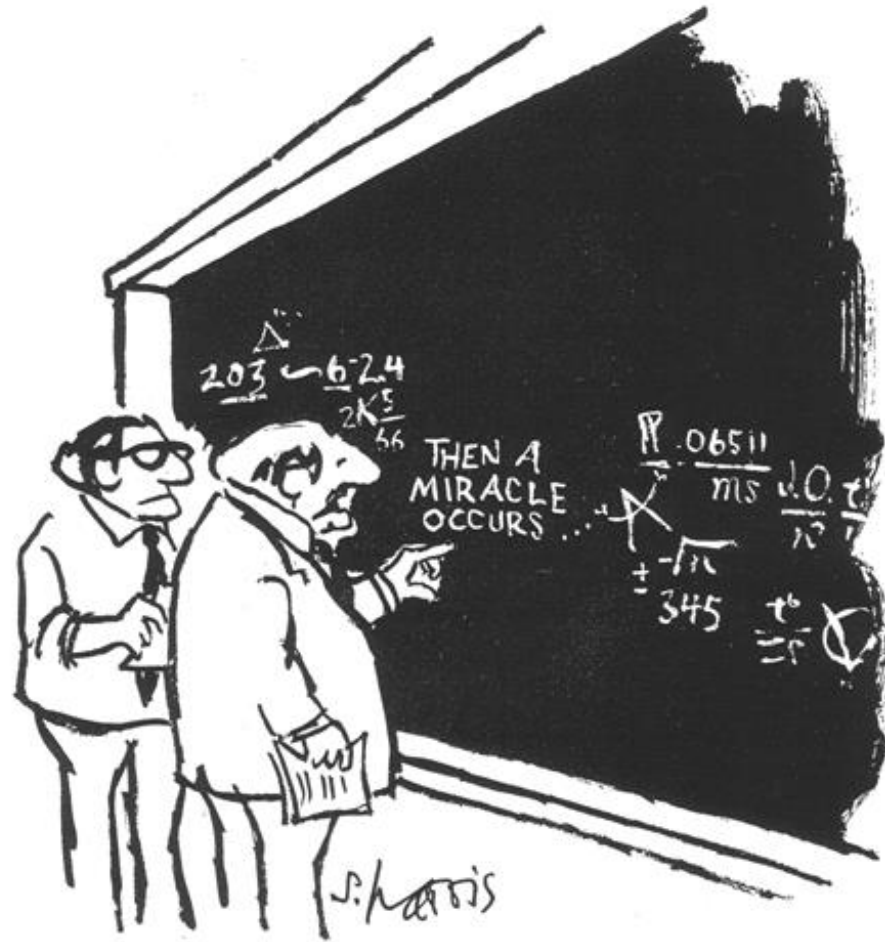
Moto di punto zero

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

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

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

La Meccanica Quantistica



Credo che il secondo passaggio vada precisato
meglio

Il dualismo onda-corpuscolo

Determinismo → Probabilità

Meccanica quantistica:

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

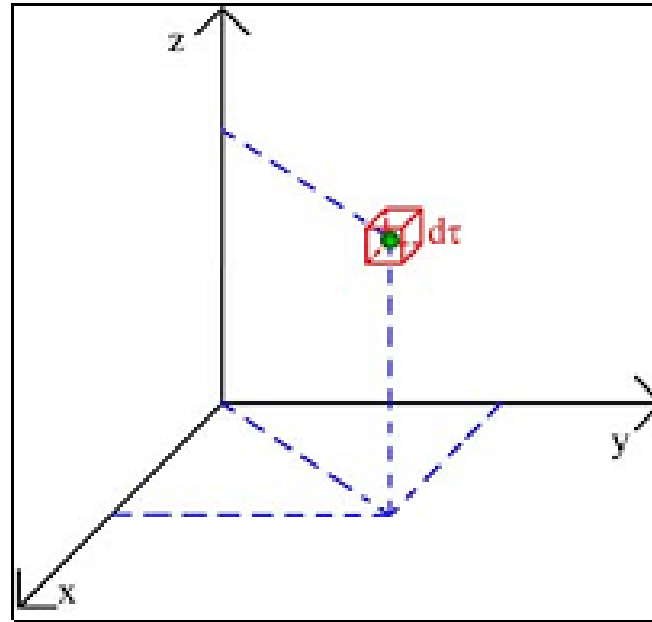
Meccanica Quantistica

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)
23

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 descritta da un operatore S 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 \mathbf{S} , e Ψ è autostato di \mathbf{S} .

In sostanza, l'osservabile \mathbf{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:

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

In cui H è l'operatore Hemiltoniano, 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:

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

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

$$H\Psi = E\Psi$$

$$H\Psi = E\Psi$$

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

Prossima puntata.....

Applicazioni della meccanica quantistica

Particella in una buca di potenziale

Particella vs gradino di potenziale

Particella vs barriera di potenziale → Effetto Tunnel

Risoluzione dell'equazione di Schrödinger per l'atomo di Idrogeno

Definizione dei numeri quantici

Definizione degli orbitali atomici