

Appunti di Fisica Moderna

Giacomo Dutto

Novembre-Dicembre 2025

Indice

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Mercoledì 26 novembre | 3 |
| 1.1 | Il crollo della fisica classica | 3 |
| 1.2 | Principio di De Broglie | 4 |
| 1.3 | Le "Forzature" Logiche di Schrödinger | 5 |
| 1.4 | L'Ipotesi di Born (1927): Dalle Onde alla Probabilità | 6 |
| 1.5 | Condizioni Matematiche e Spazio Vettoriale | 6 |
| 2 | Venerdì 28 novembre | 8 |
| 2.1 | Ragionamenti preliminari (Mercoledì sera) | 8 |
| 2.2 | Inizio lezione | 9 |
| 2.3 | Ragionamento di Heisenberg e Dirac | 9 |
| 2.4 | Quantità di Moto e Operatori | 11 |
| 2.5 | Ragionamenti sull'Energia (Hamiltoniana) | 11 |
| 2.6 | Punto di partenza per Lunedì | 12 |
| 3 | Lunedì 1 dicembre | 13 |
| 3.1 | Riassunto della lezione precedente | 13 |
| 3.2 | Equazione di Schrödinger per una particella in una buca di potenziale | 14 |
| 3.3 | Esperimento 2: Il gradino di potenziale | 16 |
| 4 | Mercoledì 3 dicembre | 18 |
| 4.1 | Introduzione: Pensieri sulla particella libera e confinata | 18 |
| 4.1.1 | Origine della discretizzazione e postulati | 18 |
| 4.2 | Particella soggetta ad un gradino di potenziale | 19 |
| 4.2.1 | Condizioni di raccordo | 21 |
| 4.2.2 | Interpretazione fisica | 21 |
| 4.3 | Applicazioni: Il ragionamento di Gamow-Bethe | 22 |
| 4.4 | Principi della Misura e Indeterminazione | 23 |
| 4.4.1 | Esperimento pensato e formalismo | 23 |
| 4.4.2 | L'origine dell'incertezza | 23 |
| 4.4.3 | Condizione di incertezza nulla | 24 |
| 4.4.4 | Espansione in autostati e Collasso | 24 |
| 5 | Venerdì 5 dicembre | 25 |
| 5.1 | Introduzione: Visualizzabilità e Modelli | 25 |
| 5.2 | Teoria della misura | 25 |
| 5.2.1 | Dal sistema classico a quello quantistico | 25 |
| 5.2.2 | Il Valore Medio e l'Indeterminazione | 25 |
| 5.2.3 | Autovalori e Autovettori | 26 |
| 5.2.4 | Il Formalismo di Dirac | 27 |
| 5.2.5 | Confronto con i dati sperimentali | 27 |
| 5.2.6 | Il Principio del Collasso | 27 |
| 5.3 | Misura simultanea di più grandezze | 27 |

| | | |
|----------|---|-----------|
| 5.3.1 | Esempio di non commutazione: Posizione e Momento | 28 |
| 5.3.2 | Insieme Completo di Osservabili | 28 |
| 5.3.3 | Problemi dell'interpretazione di Copenaghen | 29 |
| 5.4 | Riassunto dei Principi | 29 |
| 6 | Lunedì 15 dicembre | 31 |
| 6.1 | Introduzione | 31 |
| 6.2 | L'Elettrone in un Solido | 31 |
| 6.2.1 | Le 5 Ipotesi Semplificative | 32 |
| 6.2.2 | Analisi delle Ipotesi | 32 |
| 6.3 | Risoluzione Matematica | 33 |
| 6.3.1 | Teorema di Bloch e Soluzione | 34 |
| 6.4 | Approssimazioni e Risultato Finale | 35 |
| 6.4.1 | Conclusione Fisica | 35 |
| 7 | Lezione 17 dicembre | 36 |
| 7.1 | Modello dell'Elettrone nel Solido Cristallino | 36 |
| 7.2 | Significato fisico del vettore d'onda k | 37 |
| 7.3 | Struttura a Bande e Spazio Reciproco | 37 |
| 7.4 | Quantizzazione: dal solido infinito al finito | 38 |
| 7.5 | Riempimento delle Bande e Classificazione dei Materiali | 39 |
| 7.5.1 | Esempi di riempimento | 39 |
| 7.5.2 | Conduttori, Isolanti e Semiconduttori | 40 |
| 7.6 | Massa Efficace e Densità degli Stati | 41 |
| 7.6.1 | Massa Efficace | 41 |
| 7.6.2 | Densità degli Stati | 41 |
| 7.7 | Effetti della temperatura e Statistica di Fermi-Dirac | 42 |
| 8 | lezione 19 dicembre | 43 |
| 8.1 | Richiami di Fisica dello Stato Solido | 43 |
| 8.1.1 | Descrizione dell'elettrone nel reticolo | 43 |
| 8.1.2 | Schema a bande e Principio di Pauli | 43 |
| 8.1.3 | Approssimazione a elettroni indipendenti | 44 |
| 8.1.4 | Conduttori, Isolanti e Massa Efficace | 44 |
| 8.1.5 | Comportamento in temperatura | 44 |
| 8.2 | Statistica di Fermi-Dirac | 45 |
| 8.2.1 | Calcolo delle combinazioni (W) | 45 |
| 8.2.2 | Relazione con la Termodinamica | 46 |
| 8.2.3 | Entropia di Boltzmann e Energia Libera | 46 |
| 8.2.4 | Derivazione della funzione di distribuzione | 46 |
| 8.2.5 | Analisi della funzione | 47 |
| 8.3 | Posizione del Livello di Fermi | 48 |
| 8.3.1 | Conduttori (Metalli) | 48 |
| 8.3.2 | Isolanti e Semiconduttori | 48 |
| 8.4 | Informazioni sull'Esame e Logistica | 49 |

Capitolo 1

Mercoledì 26 novembre

1.1 Il crollo della fisica classica

La fisica classica e l'elettromagnetismo di Maxwell non riescono a spiegare alcuni fenomeni osservati sperimentalmente.

Consideriamo un solido cristallino, ad esempio un pezzo di sale. Gli atomi sono disposti ai vertici di cubi in un reticolo cristallino, con una distanza interatomica di circa $1 \times 10^{-10} \text{ \AA}$.

Se illuminiamo il cristallo con dei **raggi X**, otteniamo una figura di interferenza. Questo fenomeno si spiega grazie all'interpretazione del campo elettrico come un'onda: le figure di interferenza mostrano zone buie (interferenza distruttiva) e zone di massima illuminazione (interferenza costruttiva).

Successivamente, se ripetiamo l'esperimento "sparando" degli **elettroni** al posto dei raggi X, otteniamo sorprendentemente lo stesso risultato: zone impressionate (massimi) e zone non impressionate (minimi). Anche inviando un elettrone alla volta, si osserva che gli elettroni vanno a colpire solo le zone di massimo, evitando quelle di minimo.

Dal punto di vista analitico, questo ci dice una cosa interessante: abbiamo interferenza perché i raggi X sono onde sinusoidali. Poiché gli elettroni producono lo stesso esperimento (analogo a quello della fenditura di Young), devono essere descritti matematicamente in modo simile.

Le onde sono descritte da formule del tipo:

$$\Psi_1(x_1, t) = Ae^{i(kx_1 - \omega t)}$$

$$\Psi_2(x_2, t) = Ae^{i(kx_2 - \omega t)}$$

Ci sono ben 6 esperimenti (o gruppi di fenomeni) che la fisica classica non riusciva a spiegare unitariamente:

1. Effetto fotoelettrico
[Image of photoelectric effect diagram] .
2. Radiazione di corpo nero.
3. Atomo di Bohr (spettri atomici).
4. Discretizzazione della vibrazione e della rotazione (spiegazione del calore specifico dell'idrogeno).
5. Effetto Compton (descrizione particellare della quantità di moto del fotone).
6. Diffrazione degli elettroni (dualismo onda-corpuscolo).

In tutti questi casi abbiamo un sistema fisico di dimensioni atomiche o subatomiche, dove le grandezze fisiche non sono visibili a occhio nudo e variano nel **discreto** e non nel continuo. Tentando di descrivere questi fenomeni con ipotesi *ad hoc*, compare sempre la **costante di Planck** (h), una costante che non era mai apparsa nei fenomeni classici.

La descrizione dell'elettrone come un'onda è il duale della descrizione della luce (onda) come particella (fotone). A volte le onde si comportano come particelle e a volte le particelle si comportano come onde.

1.2 Principio di De Broglie

De Broglie intuì che i fenomeni microscopici non sono né puramente particellari né puramente ondulatori. Voleva trovare una correlazione che permettesse di passare dalla descrizione ondulatoria a quella corpuscolare e viceversa.

Posso descrivere il mio oggetto sia come onda che come particella:

$$\begin{array}{lll} \text{Onda} & \Longleftrightarrow & \text{Particella} \\ h\nu & = & E \\ \frac{h}{\lambda} & = & p \\ \Psi(\vec{r}, t) & \Longleftrightarrow & \vec{r}(t) \end{array}$$

Dove ν è la frequenza.

La risoluzione del problema tramite matrici fu l'approccio di Heisenberg (meccanica delle matrici). Schrödinger risolse lo stesso modello utilizzando equazioni differenziali (meccanica ondulatoria). Noi seguiremo il ragionamento di Schrödinger.

Il ragionamento di Schrödinger

Schrödinger si basò su un concetto fondamentale:

I principi non si dimostrano! Un modello mentale, una volta formulato, è valido finché non si trova un esperimento che lo contraddice.

Il ragionamento è il seguente: Il campo elettromagnetico è formato da onde che danno origine a figure di interferenza. Poiché anche gli elettroni mostrano interferenza, essi devono essere descritti dalla stessa espressione analitica dei raggi X (onde).

Tuttavia, gli elettroni non devono soddisfare l'equazione delle onde classica (di d'Alembert) sempre, ma solo in questo caso particolare. L'equazione delle onde è:

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2}$$

Dove:

- v_f è la **velocità di fase** dell'onda ($v_f = \lambda\nu$).
- v_p è la **velocità della particella** ($mv_p = p$).

Grazie al principio di De Broglie possiamo mettere in correlazione v_f e v_p . Dalla relazione $v_f = \lambda\nu$ e $p = h/\lambda$, otteniamo:

$$\boxed{\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{v_f} \implies \frac{p}{h} = \frac{mv_p}{h}}$$

Consideriamo una funzione d'onda piana:

$$\psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$$

Calcoliamo le derivate temporali:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= -i\omega e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \psi \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} &= (-i\omega)(-i\omega) e^{i(kx - \omega t)} = -\omega^2 \psi \end{aligned}$$

Sostituendo nell'equazione delle onde :

$$\nabla^2 \psi = \frac{1}{v_f^2} (-\omega^2) \psi = - \left(\frac{\omega}{v_f} \right)^2 \psi = - \left(\frac{2\pi\nu}{v_f} \right)^2 \psi$$

Ricordando che $\frac{\nu}{v_f} = \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h}$:

$$\nabla^2 \psi = - \left(2\pi \frac{p}{h} \right)^2 \psi = - \left(\frac{p}{h} \right)^2 \psi$$

dove $\hbar = \frac{h}{2\pi}$.

Qui avviene il **salto logico**: accettiamo di passare dalla descrizione ondulatoria a quella particellare usando le relazioni di De Broglie. Riscriviamo l'equazione in termini di massa ed energia:

$$\nabla^2 \psi = - \frac{p^2}{\hbar^2} \psi = - \frac{(mv_p)^2}{\hbar^2} \psi$$

Sappiamo che l'energia cinetica T (spesso indicata con K) è legata alla quantità di moto da $T = \frac{1}{2}mv_p^2 \implies p^2 = 2mT$. Quindi:

$$(mv_p)^2 = 2mT = 2m(H - V)$$

Dove H è l'energia totale (Hamiltoniana) e V l'energia potenziale.

Nota: Queste assunzioni valgono per $v_p \ll c$ (limite non relativistico). In ambito atomico le velocità sono circa 10^5 m/s, quindi molto inferiori a c .

Sostituiamo nell'equazione:

$$\nabla^2 \psi = - \frac{2m(H - V)}{\hbar^2} \psi$$

Riarrangiamo i termini:

$$\begin{aligned} - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi &= (H - V) \psi \\ - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + V \psi &= H \psi \end{aligned}$$

Sappiamo dalla derivata temporale che $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i\omega \psi$. Moltiplichiamo e dividiamo per \hbar :

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -i \frac{\hbar \omega}{\hbar} \psi = -i \frac{E}{\hbar} \psi \quad (\text{poiché } E = H = \hbar \omega)$$

Da cui ricaviamo l'operatore energia:

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

Uguagliando le due espressioni per $H\psi$, otteniamo la celebre **Equazione di Schrödinger dipendente dal tempo**:

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V \Psi \tag{1.1}$$

La funzione Ψ è una funzione **univoca** che descrive lo stato della particella. Il risultato è un'equazione differenziale che sostituisce la legge di Newton ($F = ma$) nel mondo microscopico, trattando la particella come un campo d'onda e incorporando il principio di De Broglie.

1.3 Le "Forzature" Logiche di Schrödinger

La costruzione dell'Equazione di Schrödinger si basa su una serie di passaggi audaci e non banali:

1. **Analogia Elettrone-Fotone**: Si parte dall'evidenza sperimentale che gli elettroni producono figure di diffrazione (come i raggi X e la luce).
2. **Principio di De Broglie**: Si impone la correlazione tra grandezze ondulatorie (λ, ν) e grandezze corpuscolari (p, E). Questa è la prima "forzatura" analitica, il ponte tra fisica classica e quantistica:

$$E = h\nu \quad \text{e} \quad p = \frac{h}{\lambda}$$

3. **Validità Generale:** Partendo dall'equazione delle onde classica e sostituendo le relazioni di De Broglie, si arriva a un'equazione differenziale che, per **ipotesi fondamentale**, si accetta come la nuova legge del moto nel mondo microscopico, valida finché $v_p \ll c$ (limite non relativistico).

Questa equazione è la **legge di evoluzione** dello stato quantistico:

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

Dove $\Psi(\vec{r}, t)$ è la **funzione d'onda**, e $V(\vec{r}, t)$ è il potenziale esterno.

1.4 L'Ipotesi di Born (1927): Dalle Onde alla Probabilità

Il problema centrale era l'interpretazione fisica di $\Psi(\vec{r}, t)$, una funzione che è $\Psi \in \mathbb{C}$ (a valori complessi).

Born utilizzò l'analogia tra l'esperimento della doppia fenditura per la luce e quello per gli elettroni.

Analogia Elettromagnetica (Luce/Fotoni)

Per le onde elettromagnetiche, l'intensità $I(P)$ (misurata in un punto P dello schermo) è proporzionale al quadrato del modulo del campo elettrico risultante:

$$I(P) \propto |E_R|^2$$

Se pensiamo alla luce in termini di fotoni, questa intensità è anche proporzionale al numero di fotoni $n_f(P)$ che colpiscono il punto P :

$$\frac{I(P)}{I_0} \propto \frac{n_f(P)}{N_0} \propto |E_R|^2$$

Dove N_0 è il numero totale di fotoni emessi.

Analogia Quantistica (Elettroni)

Born impone che lo stesso modello sia valido per gli elettroni. Se la funzione d'onda Ψ descrive il comportamento ondulatorio dell'elettrone, allora il suo modulo quadro deve essere proporzionale al numero di particelle che arrivano in quel punto.

Da ciò deriva l'**Ipotesi di Born**:

Il modulo quadro $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ rappresenta la **densità di probabilità** di trovare la particella (elettrone) in \vec{r} al tempo t .

In altri termini, $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$ è la *frazione di volte* in cui, ripetendo l'esperimento, si misura l'elettrone nella posizione \vec{r} .

1.5 Condizioni Matematiche e Spazio Vettoriale

L'interpretazione probabilistica impone condizioni rigorose sulla funzione d'onda:

Normalizzazione

Poiché la probabilità di trovare l'elettrone *da qualche parte* nello spazio Ω deve essere 1 (certezza), abbiamo la condizione di normalizzazione:

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = 1 \quad (1.2)$$

Questo implica che $\Psi(\vec{r}, t)$ deve appartenere allo spazio delle funzioni a quadrato integrabile.

$\Psi \in L^2(\Omega) \implies$ la funzione d'onda appartiene alla **classe delle funzioni il cui modulo al quadrato è integrabile** su tutto lo spazio Ω .

Principio di Sovrapposizione

Un'altra proprietà fondamentale, basata sulla linearità dell'Equazione di Schrödinger, è che se Ψ_1 e Ψ_2 sono soluzioni dell'equazione (e quindi descrivono stati possibili), anche una loro combinazione lineare è uno stato possibile:

$$\Psi = c_1\Psi_1 + c_2\Psi_2$$

Poiché le soluzioni di un sistema lineare formano uno spazio chiuso rispetto alla combinazione lineare, si definisce lo spazio degli stati quantistici come uno **spazio vettoriale**.

Capitolo 2

Venerdì 28 novembre

2.1 Ragionamenti preliminari (Mercoledì sera)

I fisici di inizio '900 hanno formulato il **Principio di Corrispondenza**: nello sviluppare una teoria valida nel microscopico, essa deve necessariamente valere anche nel mondo macroscopico (fisica classica).

Questo perché le equazioni classiche non reggono nel mondo microscopico, ma il contrario deve essere vero. Se, facendo il limite al macroscopico, la nuova teoria venisse smentita, essa andrebbe rivista.

Si introduce una nuova costante universale \hbar (costante di Planck ridotta) che ha ordine di grandezza 10^{-34} J·s. Esiste anche la costante di Boltzmann ($k_B \approx 10^{-23}$ J/K). Per misurarle sono necessarie tecnologie di laboratorio avanzate, avvicinandoci sempre più alla "teoria ultima".

Nota: Non esisterà mai una teoria ultima definitiva, perché migliorando la nostra capacità di misurare, saremo costretti a migliorare le nostre teorie.

Il modello del continuo del 1600 è un'approssimazione della realtà: i punti appaiono muoversi nel continuo, ma nella realtà microscopica sono discreti e piccolissimi (10^{-34}).

Schrödinger ha scritto le sue formule basandosi sulla veridicità dell'esperimento del cristallo, compiendo un "salto di fede" e accettando il principio di De Broglie. L'equazione di Schrödinger non descrive semplici onde piane, ma descrive un esperimento. Se siamo fortunati, questa equazione vale sempre; finora nessuno ha mai trovato una violazione, eccetto quando la velocità dell'oggetto è prossima alla velocità della luce ($v \approx c$). È un processo induttivo che vale per qualunque particella microscopica, non soltanto per gli elettroni.

L'interpretazione della funzione d'onda (Bohr/Copenaghen): Il modulo quadro della funzione d'onda rappresenta la **probabilità** di trovare una particella in un determinato spazio. Questo introduce un problema pratico: l'imprecisione è dovuta al sistema stesso e non alla nostra teoria o alla complessità del calcolo.

Poiché nessuno ha smentito questa teoria, accettiamo il modello di Bohr:

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 \partial \text{Vol}$$

La funzione deve appartenere allo spazio L^2 :

$$\Psi_1 + \Psi_2 = \Psi \in L^2(\Omega)$$

Condizione di normalizzazione:

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \partial \text{Vol} = 1$$

Usando la notazione moderna (Ψ^* è il complesso coniugato e $d\vec{r}$ indica il volume infinitesimo):

$$\int_{\Omega} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \int_{\Omega} \Psi^* \Psi d\vec{r}$$

Il prodotto scalare tra due funzioni d'onda è un numero complesso:

$$\int_{\Omega} \Psi_1^* \Psi_2 d\vec{r} \in \mathbb{C}$$

La fisica moderna utilizza l'algebra lineare come strumento matematico fondamentale.

2.2 Inizio lezione

Consideriamo il seguente sistema:

- Massa puntiforme nota m .
- Soggetta solo a forze conservative \implies descritte da un potenziale $V(\vec{r}, t)$.

Per Schrödinger la posizione non è nota deterministicamente. L'equazione che governa il sistema è:

$$\Psi(\vec{r}, t) \implies i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right] + V\Psi$$

Da $\Psi(\vec{r}, t)$ dobbiamo estrarre le informazioni fisiche del sistema (m). Il ragionamento di Dirac è un ragionamento "strampalato" (fuori dall'immagine comune).

2.3 Ragionamento di Heisenberg e Dirac

L'unica cosa che posso estrarre è la **posizione media** della particella. Se facessimo N misure di \vec{r}_i , definiremmo la posizione media come:

$$\langle \vec{r} \rangle = \sum_{j=1}^N \frac{\vec{r}_j}{N} = \sum_j \vec{r}_j \frac{N |\Psi(\vec{r}_j)|^2}{N}$$

Da cui si implica:

$$\langle \vec{r} \rangle = \sum_j \vec{r}_j |\Psi(\vec{r}_j)|^2$$

Poiché lo spazio è continuo, usiamo l'integrale al posto della sommatoria:

$$\langle \vec{r} \rangle = \int_{\Omega} \vec{r} |\Psi(\vec{r}, t)|^2 d\vec{r} = \int_{\Omega} \vec{r} \Psi^* \Psi d\vec{r}$$

Ora vogliamo misurare la **velocità media** della particella:

$$\frac{d\langle \vec{r} \rangle}{dt} = \int_{\Omega} \frac{d}{dt} (\vec{r} \Psi^* \Psi) d\vec{r} = \langle \vec{v} \rangle$$

Nota: \vec{r} non è la traiettoria, ma la coordinata spaziale, quindi non dipende dal tempo. Sono le funzioni d'onda (Ψ) a dipendere dal tempo.

Per calcolare la velocità media usiamo l'equazione di Schrödinger (semplifichiamo in 1D su x , poi estendiamo):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi$$

Scriviamo l'equazione per Ψ e per la sua coniugata Ψ^* :

$$\Psi^* \left(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right) = \Psi^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + V\Psi \right)$$

$$\Psi \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) = \Psi \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial x^2} + V \Psi^* \right)$$

Sottraendo la seconda dalla prima:

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

Portando $i\hbar$ a denominatore e raccolgo un $\frac{\partial}{\partial x}$ (passaggio mentale sbagliato, perché le derivate non si raccolgono, ma funziona):

$$\frac{\partial(\Psi^* \Psi)}{\partial t} = -\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right)$$

Sostituiamo questo nell'integrale della velocità media lungo x :

$$\langle v_x \rangle = \int x \left[-\frac{\hbar}{2mi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right] dx$$

Integriamo per parti:

$$\langle v_x \rangle = -\frac{\hbar}{2mi} \left[x \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \right]_a^b + \frac{\hbar}{2mi} \int_a^b \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx$$

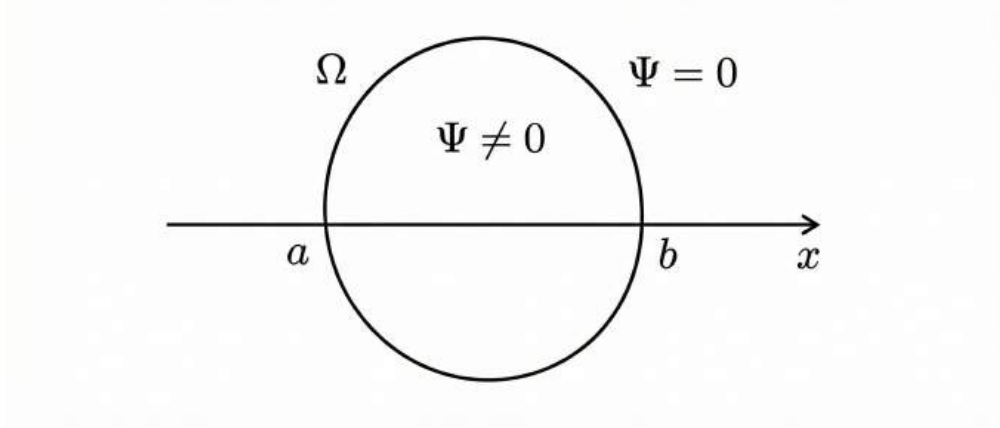


Figura 2.1: Effetti di bordo sulla curva Ω

Sul bordo della superficie che contorna Ω la funzione d'onda deve essere nulla: $\Psi[S(\Omega)] = 0$. Il primo termine (quello tra parentesi quadre) si annulla. Resta:

$$\langle v_x \rangle = \frac{\hbar}{2mi} \int \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) dx$$

Spezziamo in due integrali e integriamo per parti il secondo termine:

$$\int \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} dx = [\Psi \Psi^*]_a^b - \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

Il termine al bordo è nullo. Sostituendo, i due integrali si sommano:

$$\langle v_x \rangle = \frac{\hbar}{2mi} \left(\int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx - \left(- \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx \right) \right) = \frac{2\hbar}{2mi} \int \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} dx$$

Semplificando e portando le costanti nella forma operativa:

$$\langle v_x \rangle = \frac{1}{m} \int \Psi^* \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \right) \Psi dx$$

Estendendo a y e z , e usando l'operatore Nabla (∇):

$$\langle \vec{v} \rangle = \frac{1}{m} \int \Psi^* (-i\hbar \nabla) \Psi d\vec{r}$$

2.4 Quantità di Moto e Operatori

Moltiplicando per la massa m otteniamo la quantità di moto media $\langle p \rangle$:

$$\langle \vec{p} \rangle = \int_{\Omega} \Psi^* (-i\hbar \nabla) \Psi d\vec{r}$$

Tutte le grandezze fisiche classiche $F(\vec{r}, \vec{p})$ diventano operatori quantistici sostituendo \vec{p} con $-i\hbar \nabla$:

$$F(\vec{r}, \vec{p}) \rightsquigarrow \hat{F}(\vec{r}, -i\hbar \nabla)$$

Il valore medio si calcola come:

$$\langle F \rangle = \int_{\Omega} \Psi^* \left[\hat{F}(\vec{r}, -i\hbar \nabla) \Psi \right] d\vec{r}$$

Qui il senso comune crolla. Non c'è una risposta intuitiva al "perché", c'è solo la coerenza matematica. *Attenzione:* nei libri divulgativi il "perché" è filosofico; in fisica il "perché" è risolto dal modello matematico.

2.5 Ragionamenti sull'Energia (Hamiltoniana)

Proviamo a descrivere l'Hamiltoniana di una massa puntiforme soggetta a forze conservative. Regola di trasformazione:

$$H(\vec{r}, \vec{p}) \rightsquigarrow \hat{H}(\vec{r}, -i\hbar \nabla)$$

Classicamente:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r}, t) \quad (\text{Cinetica} + \text{Potenziale})$$

In meccanica quantistica:

$$\hat{H} = \frac{(-i\hbar \nabla) \cdot (-i\hbar \nabla)}{2m} + V(\vec{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\vec{r}, t)$$

(Dove $\Delta = \nabla^2$ è il Laplaciano). Confrontando con l'equazione di Schrödinger, notiamo che il termine tra parentesi è proprio l'energia (Hamiltoniana):

$$\implies \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H} \Psi}$$

Supponiamo ora **forze conservative statiche** (non dipendenti dal tempo) e ignoriamo l'interazione con la luce ("materia al buio"). $\hat{H}(\vec{r})$ dipende solo dalla posizione. Possiamo separare le variabili: $\Psi(\vec{r}, t) = T(t)R(\vec{r})$. Inserendo nell'equazione:

$$i\hbar \frac{\partial T}{\partial t} R = T(\hat{H} R)$$

Dividiamo per $T(t)R(\vec{r})$ per separare le dipendenze, poichè due equazioni differenziali dipendenti da variabili differenti sono uguali, allora devono essere entrambe costanti a un numero β :

$$\frac{i\hbar}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\hat{H} R}{R} = \beta \quad (\text{costante})$$

Otteniamo due equazioni:

$$\begin{cases} \frac{i\hbar}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = \beta \\ \hat{H} R = \beta R \end{cases}$$

RisolviAMO la parte temporale:

$$\frac{dT}{T} = \frac{\beta}{i\hbar} dt \implies \ln(T) = -\frac{i\beta}{\hbar} t + C$$

$$T(t) = Ae^{-\frac{i\beta}{\hbar}t}$$

La seconda equazione è un'equazione agli autovalori. Gli autovettori sono **ortonormali** e costituiscono una base completa.

Poiché la parte temporale è un esponenziale complesso puro, il suo modulo quadro è 1. Quindi la densità di probabilità $|\Psi|^2$ non dipende dal tempo (stato stazionario). La fisica interessante sta tutta nella parte spaziale $R(\vec{r})$.

Identifichiamo la costante β con l'Energia E :

$$\langle H \rangle = \beta = E$$

Quindi otteniamo l'**Equazione di Schrödinger Stazionaria**:

$$\begin{cases} T(t) = Ae^{-\frac{iE}{\hbar}t} \\ \hat{H}R(\vec{r}) = ER(\vec{r}) \end{cases}$$

La soluzione completa è:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{iE}{\hbar}t}R(\vec{r})$$

Nota: \hat{H} (con il cappellino) è l'operatore, E (senza cappellino) è la grandezza fisica reale (autovalore). La fisica moderna lavora nello spazio astratto dei campi vettoriali.

2.6 Punto di partenza per Lunedì

Massa puntiforme m soggetta a forze conservative non dipendenti dal tempo. Interpretazione:

$$\Psi(\vec{r}, t) = Ae^{-\frac{iE}{\hbar}t}\psi(\vec{r})$$

(Da ora chiamiamo ψ la parte spaziale R). Ricaveremo E risolvendo:

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

I valori medi si calcolano sulla parte spaziale (il tempo scompare):

$$\langle F \rangle = \int_{\Omega} \psi^*(\hat{F}\psi)d\vec{r}$$

Nella fisica quantistica stazionaria, il senso dello scorrere del tempo sembra non contare!

Capitolo 3

Lunedì 1 dicembre

3.1 Riassunto della lezione precedente

Siamo arrivati al dunque: abbiamo stabilito i principi fondamentali e ora cercheremo di spiegare gli esperimenti tramite le teorie consolidate. Il modello è valido se, basandosi su una teoria corretta, funziona entro i limiti dell'approssimazione scelta.

Riassumiamo il punto della situazione ad oggi. Alcuni esperimenti non sono descrivibili tramite i modelli della fisica classica; deve esistere tuttavia un principio per cui, nel limite classico (dimensioni comparabili con l'essere umano), la nuova teoria coincida con la fisica classica: questo è il **Principio di corrispondenza**. Abbiamo introdotto una costante universale, la costante di Planck, che indicheremo con h [Js].

Accettiamo che le grandezze fisiche variano nel discreto. Abbiamo ripercorso il ragionamento di Schrödinger, che ci permette di descrivere il comportamento ondulatorio degli elettroni
 \rightsquigarrow che si può estendere a tutti i corpi dotati di massa.

L'unico ragionamento che non porta ad assurdi logico-matematici è il principio di Bohr, secondo cui il modulo della funzione d'onda al quadrato rappresenta la probabilità di trovare una particella in un determinato spazio. Fisicamente, questo va interpretato come la frazione di volte che misuro la particella in un determinato spazio rispetto al numero totale di misure; perde quindi il significato di mera possibilità matematica e acquista un valore fisico **frequentistico**.

La funzione d'onda, oltre ad avere un valore probabilistico/frequentistico, gode della proprietà di combinazione lineare \implies la funzione d'onda descrive uno spazio lineare vettoriale.

Il ragionamento di Dirac è una conseguenza logica e matematica dell'interpretazione di Bohr (o interpretazione di Copenaghen). Assumiamo che questo risultato valga sempre.

Se consideriamo una massa puntiforme m , soggetta a forze conservative derivanti da un potenziale $V(\vec{r}, t)$:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} &= -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\vec{r}, t) + V \Psi \\ \rightarrow \Psi(\vec{r}, t) &\rightarrow |\Psi|^2 d\vec{r} \text{ modo di trovare } m \text{ particella} \\ < \vec{r} > &= \int \Psi^* \vec{r} \Psi d\vec{r} \\ F(\vec{r}, \vec{p}) &\implies \hat{F}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla}) \end{aligned}$$

Qui avviene un salto logico, una definizione di principio dovuta ad Heisenberg e Dirac:

$$< F > = \int_{\Omega} \Psi^* (\hat{F} \Psi) d\vec{r}$$

F deve necessariamente essere hermitiano affinché il risultato sia un numero reale, poiché la misura fisica deve essere un numero reale dimensionato. Per definizione di hermitianità deve essere vera questa uguaglianza:

$$< F > = \int_{\Omega} \Psi^* (\hat{F} \Psi) d\vec{r} = \int_{\Omega} (\hat{F} \Psi)^* \Psi d\vec{r}$$

Ultima considerazione fatta la scorsa settimana: abbiamo bisogno di semplificare il problema, separando la derivata spaziale da quella temporale. Nella maggior parte dei casi l'energia potenziale non dipende dal tempo, poiché possiamo considerare la distribuzione di cariche o di masse come stazionaria. Ad esempio, cariche positive fisse nello spazio e cariche negative che si muovono. La componente temporale nel potenziale emerge quando la massa genera qualcosa di variabile, come onde elettromagnetiche o gravitazionali (poiché le onde contengono intrinsecamente il tempo). Tuttavia, se non c'è interazione dinamica temporale, la funzione potenziale **NON DIPENDE DAL TEMPO**.

Allora:

$$V(\vec{r}) \implies \Psi(\vec{r}, t) = R(\vec{r})e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$$

$$\hat{H}R(\vec{r}) = ER(\vec{r})$$

Otteniamo l'equazione di Schrödinger stazionaria:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta R(\vec{r}) + V(\vec{r})R(\vec{r}) = ER(\vec{r})$$

Da ora in poi possiamo "dimenticare" l'equazione completa e lavoreremo solo con l'equazione di Schrödinger stazionaria:

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

Dove abbiamo posto la funzione $R(\vec{r}) = \psi(\vec{r})$.

3.2 Equazione di Schrödinger per una particella in una buca di potenziale

Cosa succede quando confiniamo una particella in una sezione di spazio finita? Analizziamo l'equazione di Schrödinger per una particella in una buca di potenziale.

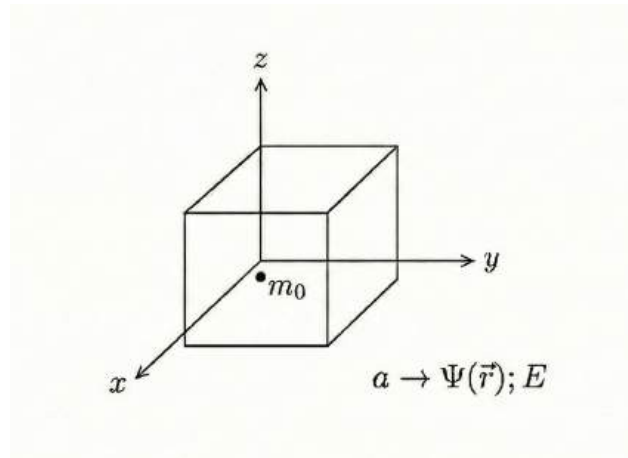


Figura 3.1: Rappresentazione della particella confinata.

Immaginiamo una particella m rinchiusa in un contenitore cubico ermetico. Svolgeremo il ragionamento in una dimensione (confinata in un segmento tra 0 e a) ed estenderemo poi il ragionamento alle 3 dimensioni. L'energia potenziale di una massa non soggetta a forze è una costante, che noi poniamo arbitrariamente uguale a 0 all'interno della buca.

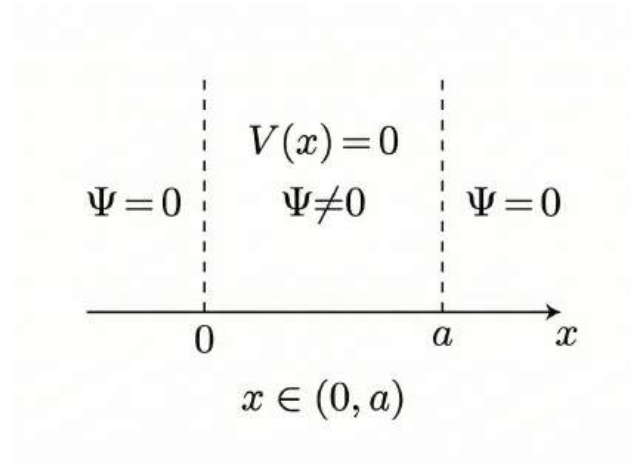


Figura 3.2: Buca di potenziale infinita.

Allora l'equazione di Schrödinger diventa:

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

(Ricordiamo che l'energia potenziale è costante e posta a 0).

Iniziamo ad elaborare questa funzione:

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = -\left(\frac{2mE}{\hbar^2}\right)\psi(x) = -\alpha^2\psi(x)$$

Dove abbiamo sostituito con $\frac{2mE}{\hbar^2} = \alpha^2$. Sappiamo che l'equazione caratteristica è

$$\lambda^2 = -\alpha^2 \implies \lambda = \pm i\alpha$$

Le condizioni al contorno sono $\psi(0) = 0$ e $\psi(a) = 0$. Dalla soluzione generale

$$\psi(x) = Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}$$

Imponendo $\psi(0) = 0$ otteniamo $A + B = 0 \implies B = -A$.

Imponendo $\psi(a) = 0$ otteniamo:

$$Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a} = Ae^{i\alpha a} - Ae^{-i\alpha a} = 0$$

Semplifico A raccogliendola:

$$0 = e^{i\alpha a} - e^{-i\alpha a}$$

Utilizzando la formula di Eulero ricaviamo:

$$\cos(\alpha a) + i \sin(\alpha a) - (\cos(\alpha a) - i \sin(\alpha a)) = 2i \sin(\alpha a) = 0$$

Da cui ricaviamo che $\sin(\alpha a) = 0$. Questo implica che $\alpha a = n\pi$ con $n = 1, 2, 3, \dots$

Il valore n non può essere zero, poiché implicherebbe $\alpha = 0$ e quindi $\psi(x) = 0$ ovunque: significherebbe che la scatola è vuota, il che non ha senso fisico (la particella deve esistere).

Da qui ricaviamo α :

$$\alpha^2 = \left(\frac{n\pi}{a}\right)^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Quindi l'energia nell'equazione di Schrödinger diventa:

$$E = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

Vediamo che l'energia assume dei valori finiti e discreti, dipendenti dal valore intero $n \in \mathbb{N}$.

Se dovessimo trovare la costante di normalizzazione A , useremmo il vincolo integrale $|\psi|^2 dx = 1$.

Le due condizioni al contorno ci hanno permesso di trovare le relazioni tra le costanti, ma è la terza condizione (il vincolo di normalizzazione, o meglio, la condizione di esistenza di soluzioni non banali legata alle condizioni al contorno) che ci fornisce la quantizzazione. Questo ci mostra che l'equazione di Schrödinger è un principio molto più fondamentale di quanto descritto inizialmente: descrive naturalmente l'assunzione di livelli energetici discreti grazie ai vincoli necessari per risolvere le equazioni differenziali.

Il confinamento di una massa puntiforme in una regione di spazio finita porta alla discretizzazione dell'energia. L'unico caso in cui l'energia non è discretizzata è quando la particella si trova in uno spazio infinito, ma ciò non ha senso fisico reale, poiché nei casi pratici le particelle sono sempre definite in uno spazio finito.

Esempio numerico: Consideriamo una molecola di azoto N_2 con massa m_{N_2} . Svuotiamo una stanza e inseriamo questa unica molecola. L'unica energia presente è quella cinetica, perché la potenziale è zero per ipotesi.

$$E = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} = \frac{1}{2} m_{N_2} v^2$$

Da cui otteniamo la velocità:

$$v^2 = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{m_{N_2}^2 a^2} \implies v = n \frac{\pi \hbar}{ma}$$

Vogliamo misurare quanto distano due stati contigui di velocità:

$$\Delta v = v_{n+1} - v_n = \frac{\pi \hbar}{ma}$$

Sappiamo che $\hbar \approx 1,05 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$. Prendiamo per comodità $a = 1 \text{ dm} = 0.1 \text{ m}$ e la massa $m = m_{N_2} = 28 \text{ uma} \approx 28 \cdot 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Sostituendo i numeri otteniamo $\Delta v \approx 10^{-7} \text{ m/s}$. A questa scala, non ci accorgiamo della discretizzazione della velocità (sembra continua).

Per accorgerci della discretizzazione dobbiamo diminuire la massa e la dimensione del contenitore. Consideriamo un elettrone ($m_e \approx 9 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$) confinato in un atomo ($a \approx 10^{-10} \text{ m}$). Otteniamo che $\Delta v \approx 10^6 \text{ m/s}$. Questa è una differenza di velocità enorme e quindi misurabile: con una massa piccola in un contenitore piccolo, la quantizzazione diventa evidente.

3.3 Esperimento 2: Il gradino di potenziale

Analizziamo un salto di energia potenziale.

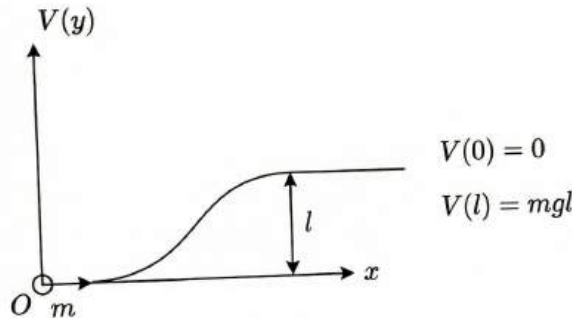


Figura 3.3: Gradino di potenziale.

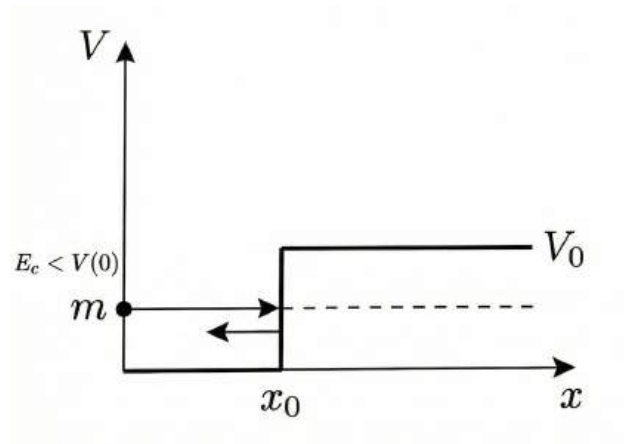


Figura 3.4: Rappresentazione dell'Effetto Tunnel.

Se una particella collide contro un gradino di potenziale avendo un'energia cinetica inferiore all'energia potenziale richiesta per superarlo, classicamente essa rimbalza indietro e rimane nella "buca".

Tuttavia, scopriremo dalle equazioni di Schrödinger che le particelle fisiche hanno una probabilità non nulla di attraversare il gradino di potenziale. Questo fenomeno è noto come **EFFETTO TUNNEL**. Mentre nella fisica classica (macroscopica) se ci schiantiamo contro un muro non possiamo passarlo, la fisica di Schrödinger ci dice che a livello microscopico esiste la probabilità di attraversare la barriera.

Capitolo 4

Mercoledì 3 dicembre

4.1 Introduzione: Pensieri sulla particella libera e confinata

Dopo aver risolto l'equazione di Schrödinger stazionaria per una particella dotata di massa m in una regione di spazio finita, possiamo fare alcune considerazioni fondamentali.

- **Nota sull'isotropia:** Studiare il moto di una particella su un singolo asse è equivalente a studiarlo lungo un asse coordinato generico; pertanto, il risultato è valido in qualsiasi direzione in uno spazio tridimensionale, assumendo una regione di spazio finita.

Uno degli esercizi più semplici consiste nello studiare una particella confinata. In questo caso, le velocità consentite sono discrete. Tuttavia, a livello macroscopico, queste velocità discrete sono immisurabili a causa della limitata sensibilità degli strumenti, che non ci permette di apprezzare il cambiamento nel discreto (il salto quantico è troppo piccolo rispetto alla scala macroscopica).

Al contrario, in spazi molto ridotti e con masse piccole (come gli elettroni in un nucleo o atomo), la discretizzazione diventa evidente e ci permette di misurare i cambiamenti di velocità.

- **Nota sugli atomi:** All'interno di un atomo gli elettroni non si muovono liberamente a causa dell'interazione con la forza di Coulomb. È fondamentale dedurre che un elettrone in una regione di spazio generica della dimensione di un atomo non si comporta esattamente come un elettrone legato in un atomo.
- **Energia di punto zero:** Esiste un'energia minima che l'elettrone deve possedere. Se fosse $n = 0$ (energia nulla), la particella non esisterebbe; quindi, deve necessariamente esserci un'energia minima (energia di punto zero).

Abbiamo scoperto che i principi imposti da Bohr sono intrinsecamente contenuti nell'equazione di Schrödinger. Essa ci impone che gli atomi non collassino sul nucleo, garantendo così la stabilità della materia.

4.1.1 Origine della discretizzazione e postulati

Osservazione: Da dove nasce la discretizzazione? Essa deriva dalle *condizioni al contorno*. Tutti i sistemi fisici sono sottomessi a condizioni fisiche al contorno.

Nella fisica moderna, talvolta si preferisce abbondare nei postulati. Poiché alcuni concetti sono così criptici da rendere difficile il calcolo esatto dell'equazione di Schrödinger in tutti i sistemi, si ricorre a principi ridondanti che assumiamo essere sempre veri.

Il metodo scientifico procede così: se l'evidenza sperimentale (escludendo errori di misura) non è coerente con i principi teorici, è necessario correggere i principi stessi. Questa flessibilità è tipica della fisica del '900, a differenza della fisica classica dove i principi venivano modificati con molta difficoltà.

Esempio storico: Il problema che turbava i fisici riguardo alla combustione del Sole era legato alla sua durata. Se il Sole fosse stato alimentato da combustibile chimico (carbone, idrogeno, metano), l'età del sistema solare sarebbe stata solo di qualche milione di anni, non miliardi. La spiegazione arrivò solo con la fisica nucleare e quantistica.

4.2 Particella soggetta ad un gradino di potenziale

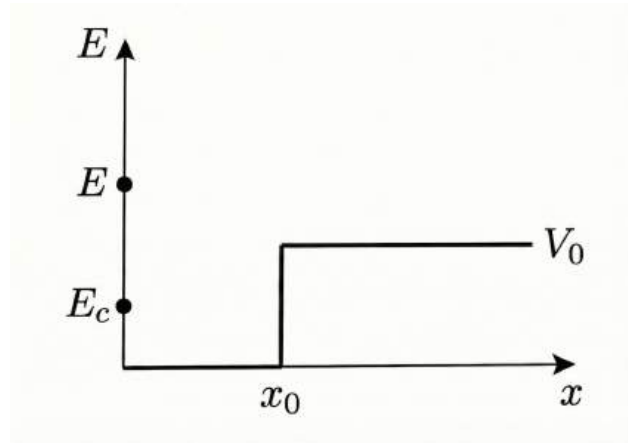


Figura 4.1: Gradino potenziale

Consideriamo le forze agenti sulla particella lungo l'asse x . Assumiamo che il potenziale sia nullo prima del gradino. Il gradino può essere immaginato come un piano inclinato molto ripido. Se la particella possiede l'energia cinetica necessaria per superare il gradino, una volta sopra non subirà più alcuna forza (potenziale costante).

Importante: Da ora in poi è necessario ragionare in termini di *energie* e non più di forze, poiché nell'equazione di Schrödinger compare esplicitamente l'energia potenziale.

Distinguiamo due casi rispetto all'energia del gradino V_0 :

1. **Caso Classico** $E_{cn} < V_0$: La particella non supera la barriera. Probabilità di rimbalzo pari a 1.
2. **Caso Classico** $E_{cn} > V_0$: La particella supera la barriera e diminuisce la sua velocità.

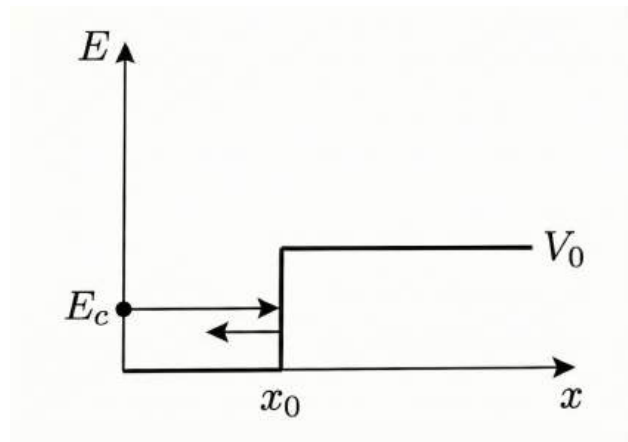


Figura 4.2: Caso Classico $E_{cn} < V_0$

Valutiamo ora il primo caso ($E < V_0$) in ambito quantistico. Dividiamo l'asse x in due regioni:

- **Regione I:** $(-\infty, 0)$
- **Regione II:** $(0, +\infty)$

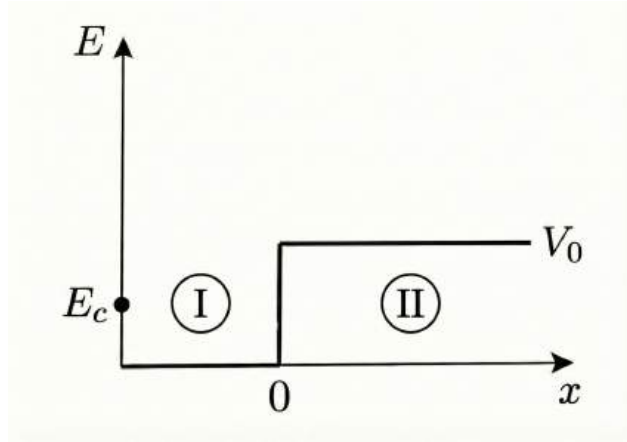


Figura 4.3: Divisione delle regioni

Scriviamo l'equazione differenziale nelle due regioni. Poniamo lo zero dell'energia nella Regione I.

Regione I ($x < 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} = E \psi_I$$

Riscrivendo:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} = -E \psi_I(x) \implies \frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E \psi_I(x)$$

Regione II ($x > 0$):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} = E \psi_{II} - V \psi_{II}(x)$$

Notare la discontinuità del potenziale in 0. Riscrivendo:

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E) \psi_{II}(x)$$

Definiamo le costanti:

$$\alpha^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \quad \text{e} \quad \gamma^2 = \frac{2m}{\hbar^2} (V - E)$$

Le equazioni diventano:

$$\text{Regione I: } \frac{\partial^2 \psi_I(x)}{\partial x^2} = -\alpha^2 \psi_I(x)$$

$$\text{Regione II: } \frac{\partial^2 \psi_{II}(x)}{\partial x^2} = \gamma^2 \psi_{II}(x)$$

Le soluzioni generali sono:

$$\psi_I(x) = A e^{i\alpha x} + B e^{-i\alpha x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\gamma x} + D e^{\gamma x} \quad (x > 0)$$

Poiché la particella deve essere fisicamente accettabile (funzione d'onda a quadrato sommabile), la funzione non può divergere a $+\infty$. Pertanto, imponiamo $D = 0$.

$$\psi_{II}(x) = C e^{-\gamma x}$$

4.2.1 Condizioni di raccordo

Per trovare i coefficienti, imponiamo le condizioni di continuità della funzione d'onda e della sua derivata prima nel punto di discontinuità ($x = 0$).

1. **Continuità della funzione:**

$$\lim_{x \rightarrow 0} \psi_I = \lim_{x \rightarrow 0} \psi_{II} \implies \psi_I(0) = \psi_{II}(0) \implies A + B = C$$

2. **Continuità della derivata:**

$$\left. \frac{\partial \psi_I}{\partial x} \right|_0 = \left. \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \right|_0 \implies i\alpha A - i\alpha B = -\gamma C$$

Risolvendo il sistema per calcolare B e C in funzione di A :

$$\begin{cases} B = \frac{(i\alpha + \gamma)}{(i\alpha - \gamma)} A \\ C = \frac{2i\alpha}{(i\alpha - \gamma)} A \end{cases}$$

Sostituendo nelle equazioni d'onda originali:

$$\psi_I(x) = Ae^{i\alpha x} + \frac{(i\alpha + \gamma)}{(i\alpha - \gamma)} Ae^{-i\alpha x} \quad (x < 0)$$

$$\psi_{II}(x) = \frac{2i\alpha}{(i\alpha - \gamma)} Ae^{-\gamma x} \quad (x > 0)$$

4.2.2 Interpretazione fisica

A rappresenta l'ampiezza dell'onda incidente (progressiva). B rappresenta l'ampiezza dell'onda riflessa (regressiva).

Se calcoliamo il modulo quadro dell'onda incidente (sapendo che $|\psi_{Inc}(x)|^2 = 1$):

$$|\psi_{Inc}(x)|^2 = |Ae^{i\alpha x}|^2 = |A|^2 = 1 \implies A = 1$$

Questo indica che abbiamo probabilità 1 che la particella colpisca la barriera.

L'equazione di Schrödinger introduce un comportamento diverso rispetto alla fisica classica. Anche se $E_c < V_0$, esiste una penetrazione nella barriera. Tuttavia, analizzando il coefficiente di riflessione B , notiamo che $|B|^2 = \left| \frac{i\alpha + \gamma}{i\alpha - \gamma} \right|^2$. (Nota: Se α e γ sono reali, il modulo è 1, ma c'è uno sfasamento. La parte interessante è la presenza della funzione d'onda nella Regione II).

Osserviamo la Regione II:

$$\psi_{II}(x) \propto e^{-\gamma x}$$

C'è una probabilità non nulla che la particella penetri nella regione classicamente proibita, anche se la probabilità decade esponenzialmente.

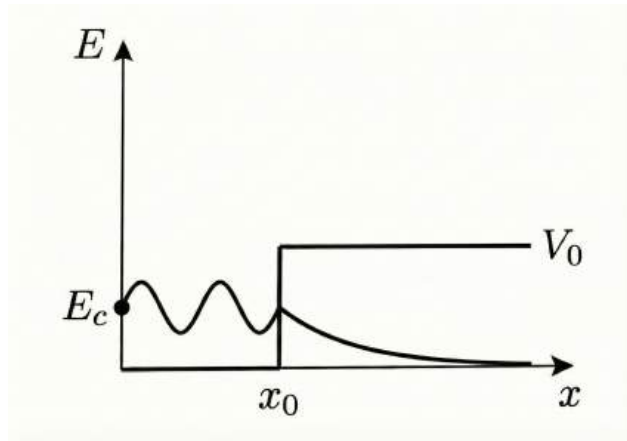


Figura 4.4: Decadimento esponenziale

Lo smorzamento dell'energia nella zona II dipende da γ :

$$\gamma = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)}$$

Più grande è γ , più rapidamente la funzione d'onda si smorza.

Questo fenomeno contraddice la fisica classica:

- Classica: Probabilità di rimbalzo = 1, Probabilità di superare la barriera = 0.
- Quantistica: C'è una probabilità > 0 di trovare la particella nella barriera (effetto tunnel se la barriera fosse finita).

Nel mondo reale macroscopico la fisica classica funziona perché la massa m al numeratore in γ è grande e \hbar è piccolissimo, rendendo γ enorme e la penetrazione nulla. Tuttavia, per masse piccole come l'elettrone, γ può essere piccolo abbastanza da permettere effetti quantistici significativi.

Se il gradino ha larghezza finita (barriera), esiste la possibilità concreta che la particella attraversi la barriera e emerga nella "Regione III", comportandosi come nella Regione I ma con ampiezza minore.

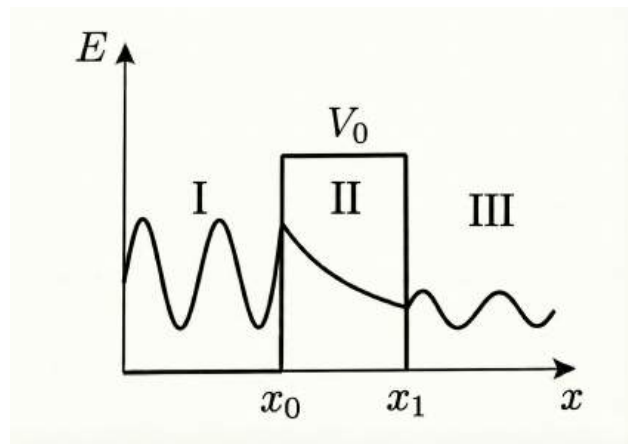


Figura 4.5: Effetto Tunnel attraverso barriera finita

4.3 Applicazioni: Il ragionamento di Gamow-Bethe

Consideriamo l'atomo di Elio, composto da due protoni. Essendo cariche positive, i protoni si respingono per la forza di Coulomb. È quindi sorprendente che il nucleo di Elio sia stabile. Gamow e Bethe ipotizzarono l'esistenza di una forza (Forza Nucleare Forte) enormemente più grande della repulsione coulombiana, capace di tenere legati i nucleoni.

Questa forza crea una "buca di potenziale" molto profonda e stretta (raggio circa 10^{-15} m). Quando due protoni (es. da due atomi di idrogeno) si avvicinano, devono superare la barriera coulombiana per cadere nella buca di potenziale e rimanere legati (fusione). Classicamente servirebbe un'energia enorme (temperature di miliardi di gradi). Tuttavia, la fusione avviene nelle stelle a temperature inferiori grazie all'**Effetto Tunnel**: avvicinandosi a sufficienza, i protoni hanno una probabilità non nulla di attraversare la barriera di potenziale e fondersi.

Il concetto di buca e barriera di potenziale spiega:

- La fusione nucleare nelle stelle.
- La fissione nucleare (processo opposto) negli elementi trans-uranici, dove le particelle scappano dalla buca per effetto tunnel (decadimento α).

4.4 Principi della Misura e Indeterminazione

Esaminiamo gli ultimi tre principi fondamentali della fisica quantistica:

1. Principio del collasso della funzione d'onda.
2. Principio di indeterminazione (Heisenberg).
3. Principio di complementarità.

Tutti questi principi derivano dall'evidenza sperimentale e dalla struttura matematica della teoria.

4.4.1 Esperimento pensato e formalismo

Ipotizziamo una massa puntiforme m con energia potenziale $V(\vec{r})$, da cui ricaviamo la funzione d'onda $\Psi(\vec{r})$. Sia $F(\vec{r}, \vec{p})$ una grandezza fisica. Per estrarre informazioni dall'equazione d'onda, associamo alla grandezza fisica un operatore \hat{F} . Le regole di corrispondenza sono:

- Posizione: $\vec{r} \rightarrow \vec{r}$
- Quantità di moto: $\vec{p} \rightarrow -i\hbar\vec{\nabla}$

Quindi l'operatore è $\hat{F} = F(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla})$.

Valore Teorico (Valore atteso):

$$\langle F \rangle_{Th} = \int_{\Omega} \Psi^* (\hat{F} \Psi) d\vec{r}$$

Valore Sperimentale: Se misuro F tante volte ($N \rightarrow \infty$) nello spazio fisico reale:

$$\langle F \rangle_{sp} = \frac{\sum_{i=1}^N f_i}{N} = \sum_j f_j \left(\frac{n_j}{N} \right)$$

dove f_j sono i valori misurati e $\frac{n_j}{N}$ rappresenta la frequenza relativa. Se la teoria è corretta, deve valere l'uguaglianza:

$$\langle F \rangle_{Th} = \langle F \rangle_{sp}$$

4.4.2 L'origine dell'incertezza

Nella fisica classica, l'incertezza è attribuita all'esperimento (errore di misura). Lo scarto quadratico medio sperimentale è:

$$(\Delta F)_{sp}^2 = \sum_j \frac{(f_j - \langle F \rangle_{sp})^2}{N}$$

Gli errori classici derivano da:

- Errore casuale
- Errore sistematico (es. calibrazione)
- Sensibilità dello strumento

Idealmente, con strumenti perfetti e infinite misure, l'errore classico tenderebbe a zero (assioma del determinismo).

Tuttavia, Heisenberg ipotizzò che esista un'indeterminazione teorica intrinseca, dovuta alla natura ondulatoria e discreta della realtà. Egli propose una simmetria tra l'errore sperimentale e quello teorico (quantistico):

$$(\Delta F)_{quant}^2 = \int \Psi^* (\hat{F} - \langle F \rangle)^2 \Psi d\vec{r}$$

Questa grandezza è il duale teorico dello scarto quadratico medio sperimentale.

4.4.3 Condizione di incertezza nulla

Heisenberg si chiese: esistono situazioni in cui l'integrale dell'indeterminazione vale zero?

$$(\Delta F)_{quant}^2 = \int \Psi^* (\hat{F} - \langle F \rangle)^2 \Psi d\vec{r} = 0$$

Sfruttando il fatto che gli operatori fisici sono Hermitiani ($\int \Psi^* (\hat{A}\Psi) = \int (\hat{A}\Psi)^* \Psi$), possiamo riscrivere l'integrale:

$$(\Delta F)_{quant}^2 = \int [(\hat{F} - \langle F \rangle)\Psi]^* [(\hat{F} - \langle F \rangle)\Psi] d\vec{r} = \int |(\hat{F} - \langle F \rangle)\Psi|^2 d\vec{r} = 0$$

Affinché l'integrale di un modulo quadro sia nullo, l'argomento deve essere nullo ovunque:

$$(\hat{F} - \langle F \rangle)\Psi = 0 \implies \boxed{\hat{F}\Psi = f\Psi}$$

dove abbiamo indicato il valore medio $\langle F \rangle$ con l'autovalore f .

Questa è un'equazione agli autovalori. Quando la funzione d'onda Ψ è un autovettore dell'operatore \hat{F} (cioè $\Psi = \psi_i$), allora l'errore teorico si annulla.

4.4.4 Espansione in autostati e Collasso

Cosa succede se la soluzione dell'equazione di Schrödinger Ψ non è un autovettore dell'osservabile che stiamo misurando ($\Psi \neq \psi_i$)? Usiamo il principio di sovrapposizione: qualsiasi stato può essere scritto come combinazione lineare degli autovettori:

$$\Psi = \sum_i a_i \psi_i$$

Sfruttando l'ortonormalità degli autovettori ($\int \psi_i^* \psi_j = \delta_{ij}$), ricalcoliamo il valore medio teorico:

$$\langle F \rangle_{Th} = \int \Psi^* \hat{F} \Psi d\vec{r} = \int \left(\sum_j a_j \psi_j \right)^* \hat{F} \left(\sum_i a_i \psi_i \right) d\vec{r}$$

Sapendo che $\hat{F}\psi_i = f_i\psi_i$:

$$= \sum_{i,j} a_j^* a_i f_i \int \psi_j^* \psi_i d\vec{r} = \sum_i |a_i|^2 f_i$$

Confrontando il risultato teorico con quello sperimentale:

$$\text{Teoria: } \sum_i |a_i|^2 f_i \longleftrightarrow \text{Sperimentale: } \sum_j \frac{n_j}{N} f_j$$

Deduciamo che:

- Gli **autovalori** f_i sono gli unici valori possibili che si possono ottenere da una misura.
- I coefficienti $|a_i|^2$ rappresentano la **probabilità** (frequenza relativa $\frac{n_j}{N}$) di ottenere quel determinato autovalore.

Il Principio del Collasso: Prima della misura, il sistema è in una sovrapposizione di stati:

$$\Psi = \sum_i a_i \psi_i$$

Quando effettuiamo la misura (il sistema interagisce con l'apparato/universo), la funzione d'onda "collapsa" istantaneamente su uno specifico autovettore ψ_i corrispondente al valore misurato f_i :

$$\Psi \xrightarrow{\text{Misura } F} \psi_i$$

Da qui deriva il principio del collasso della funzione d'onda: l'atto della misura perturba irrimediabilmente il sistema, costringendolo a manifestarsi in uno dei suoi stati.

Capitolo 5

Venerdì 5 dicembre

5.1 Introduzione: Visualizzabilità e Modelli

La lezione inizia con un confronto tra la fisica classica e quella quantistica. Mentre la matematica classica descrive sistemi spesso visualizzabili intuitivamente, la matematica della fisica quantistica descrive sistemi non visualizzabili, nemmeno mentalmente; al più possiamo costruirne un'immagine approssimata. Un esempio di successo di questa descrizione astratta è la tavola periodica degli elementi chimici, la cui struttura viene spiegata e predetta dall'equazione di Schrödinger.

5.2 Teoria della misura

5.2.1 Dal sistema classico a quello quantistico

Consideriamo un sistema fisico formato da una massa puntiforme m dotata di carica q . Questa massa interagisce con forze conservative derivanti da un potenziale $V(\vec{r})$. Nella fisica classica, possiamo desumere le forze direttamente dall'energia potenziale: $V(\vec{r}) \rightarrow \vec{F} = \nabla V(\vec{r})$.

La fisica moderna, invece, ci dice che la nostra massa evolve come un'onda descritta dalla funzione $\psi(\vec{r}, t)$. L'equazione fondamentale è:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V \psi \implies \hat{H} \psi = E \psi$$

Per passare alle grandezze fisiche, utilizziamo le regole di corrispondenza degli operatori:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}; \quad \vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$$

Da cui una generica grandezza fisica diventa un operatore:

$$F(\vec{r}, \vec{p}) \rightarrow \hat{F}(\vec{r}, -i\hbar \vec{\nabla})$$

5.2.2 Il Valore Medio e l'Indeterminazione

Il valore medio di una misura quantistica si calcola teoricamente come:

$$\int_{\Omega} \psi^* (\hat{F} \psi) \delta \vec{r} = \langle F \rangle_q$$

Sperimentalmente, per ottenere questo valore, dobbiamo effettuare molte misure (N) della grandezza f :

$$\langle F \rangle_q = \frac{\sum_{i=1}^N f_i}{N} \pm (\Delta F)_{sp}$$

Qui sorge una differenza fondamentale. A destra dell'equazione abbiamo grandezze sperimentali con un errore $(\Delta F)_{sp}$, che rappresenta un limite strumentale o umano; teoricamente, con strumenti perfetti, potremmo eliminare questo errore. A sinistra, invece, abbiamo il valore medio quantistico che porta con sé un'indeterminazione intrinseca della natura, non eliminabile.

$$\langle F \rangle_q \pm (\Delta F)_q = \frac{\sum_{i=1}^N f_i}{N} \pm (\Delta F)_{sp}$$

Il ragionamento di Heisenberg mette a confronto il valore medio sperimentale con quello teorico:

$$\langle F \rangle_{sp} = \frac{\sum_{i=1}^N f_i}{N} \quad \text{vs} \quad \langle F \rangle_q = \int_{\Omega} \psi^* (\hat{F} \psi) \delta \vec{r}$$

Noi prediligiamo la fisica classica perché fa coincidere lo spazio della natura con la nostra descrizione matematica (spazio Euclideo, almeno in prima approssimazione). Nella fisica quantistica, invece, il sistema è descritto in uno spazio vettoriale astratto (spazio di Hilbert), rendendo impossibile visualizzare una "traiettoria" classica; esiste solo la funzione ψ .

L'incertezza classica (deviazione standard) è definita come:

$$(\Delta F_{sp})^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (f_i - \langle F \rangle_{sp})^2}{N}$$

Integrando nel formalismo quantistico, otteniamo una forma analoga per l'indeterminazione quantistica:

$$(\Delta F_q)^2 = \int_{\Omega} \psi^* (\hat{F} - \langle F \rangle_q)^2 \psi \delta \vec{r}$$

5.2.3 Autovalori e Autovettori

Se l'indeterminazione è nulla, ovvero $(\Delta F)_q = 0$, allora la funzione d'onda coincide con un autovettore: $\psi = \psi_i$ tale che $\hat{F} \psi_i = f_i \psi_i$.

Nella maggior parte dei casi, però, l'indeterminazione non è zero. Possiamo allora esprimere ψ come sovrapposizione lineare in uno spazio vettoriale ortogonale: $\psi = \sum_i q_i \psi_i$. Il valore medio diventa:

$$\langle F \rangle_q = \int \psi^* \hat{F} \psi \delta \vec{r} = \int \left(\sum_j q_j \psi_j \right)^* \hat{F} \left(\sum_i q_i \psi_i \right) \delta \vec{r} = \sum_{i,j} a_j^* \left(\int \psi_j^* \hat{F} \psi_i \delta \vec{r} \right) a_i$$

Questo formalismo matriciale:

$$(a_1 \quad a_2 \quad \dots \quad a_j \quad \dots) M_f \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_i \\ \vdots \end{pmatrix}$$

rappresenta il modello con cui Heisenberg descrive la fisica quantistica (Meccanica delle Matrici), che è equivalente all'equazione d'onda di Schrödinger.

5.2.4 Il Formalismo di Dirac

Dirac introdusse una notazione vettoriale astratta per unificare la meccanica delle matrici (Heisenberg) e la meccanica ondulatoria (Schrödinger). In questo formalismo, lo stato fisico del sistema è rappresentato da un vettore astratto detto **ket**, indicato con il simbolo:

$$|\psi\rangle$$

Questo vettore vive in uno spazio vettoriale complesso.

Il legame tra la descrizione astratta e quella “calcolabile” di Schrödinger risiede nella definizione del prodotto scalare. In meccanica ondulatoria, il prodotto scalare tra due funzioni è definito dall'integrale:

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int_{\Omega} \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r}) d\vec{r}$$

Dirac generalizza questo concetto introducendo il **bra** $\langle\psi|$ (il vettore duale). L'espressione $\langle\psi|\psi\rangle$ **bra-ket** rappresenta il prodotto scalare intrinseco.

Nota culturale: Il formalismo di Dirac è potentissimo per i ragionamenti teorici e per visualizzare la struttura algebrica della teoria. Tuttavia, per effettuare i “conti veri” ed espliciti, si passa solitamente alla versione di Schrödinger, trasformando i bra-ket in integrali.

5.2.5 Confronto con i dati sperimentali

Riprendiamo l'espressione del valore medio e confrontiamo la previsione teorica con la statistica sperimentale. L'espressione teorica, basata sull'espansione in autovettori, deve coincidere con la media pesata delle misure sperimentali:

$$\langle F \rangle = \sum_i |a_i|^2 f_i \equiv \sum_j \frac{n_j}{N} f_j$$

Affinché questa identità sia valida, deve esserci una corrispondenza diretta tra i termini:

1. **Gli autovalori:** $f_i \equiv f_j$ (i valori possibili teorici coincidono con i risultati misurabili).
2. **Le probabilità:** $|a_i|^2 \equiv \frac{n_j}{N}$ (il modulo quadro del coefficiente teorico corrisponde alla frequenza relativa misurata sperimentalmente).

5.2.6 Il Principio del Collasso

Quando effettuiamo una misura, il sistema “collassa” su uno degli autovettori:

$$\psi = \sum_i a_i \psi_i \xrightarrow[\text{F}]{\hat{F}} f_k \psi_k$$

Otteniamo il k-esimo autovalore f_k e, da quel momento in poi, la funzione d'onda del sistema diventa ψ_k . La probabilità di ottenere questo specifico autovalore è data da $|a_k|^2$.

Il principio del collasso è spesso considerato problematico perché implica una perdita di informazione. A differenza della termodinamica, dove la perdita di informazione è dovuta alla nostra ignoranza statistica (mancanza di dati su tutte le particelle), qui la perdita è fondamentale e irreversibile, legata all'atto stesso di osservare.

5.3 Misura simultanea di più grandezze

Vogliamo misurare due grandezze fisiche, \hat{F} e \hat{G} , dello stesso sistema. Le due misure proietteranno il sistema su set di autovalori differenti:

$$\psi \xrightarrow{\hat{F}} f_k \psi_k$$

$$\psi \xrightarrow{\hat{G}} g_i \phi_i$$

Se misuriamo \hat{F} e subito dopo \hat{G} , il sistema continua a saltare tra stati non definiti, creando un fondo di indeterminazione. Tuttavia, esiste un caso particolare in cui è possibile misurare entrambe le grandezze con precisione infinita: quando le due grandezze condividono lo **stesso set di autovettori**.

$$\hat{F}\psi_k = f_k\psi_k \quad \text{e} \quad \hat{G}\psi_k = g_k\psi_k$$

Moltiplichiamo la prima equazione per \hat{G} e la seconda per \hat{F} :

$$\hat{G}\hat{F}\psi_k = \hat{G}f_k\psi_k = g_k f_k \psi_k$$

$$\hat{F}\hat{G}\psi_k = \hat{F}g_k\psi_k = f_k g_k \psi_k$$

Facendo la differenza:

$$(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G})\psi_k = 0$$

Questa condizione vale sempre solo se gli operatori commutano, la natura ci permette di misurarli simultaneamente con precisione infinita:

$$(\hat{G}\hat{F} - \hat{F}\hat{G}) = [\hat{G}, \hat{F}] = 0 \implies \hat{G}\hat{F} = \hat{F}\hat{G}$$

5.3.1 Esempio di non commutazione: Posizione e Momento

Consideriamo posizione x e momento $p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$. Vediamo se commutano applicandoli a una funzione di prova:

$$[x(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) - (-i\hbar \frac{\partial}{\partial x})x] = -i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} + i\hbar + i\hbar x \frac{\partial}{\partial x} = i\hbar \neq 0$$

Poiché il risultato è diverso da zero, la natura non permette la misura simultanea precisa di posizione e momento (Principio di Indeterminazione di Heisenberg).

5.3.2 Insieme Completo di Osservabili

Consideriamo l'Hamiltoniana del sistema, definita dalla massa m e dal potenziale $V(\vec{r})$. Per stati stazionari (energia indipendente dal tempo), vale l'equazione agli autovalori:

$$\hat{H}\psi_i = E_i\psi_i$$

Per ogni sistema fisico è possibile individuare un insieme di grandezze misurabili simultaneamente con precisione infinita. Se troviamo un set di operatori che commutano tra loro (ad esempio l'Hamiltoniana e altre osservabili \hat{A}, \hat{B}, \dots), possiamo definire un vettore di numeri quantici che descrive completamente lo stato:

$$\text{Set Massimale} = \begin{pmatrix} \hat{H} \\ \hat{A} \\ \hat{B} \\ \vdots \end{pmatrix} \implies \text{Autovalori: } \begin{pmatrix} E_n \\ a_n \\ b_n \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Questo è chiamato **Insieme Completo di Osservabili che Commutano**. Esso rappresenta la *massima informazione fisica* che possiamo conoscere del sistema in un dato istante. Esistono altri set di osservabili (che non commutano con il primo) che sono **complementari** ed esclusivi: scegliere di misurare un set con precisione infinita comporta necessariamente la perdita di informazione (indeterminazione) sull'altro.

5.3.3 Problemi dell'interpretazione di Copenaghen

L'interpretazione classica (Copenaghen) presenta aspetti controintuitivi, come il collasso istantaneo della funzione d'onda:

$$\psi_2 \leftarrow \text{particella } \phi_1 \rightarrow \psi_1$$

Se misuro ψ_1 , lo stato ψ_2 collassa istantaneamente indipendentemente dalla distanza. Questo sembra violare il limite della velocità della luce ed è alla base del fenomeno dell'*Entanglement*. Einstein e Schrödinger notarono che lo stato di una particella poteva influenzare istantaneamente l'altra. Oggi questo fenomeno è confermato sperimentalmente ed è alla base della crittografia quantistica.

5.4 Riassunto dei Principi

I principi fondamentali discussi possono essere riassunti come segue:

- **Principio di corrispondenza (Stato del sistema):** Il vettore di stato descrive completamente il sistema e la sua evoluzione è governata dall'equazione di Schrödinger.
- **Significato probabilistico (Interpretazione di Copenaghen):** Il modulo quadro della funzione d'onda rappresenta una densità di probabilità. Affinché ciò sia valido, le funzioni d'onda devono appartenere alla classe delle funzioni a quadrato sommabile (L^2).
- **Costruzione degli Operatori:** Le grandezze fisiche sono rappresentate da operatori lineari, ottenuti dalle relazioni classiche attraverso la seguente regola di sostituzione:

$$F_{CL} = F(\vec{r}, \vec{p}, t) \longrightarrow \hat{F}_q = \hat{F}(\vec{r}, -i\hbar\vec{\nabla}, t)$$

- **Misura e Valore di Aspettazione:** Le grandezze fisiche relative al sistema si estraggono dalla funzione d'onda calcolando il valore medio dell'operatore:

$$\langle F \rangle = \int_{\Omega} \psi^*(\vec{r}, t) \left[\hat{F} \psi(\vec{r}, t) \right] d\vec{r}$$

- **Principio del collasso della funzione d'onda**
- **Principio di indeterminazione (Heisenberg).**
- **Principio di complementarità (Bohr).**

Possiamo condensare la teoria in tre assiomi fondamentali:

1. Assioma dell'osservabile:

Esiste un «vettore» ψ il quale contiene in sé tutte le informazioni che su di una particella si possono conoscere, precisamente esso permette di calcolare per ogni grandezza fisica, detta secondo Dirac *osservabile*, i valori possibili risultanti da una misura (che sono ovviamente reali) e le corrispondenti probabilità che la grandezza ha di assumere tali valori ad un generico istante di tempo.

2. Assioma dell'operatore:

Ad ogni osservabile si fa corrispondere, nella formulazione matematica, un operatore hermitiano il quale ha autovalori reali, l'insieme di tutti gli autovalori costituisce l'insieme di tutti i valori numerici che si possono trovare in una misura dell'osservabile corrispondente, mentre l'insieme degli autovettori corrispondenti rappresentano gli autostati del sistema (la particella) relativi a tali risultati di un processo di misura.

3. **Assioma dell'evoluzione:**

L'evoluzione spazio-temporale di un sistema fisico è regolata dall'equazione di Schroedinger, purché all'istante iniziale lo stato di un sistema fisico sia determinato mediante una osservazione del maggior numero possibile di osservabili tra loro compatibili ed indipendenti; tale osservazione è detta osservazione massima.

Capitolo 6

Lunedì 15 dicembre

6.1 Introduzione

In questa sezione affrontiamo il problema della dimostrazione dell'equazione di Schrödinger applicata ai fenomeni tecnologici. La difficoltà principale di questo argomento non è tanto matematica, quanto concettuale: comprendere come si comportano gli elettroni all'interno di un materiale cristallino.

Lo scopo è dimostrare che tutte le proprietà studiate in precedenza discendono direttamente dall'equazione di Schrödinger. In questo contesto, a scala microscopica, l'equazione di Schrödinger sostituisce l'equazione di Newton.

Le proprietà chimico-fisiche e strutturali dei materiali solidi dipendono essenzialmente da due fattori:

1. La distribuzione delle particelle positive (nuclei) nello spazio.
2. Il moto degli elettroni (descritto secondo i principi della fisica moderna).

Nota metodologica. La matematica sottostante è estremamente complessa anche per problemi apparentemente semplici. Le equazioni differenziali necessarie sono state risolte analiticamente tra il 1700 e il 1800. In questa trattazione ci concentreremo sui passaggi fisici fondamentali derivati dall'analisi matematica, omettendo i passaggi puramente analitici e ripetitivi.

6.2 L'Elettrone in un Solido

Studiare il comportamento esatto di un elettrone in un solido reale sarebbe un compito quasi impossibile. La cristallografia è la branca che studia come gli atomi si distribuiscono per formare le molecole e i reticoli.

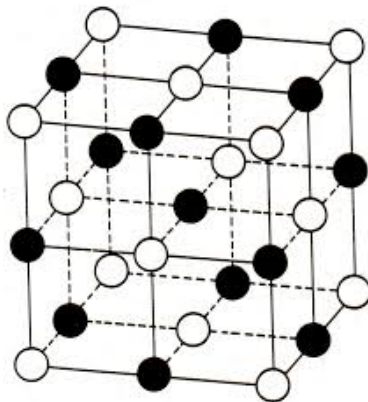


Figura 6.1: Rappresentazione schematica di un reticolo cristallino

Considerando i nuclei disposti nello spazio tridimensionale, un singolo elettrone possiede un'energia potenziale data da:

$$V(\vec{r}) = - \sum_t \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0|\vec{r} - \vec{r}_t|} + \text{repulsione coulombiana}$$

Poiché la repulsione coulombiana tra elettroni non è scrivibile in termini analitici semplici, il problema completo di Schrödinger risulta irrisolvibile senza approssimazioni.

6.2.1 Le 5 Ipotesi Semplificative

Per procedere, introduciamo 5 ipotesi che semplificano il modello. Queste limitazioni potranno essere rimosse *ex post* per recuperare la generalità necessaria.

1. **Forma del potenziale:** Il potenziale a cui è soggetto l'elettrone è approssimato da una schiera periodica di buche di potenziale (potenziale a gradino).
2. **Monodimensionalità:** Il problema viene inizialmente studiato in una sola dimensione.
3. **Dimensione infinita:** Si ipotizza che il solido abbia dimensioni infinite.
4. **Singolo elettrone:** Si considera il solido contenente un solo elettrone (trascurando le interazioni elettrone-elettrone).
5. **Temperatura zero** ($T = 0$ K): I nuclei sono considerati fissi nelle loro posizioni di equilibrio.

6.2.2 Analisi delle Ipotesi

Ipotesi I: Forma del Potenziale

Ipotizziamo una fila ordinata di nuclei. Il potenziale reale che l'elettrone percepisce a causa dell' i -esimo nucleo è:

$$V(\vec{r}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|x - x_0|}$$

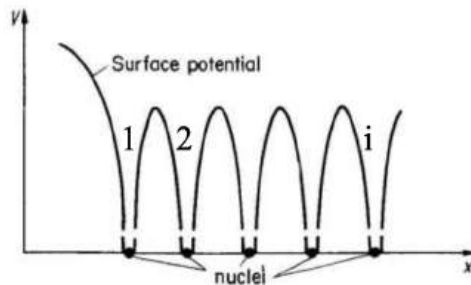


Figura 6.2: Andamento del potenziale coulombiano generato dai nuclei

Tramite il modello di Bohr, sappiamo che l'energia dello stato fondamentale è $E_1 = -13,6 \text{ eV}$ (ricordando che $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$). Se il nucleo ha Z protoni, l'energia scala come $E_i = -Z^2 \cdot 13,6 \text{ eV}$.

L'elettrone negli stati più profondi "vede" una barriera di potenziale molto ripida. Tuttavia, ci concentreremo sui fenomeni in cui l'elettrone si trova in queste posizioni profonde, ignorando i processi di ionizzazione (dove l'energia sarebbe vicina allo zero). Sostituiamo quindi la curva reale iperbolica con un modello a gradini (buche di potenziale finite).

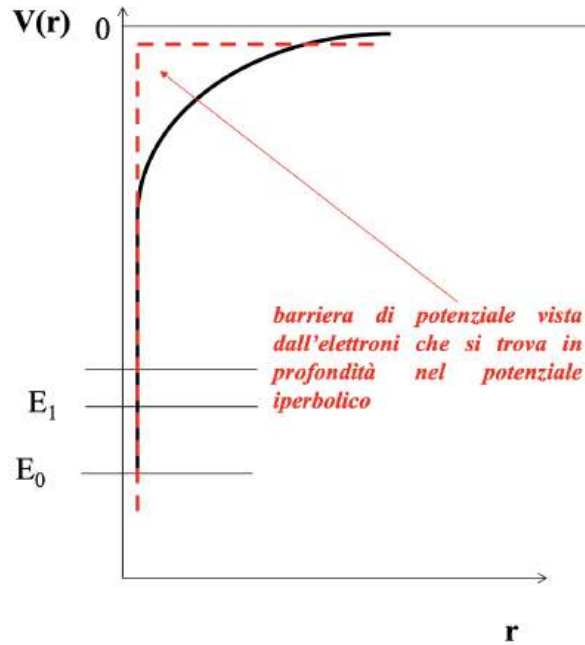


Figura 6.3: Approssimazione del potenziale a buche quadre periodiche

Convenzioni geometriche:

- Poniamo lo zero dell'energia dove questa è minima per l'elettrone.
- a : ampiezza della buca.
- b : larghezza della barriera (generalmente $b \ll a$).
- I nuclei sono immaginati al centro della buca di potenziale.

Altre Ipotesi

- **Monodimensionalità:** Studiamo l'elettrone lungo una direzione (es. asse x). Estenderemo il risultato a 3 dimensioni successivamente.
- **Solido Infinito:** La schiera di atomi va da $(-\infty, +\infty)$. Questo permette di sfruttare teoremi matematici validi su regioni infinite ed evitare condizioni al contorno complesse sulle superfici.
- **Singolo Elettrone:** Inizialmente l'elettrone interagisce solo con i nuclei.
- **Nuclei Fissi ($T = 0$ K):** Se $T > 0$, i nuclei vibrerebbero, spostando le buche di potenziale e rendendo il problema non risolvibile analiticamente. Questa è l'ipotesi più difficile da rimuovere, ma verrà gestita successivamente con la statistica di Fermi-Dirac.

6.3 Risoluzione Matematica

Dividiamo lo spazio in due regioni ripetute periodicamente:

- **Regione I:** Buca di potenziale ($V = 0$).
- **Regione II:** Barriera di potenziale ($V = V_0$).

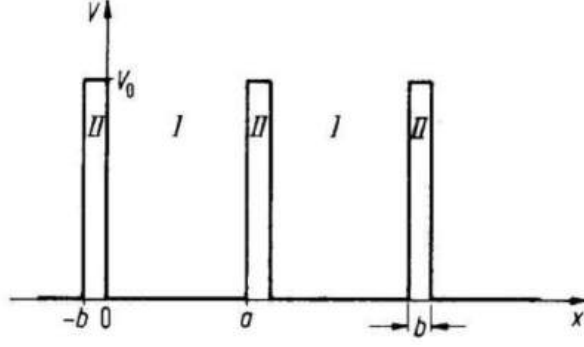


Figura 6.4: Suddivisione delle regioni per l'equazione di Schrödinger

Scriviamo l'equazione di Schrödinger $\hat{H}\psi = E\psi(x)$ per le due regioni.

Regione I:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi_I = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi_I$$

Regione II:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V_0 \psi(x) = E\psi(x) \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2}{dx^2} \psi_{II} = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2} \psi_{II}$$

6.3.1 Teorema di Bloch e Soluzione

Il potenziale è una funzione periodica con periodo $(a + b)$:

$$V(x) = V[x + (a + b)]$$

Questa periodicità deve riflettersi nella soluzione. Il matematico Bloch ha dimostrato che per un potenziale periodico, la funzione d'onda è fattorizzabile come:

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x)$$

Dove:

- $u(x)$ è una funzione spaziale con la stessa periodicità del potenziale $V(x)$.
- k è un parametro matematico (vettore d'onda, unità m^{-1}).

Definendo i parametri:

$$\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \quad \text{e} \quad \gamma^2 = \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}$$

Le equazioni differenziali diventano:

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_I = -\alpha^2 \psi_I$$

$$\frac{d^2}{dx^2} \psi_{II} = \gamma^2 \psi_{II}$$

Sostituendo la soluzione di Bloch nelle equazioni, otteniamo le equazioni per $u(x)$:

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (k^2 - \alpha^2)u = 0$$

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + 2ik \frac{du}{dx} - (k^2 + \gamma^2)u = 0$$

Imponendo le condizioni di continuità e derivabilità della funzione d'onda ai bordi delle barriere (convenientemente posti in $x = 0$ e $x = a$ grazie alla periodicità), otteniamo un sistema omogeneo di 4 equazioni in

4 incognite. Affinché esistano soluzioni non banali (ovvero affinché la particella esista), il determinante della matrice dei coefficienti deve essere nullo.

Dall'annullamento del determinante si ottiene la seguente relazione trascendente:

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} \sinh(\gamma b) \sin(\alpha a) + \cosh(\gamma b) \cos(\alpha a) = \cos[k(a + b)]$$

6.4 Approssimazioni e Risultato Finale

Per semplificare l'analisi fisica, imponiamo un'ulteriore approssimazione (potenziale a delta di Dirac), considerando barriere molto strette e molto alte ($b \rightarrow 0$, $V_0 \rightarrow \infty$).

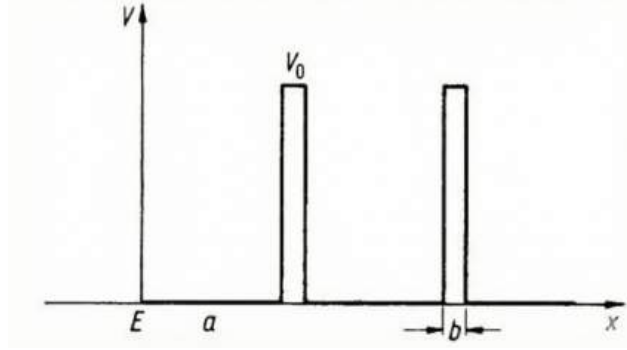


Figura 6.5: Limite per barriere sottili

Utilizziamo i limiti notevoli per $b \rightarrow 0$:

$$\sinh(\gamma b) \sim \gamma b \quad , \quad \cosh(\gamma b) \sim 1$$

L'equazione si semplifica in:

$$\frac{\gamma^2 - \alpha^2}{2\alpha\gamma} (\gamma b) \sin(\alpha a) + 1 \cdot \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

Considerando che per barriere alte $V_0 \gg E$, vale l'approssimazione $\gamma^2 \approx \frac{2mV_0}{\hbar^2} \gg \alpha^2$. L'equazione diventa:

$$\frac{\gamma^2}{2\alpha} (b) \sin(\alpha a) + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

Riorganizzando i termini (moltiplicando e dividendo per $a\alpha$) e sostituendo l'espressione di γ^2 :

$$\begin{aligned} \frac{ab\gamma^2}{2} \frac{\sin(\alpha a)}{a\alpha} + \cos(\alpha a) &= \cos(ka) \\ \frac{ab}{2} \left(\frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) \frac{\sin(\alpha a)}{a\alpha} + \cos(\alpha a) &= \cos(ka) \end{aligned}$$

Semplificando otteniamo l'equazione finale fondamentale per la struttura a bande:

$$\frac{abmV_0}{\hbar^2} \frac{\sin(\alpha a)}{a\alpha} + \cos(\alpha a) = \cos(ka)$$

6.4.1 Conclusione Fisica

Questa relazione rappresenta la condizione necessaria affinché l'equazione di Schrödinger ammetta soluzioni non banali. Analizzandone le implicazioni fisiche, emerge la struttura a bande del solido, che è una diretta conseguenza analitica di tale equazione.

Fisicamente, ciò significa che per i valori di energia che non soddisfano questa uguaglianza, non esistono stati stazionari permessi: l'elettrone non può, pertanto, possedere tali energie all'interno del reticolo cristallino.

Capitolo 7

Lezione 17 dicembre

7.1 Modello dell'Elettrone nel Solido Cristallino

In questa sezione si analizza il modello fisico dell'elettrone all'interno di un solido cristallino. Inizialmente, consideriamo l'interazione tra un elettrone e un nucleo carico. Tale interazione è descritta da una forza di Coulomb, associata a un potenziale di forma iperbolica (iperbole equilatera).

Tuttavia, gestire analiticamente un potenziale iperbolico per molti elettroni risulta complesso. Per questo motivo, si introducono delle astrazioni che semplificano il problema, pur allontanandosi dalla descrizione esatta reale:

- Si considera un singolo elettrone.
- Si ipotizza che l'elettrone non sia soggetto a un potenziale iperbolico continuo, ma a una schiera periodica di buche di potenziale.
- Si assume che il solido sia fermo, ovvero alla temperatura di 0 K.

Il potenziale è modellizzato come una sequenza di buche con periodicità $a + b$, dove a è la larghezza della buca (passo reticolare) e b la larghezza della barriera. Assumiamo che $a \gg b$, per cui $a + b \approx a$.

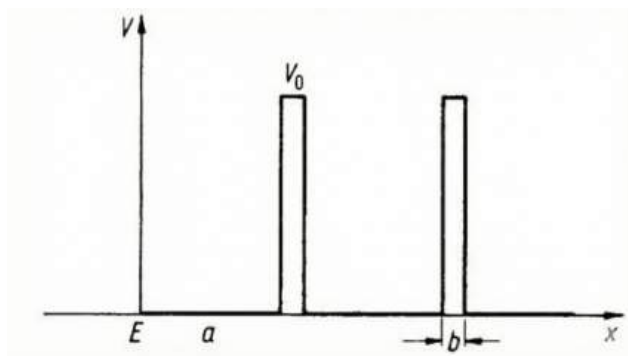


Figura 7.1: Buche di potenziale e passo reticolare

Risolvendo l'equazione di Schrödinger tramite le funzioni di Bloch e imponendo le condizioni di continuità e derivabilità nei punti critici, si ottiene un sistema di equazioni. Affinché esistano soluzioni non banali per l'elettrone, i parametri del problema devono soddisfare la seguente relazione analitica:

$$\frac{mab}{\hbar^2} V_0 \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(ka) \quad (7.1)$$

con $\alpha^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$.

7.2 Significato fisico del vettore d'onda k

Per comprendere il significato fisico del parametro k , consideriamo una condizione limite nota: quella della **particella libera**. Ponendo il potenziale $V_0 \rightarrow 0$, l'equazione precedente si semplifica:

$$\cos(\alpha a) = \cos(ka) \implies \alpha = k$$

Dalla definizione di α , otteniamo:

$$\alpha^2 = k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \implies E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Ricordando che classicamente $E = \frac{p^2}{2m}$, si deduce che la quantità di moto è $p = \hbar k$. In un reticolo cristallino (schiera ordinata di atomi), k rappresenta quindi la costante legata alla quantità di moto dell'elettrone.

Tornando al caso generale con $V_0 \neq 0$, e considerando un sistema monodimensionale ($k = k_x$), la relazione diventa:

$$\frac{mab}{\hbar^2} V_0 \frac{\sin(\alpha a)}{\alpha a} + \cos(\alpha a) = \cos(k_x a)$$

Questa equazione lega i parametri del sistema (m, a, V_0, \hbar) alle variabili fisiche (E, p_x). Essa definisce le coppie di valori (E, k) permesse: se la relazione è soddisfatta, l'elettrone può esistere nel solido; in caso contrario, l'equazione d'onda è nulla e lo stato non esiste.

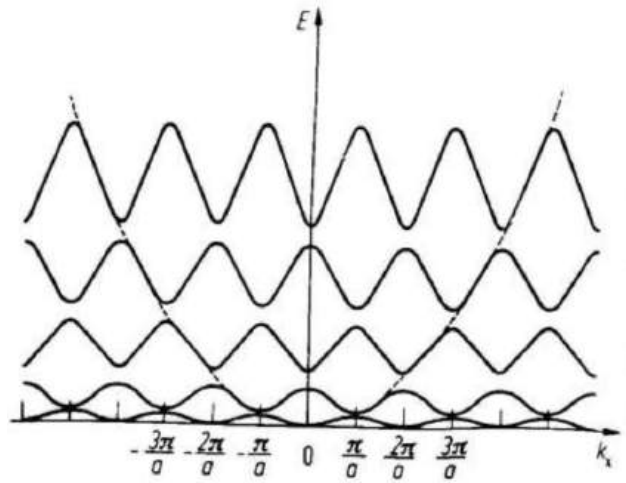


Figura 7.2: Grafico $E - k$

I punti del grafico rappresentano gli stati fisici possibili dell'elettrone. L'estensione dal caso 1D a 3D comporta semplicemente l'analisi del moto nelle tre direzioni, ottenendo curve analoghe.

7.3 Struttura a Bande e Spazio Reciproco

Analizziamo ora le proprietà di periodicità. Sia l'elettrone che la funzione d'onda possiedono una periodicità spaziale legata al passo reticolare a :

$$\psi(x, k) = \psi\left(x, k + \frac{2\pi}{a}\right)$$

È sufficiente studiare lo stato fisico nell'intervallo $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$, poiché estendere il dominio non fornisce informazioni aggiuntive. Questa regione è chiamata **Zona di Brillouin**.

Nel solido, la quantità di moto è limitata dalla natura dell'equazione di Schrödinger. Anche se le grandezze fisiche coincidono, si dovrebbe parlare di **pseudo-quantità di moto** per evidenziare le proprietà quantistiche

reticolari. L'energia E non può crescere all'infinito in modo continuo; le limitazioni hanno senso finché $E < V_0$ (energia di ionizzazione).

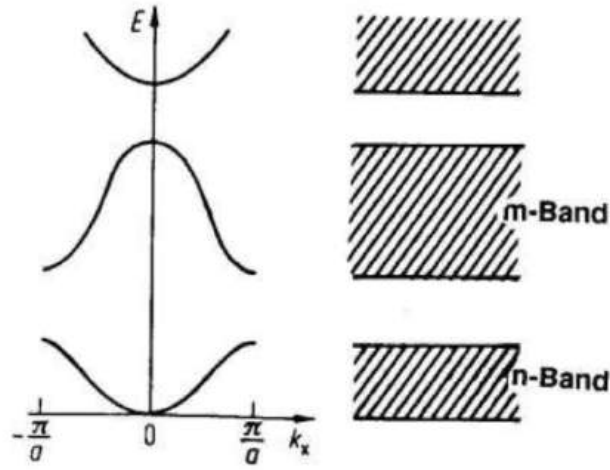


Figura 7.3: Grafico onde/bande

Ognuna delle oscillazioni permesse nel grafico $E - k$ è definita "**Banda di energia**". L'insieme dei grafici costituisce lo **schema a bande** dell'elettrone. Il sistema descritto dalle coordinate k_x, k_y, k_z si trova nello **spazio reciproco** (utilizzato dai fisici), distinto dallo spazio reale (utilizzato prevalentemente in ingegneria per i dispositivi elettronici).

Le zone di energia permesse sono le bande, mentre le zone in cui non esistono soluzioni sono dette gap o bande proibite.

7.4 Quantizzazione: dal solido infinito al finito

Consideriamo ora un solido di dimensioni finite, sezionandolo in cubetti identici. La lunghezza del solido sia $L = Na$, con N intero.

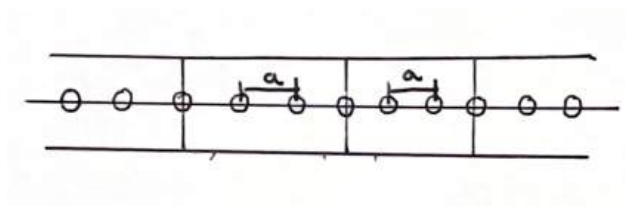


Figura 7.4: Solido 1-dimensionale sezionato

La funzione d'onda è del tipo $\psi(x) = e^{ikx}u(x)$. Le proprietà fisiche devono ripetersi dopo una lunghezza L :

$$\psi(x) = \psi(x + L) \implies e^{ikx}u(x) = e^{ik(x+L)}u(x + Na)$$

Essendo $u(x)$ periodica con periodo a , si ha $u(x) = u(x + Na)$. Ne consegue:

$$e^{ikx} = e^{ik(x+L)} \implies 1 = e^{ikL} = \cos(kL) + i \sin(kL)$$

Questa condizione è verificata solo per valori discreti di k :

$$kL = n2\pi \quad \text{con } n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Da cui si ricava la quantizzazione di k :

$$k_x = n \frac{2\pi}{L}$$

Passando a un solido finito, la quantità di moto non può assumere qualsiasi valore, ma è discretizzata. Tuttavia, la distanza tra due stati consecutivi è estremamente piccola. Considerando il rapporto tra la dimensione macroscopica L e il passo reticolare a :

$$\frac{2\pi/a}{2\pi/L} = \frac{L}{a} \approx \frac{10^{-1}\text{m}}{10^{-10}\text{m}} \sim 10^9$$

Poiché i punti sono densissimi, possiamo trattare le curve come continue (approssimazione del continuo) anche se fisicamente le leggi variano nel discreto.

7.5 Riempimento delle Bande e Classificazione dei Materiali

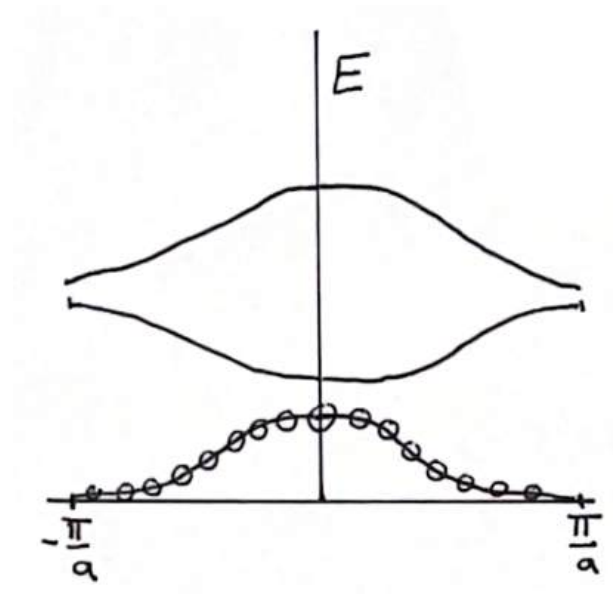


Figura 7.5: Riempimento bande]

Il numero di stati (punti) disponibili in una banda è dato da $L/a = N_{\text{atomi}}$. All'equilibrio termodinamico, gli elettroni occupano gli stati a energia minima. Quando aggiungiamo più elettroni, essi "vedono" lo stesso potenziale e obbediscono alla stessa equazione di Schrödinger.

Tuttavia, per il **Principio di Esclusione di Pauli**, ogni stato può ospitare al massimo 2 elettroni (spin up $+\frac{1}{2}$ e spin down $-\frac{1}{2}$). Il set di caratteristiche dell'elettrone nel solido è quindi definito da 5 parametri: (E, k_x, k_y, k_z, s) .

Nota: un atomo libero viene definito con 4 parametri (n, l, ml, s).

7.5.1 Esempi di riempimento

- **Bande basse:** Le prime bande (es. derivanti dagli orbitali 1s, 2s) si riempiono completamente con $2N_{\text{atomi}}$ elettroni ciascuna.
- **Sodio (Na, 11 elettroni):** Si riempiono le prime bande. Rimanendo da sistemare $1N_{\text{atomi}}$ elettroni, l'ultima banda sarà riempita solo a metà. La linea di demarcazione tra stati pieni e vuoti è detta **Energia di Fermi** (o linea di Fermi). Questo avviene anche a 0 K a causa del principio di Pauli.

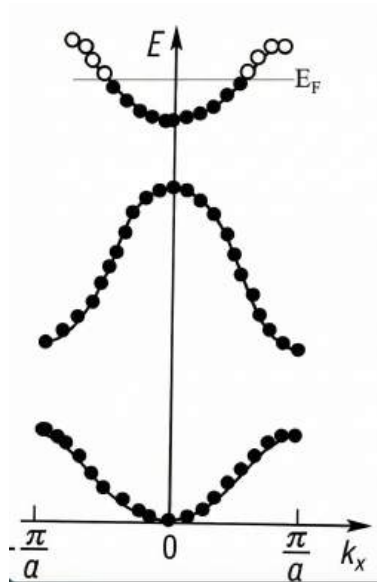


Figura 7.6: Bande di un conduttore

- **Silicio (Si, 14 elettroni):** Le bande si riempiono completamente fino all'ultima banda occupata. Esiste quindi una banda totalmente piena (**Banda di Valenza**) separata da una banda successiva totalmente vuota (**Banda di Conduzione**).

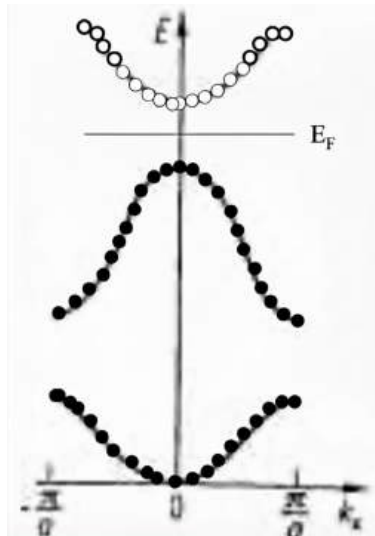


Figura 7.7: Bande di un isolante

7.5.2 Conduttori, Isolanti e Semiconduttori

La struttura a bande definisce le proprietà elettriche:

- **Conduttori (es. Sodio):** Hanno l'ultima banda semipiena (banda di conduzione).
- **Isolanti e Semiconduttori (es. Silicio):** Hanno una banda di valenza piena e una di conduzione vuota.

La distinzione tra isolanti e semiconduttori dipende dall'ampiezza del salto energetico (gap) tra le bande. Se il gap è piccolo (es. Silicio), a temperature $T > 0$ gli elettroni possono saltare nella banda di conduzione (semiconduttori). Se il gap è grande, il materiale è un isolante (es. vetro). È possibile modificare le proprietà di un semiconduttore tramite il **drogaggio**, introducendo impurità che aggiungono elettroni o lacune nelle bande.

7.6 Massa Efficace e Densità degli Stati

7.6.1 Massa Efficace

Possiamo approssimare la funzione $E(k)$ attorno a un minimo (es. $k = 0$) sviluppandola in serie di Taylor:

$$E(k) = E(0) + \left. \frac{dE}{dk} \right|_0 k + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_0 k^2 + \dots$$

Trascurando i termini superiori e considerando il minimo ($dE/dk = 0$), si ottiene una parabola:

$$E(k) \approx \frac{1}{2} \left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_0 k^2$$

Confrontando questa espressione con l'energia cinetica classica $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, possiamo definire una nuova massa:

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{1}{2} \left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_0 k^2 \implies \boxed{\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \left. \frac{d^2E}{dk^2} \right|_0}$$

Questa massa m^* è detta **massa efficace**. Essa permette di trattare l'elettrone nel solido come una particella libera, "nascondendo" l'interazione con il reticolo all'interno del valore della massa efficace.

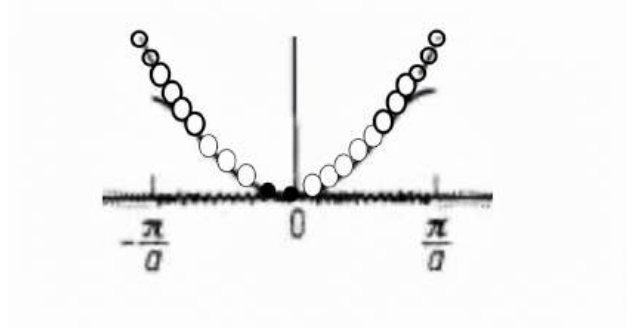


Figura 7.8: approssimazione parabolica

7.6.2 Densità degli Stati

Vogliamo calcolare quanti stati elettronici esistono in un intervallo di energia dE . Nello spazio reciproco tridimensionale, ogni stato occupa un volumetto di lato $2\pi/L$. Il numero di stati $N(k)$ contenuti in una sfera di raggio k è:

$$N(k) = 2 \cdot \frac{\text{Volume sfera}}{\text{Volume stato}} = 2 \cdot \frac{\frac{4}{3}\pi k^3}{\left(\frac{2\pi}{L}\right)^3}$$

(Il fattore 2 deriva dallo spin). Sostituendo $k = \sqrt{\frac{2m^*E}{\hbar^2}}$ (dall'approssimazione parabolica), otteniamo il numero di stati in funzione dell'energia $N(E)$:

$$N(E) = \frac{1}{3} \left(\frac{2m^*E}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{L^3}{\pi^2}$$

La densità degli stati $g(E)$ si ottiene differenziando $N(E)$ rispetto all'energia:

$$g(E)dE = dN(E) \implies g(E) = \frac{dN}{dE}$$

Svolgendo i calcoli:

$$g(E) = \left(\frac{2m^*}{\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{L^3}{2\pi^2} E^{\frac{1}{2}}$$

7.7 Effetti della temperatura e Statistica di Fermi-Dirac

Consideriamo ora di uscire dalla condizione di zero assoluto ($T > 0$). Termodinamicamente, i nuclei (che contengono la maggior parte della massa) ricevono energia termica e iniziano a vibrare. Questo movimento delle buche di potenziale provoca urti con gli elettroni, trasferendo loro energia. In un conduttore, gli elettroni vicino all'energia di Fermi possono così acquisire energia sufficiente per saltare negli stati vuoti della banda di conduzione, creando un movimento dinamico ("danza") tra stati pieni e vuoti.

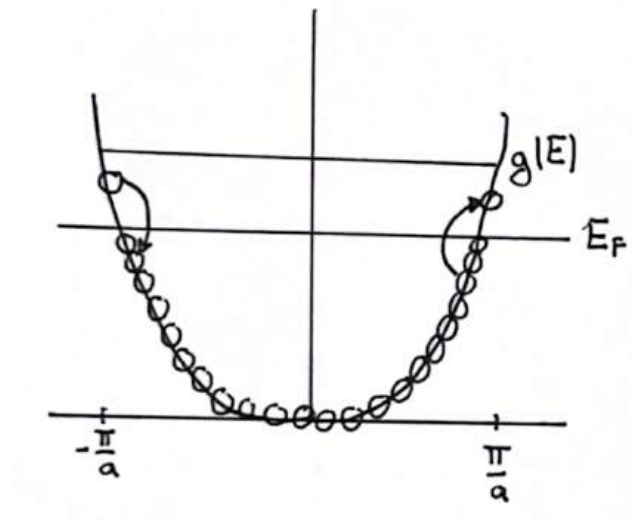


Figura 7.9: Livello di Fermi e "danza elettronica"

Fermi cercò di calcolare la probabilità che uno stato energetico fosse occupato. Definiamo:

- $g(E)$: numero di stati disponibili (degenerazione).
- $n(E)$: numero di stati effettivamente occupati.
- $f(E, T) = \frac{n(E)}{g(E)}$: probabilità di occupazione.

Nonostante il movimento degli elettroni, le proprietà macroscopiche del materiale a temperatura costante non cambiano. Fermi concluse che deve esistere una specifica distribuzione degli elettroni che è statisticamente molto più probabile di tutte le altre.

Nota: ricordiamo che la permutazione di g elementi si calcola con il fattoriale $g!$, e noi stiamo ragionando nell'ordine di grandezza di N_A elettroni.

Questa condizione di massima probabilità porta alla formulazione della **statistica di Fermi-Dirac**, che descrive la funzione $f(E, T)$ indipendente dal tempo ma dipendente solo da energia e temperatura. Definizioni utili:

- $E_{tot} = \sum n(E)E$: Energia totale.
- $N_e = \sum n(E)$: Numero totale di elettroni.

Capitolo 8

lezione 19 dicembre

8.1 Richiami di Fisica dello Stato Solido

In questa sezione riprendiamo i concetti logici fondamentali discussi nella lezione precedente riguardo l'equazione di Schrödinger applicata a un solido cristallino. L'attenzione è posta sui passaggi logici piuttosto che su quelli prettamente matematici.

8.1.1 Descrizione dell'elettrone nel reticolo

Un elettrone è descrivibile tramite una funzione d'onda (grafico). Poiché ci muoviamo in uno spazio tridimensionale, esistono grafici equivalenti per le tre direzioni x, y, z .

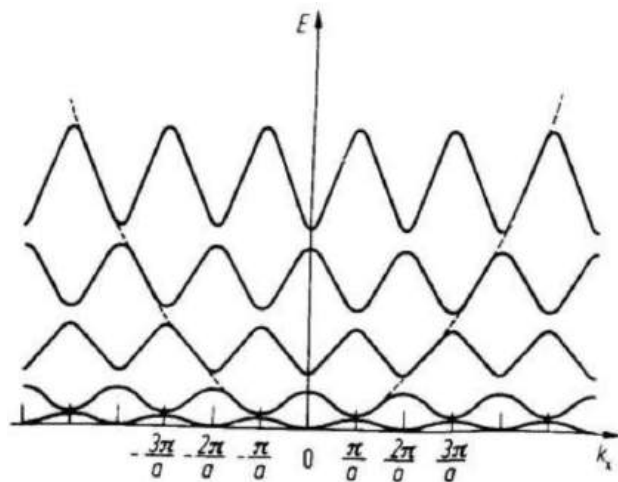


Figura 8.1: Grafico dei livelli $E-K_x$

8.1.2 Schema a bande e Principio di Pauli

Lo schema a bande descrive gli stati energetici possibili per gli elettroni all'interno del reticolo cristallino:

- **Pallino bianco:** Stato virtualmente occupabile.
- **Pallino nero:** Stato occupato da un elettrone.

Ogni punto del grafico rappresenta uno stato caratterizzato da 5 numeri quantici (tra cui c'è lo spin).

Principio di Esclusione di Pauli: Non possono esistere due elettroni con gli stessi numeri quantici identici.

Evidenze sperimentali del principio:

- **Solidi:** Non si trovano mai 2 elettroni con tutti i 5 numeri quantici uguali.
- **Atomi:** Non ci sono 2 elettroni con gli stessi 4 numeri quantici.
- **Fotoni:** Non rispettano il principio di Pauli (possono essere tutti identici).

8.1.3 Approssimazione a elettroni indipendenti

Possiamo riempire uno stato (un "pallino") con massimo 2 elettroni aventi spin opposto. Si assume che tutti gli elettroni "vedano" lo stesso schema a bande, ignorando l'interazione reciproca tra elettroni. Si parla quindi di **schema a bande a elettroni indipendenti**.

8.1.4 Conduttori, Isolanti e Massa Efficace

Il comportamento elettrico dipende dal riempimento delle bande:

- **Conduttore:** Una banda non è completamente piena.
- **Isolante:** Le bande sono o completamente piene o completamente vuote.
- **Banda Proibita:** Differenza di energia tra 2 bande, per convenzione solitamente si usano come riferimento la massima banda piena (Banda di Valenza) e la prima banda vuota (Banda di Conduzione).

Le bande sono oscillazioni che, per semplicità, approssimiamo con delle **parabole**. Questa approssimazione permette di introdurre il concetto di **massa efficace**. Per contare gli stati, si utilizza la **densità degli stati** $g(E)$, con una tecnica analoga a quella usata per il corpo nero (gli stati non sono equidistanti in energia).

8.1.5 Comportamento in temperatura

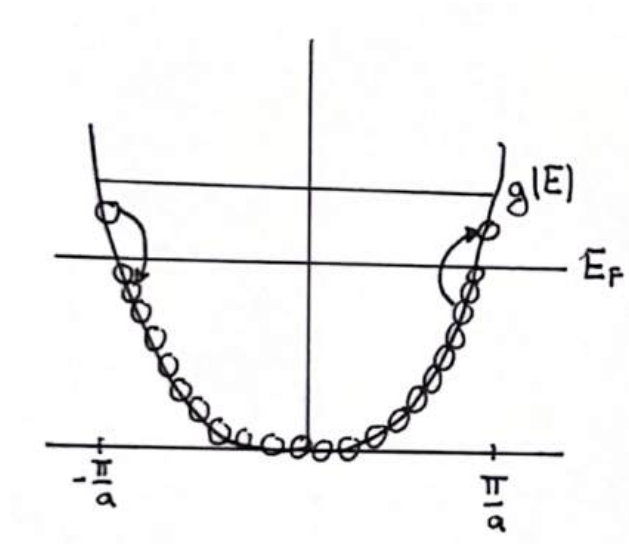


Figura 8.2: Linea di Fermi

Definiamo la **Linea di Fermi** come quella linea che, allo zero assoluto ($T = 0$ K), separa i livelli pieni da quelli vuoti. Sia g_i il numero di stati nell'intervallo di energia E_i . Possiamo schematizzare la situazione come segue:

- Gli elettroni in g_0 hanno energia minore di quelli in g_1 , e così via.
- A $T = 0$ K: Tutti gli stati sotto l'energia di Fermi sono pieni, quelli sopra sono vuoti.

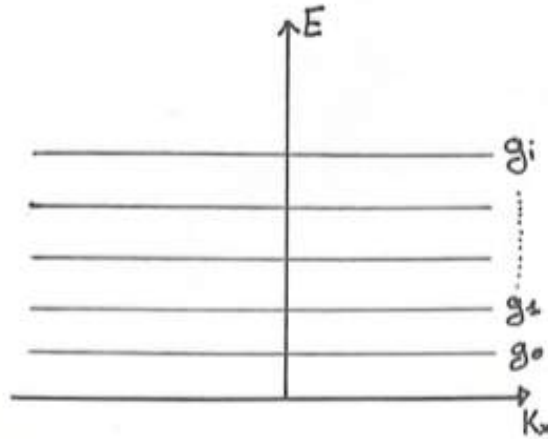


Figura 8.3: Schematizzazione livelli energetici

Se $T > 0$ K (rimuoviamo lo zero assoluto): Gli elettroni acquisiscono energia termica e iniziano a "saltellare" sopra l'energia di Fermi (l'unico posto dove c'è spazio vuoto). Il sistema si comporta simil-gas ideale, ma governato dalle leggi quantistiche.

Ogni livello energetico è caratterizzato da:

1. $g_i \geq n_i$ (Principio di Pauli: posti disponibili \geq elettroni).
2. $\sum_i n_i = N_e$ (Conservazione del numero di particelle).
3. $\sum_i n_i E_i = U$ (Energia interna totale).

Paradosso apparente: Se gli elettroni si muovessero "liberamente" rispettando solo questi vincoli, il materiale potrebbe cambiare le sue proprietà macroscopiche istantaneamente (da conduttore a isolante). Poiché ciò non avviene, deve esistere una distribuzione statistica specifica che governa lo stato del materiale a una determinata temperatura.

8.2 Statistica di Fermi-Dirac

Dobbiamo trovare la distribuzione degli n_i elettroni nei g_i stati disponibili ad energia E_i . Esiste un numero incredibilmente grande di combinazioni, ma statisticamente il sistema si assesta sulla configurazione immensamente più probabile ("stato di equilibrio"). Gli stati ordinati sono una frazione infinitesima di quelli possibili.

Cerchiamo una funzione indipendente dal tempo:

$$\frac{n_i}{g_i} = f(E_i, T)$$

8.2.1 Calcolo delle combinazioni (W)

Consideriamo il principio di indistinguibilità quantistica (elettroni come onde, senza traiettoria definita). Non posso distinguere tra due elettroni specifici, ma solo contare stati pieni e vuoti.

Le combinazioni possibili per ordinare n_i elettroni in g_i stati sono date dal coefficiente binomiale (tenendo conto che $g_i - n_i$ stati rimangono vuoti):

$$W_i = \frac{g_i!}{(g_i - n_i)!n_i!}$$

Il numero totale di combinazioni W per tutto il sistema è la produttoria su tutti i livelli i :

$$W = \prod_i \frac{g_i!}{(g_i - n_i)!n_i!}$$

8.2.2 Relazione con la Termodinamica

Dal primo principio della termodinamica:

$$\delta Q = dU + \delta L$$

Poiché in un solido il volume non cambia, $\delta L = 0$, quindi $\delta Q = dU$. Il calore è legato all'entropia dalla relazione $\delta Q = TdS$. Otteniamo quindi:

$$dU = TdS \implies d(TS - U) = 0$$

Nota: La temperatura T del solido è considerata un parametro fissato, poiché ci troviamo a una condizione di equilibrio termico, questa ipotesi ci permette di fare il passaggio matematico nell'equazione.

8.2.3 Entropia di Boltzmann e Energia Libera

Utilizziamo l'ipotesi di Boltzmann per l'entropia:

$$S = k_B \ln(W)$$

Sostituendo nella condizione di equilibrio e ricordando che $U = \sum n_i E_i$:

$$d \left(k_B T \ln(W) - \sum_i E_i n_i \right) = 0$$

Il termine tra parentesi è identificato come l'**Energia Libera** $F = k_B T \ln(W) - \sum_i E_i n_i$. Dobbiamo imporre:

$$dF(n_i) = 0$$

dove le variabili indipendenti sono i numeri di occupazione n_i .

8.2.4 Derivazione della funzione di distribuzione

Per risolvere il problema variazionale, si usa il metodo dei moltiplicatori di Lagrange (o il "trucco fisico" di Fermi). Il differenziale totale è:

$$\sum_i \frac{\partial F}{\partial n_i} dn_i = 0$$

Poiché il numero totale di elettroni è costante, se un livello perde elettroni ($dn_i < 0$), un altro deve acquisirne. La somma $\sum dn_i = 0$. L'unica condizione affinché la somma pesata sia nulla per variazioni arbitrarie (che rispettino la conservazione del numero) è che la derivata sia costante per tutti i livelli:

$$\frac{\partial F}{\partial n_i} = \mu$$

Questa costante μ è definita come **Potenziale Chimico**.

Svolgendo i calcoli (applicazione dell'approssimazione di Stirling sui fattoriali nel logaritmo):

$$\mu = \frac{\partial F}{\partial n_i} = E_i + k_B T \ln \left(\frac{n_i}{g_i - n_i} \right)$$

Invertendo la relazione per trovare n_i/g_i , otteniamo la **distribuzione di Fermi-Dirac**:

$$f(E_i, T) = \frac{n_i}{g_i} = \frac{1}{e^{\frac{E_i - \mu}{k_B T}} + 1}$$

8.2.5 Analisi della funzione

Questa funzione rappresenta la probabilità che uno stato a energia E_i sia occupato.

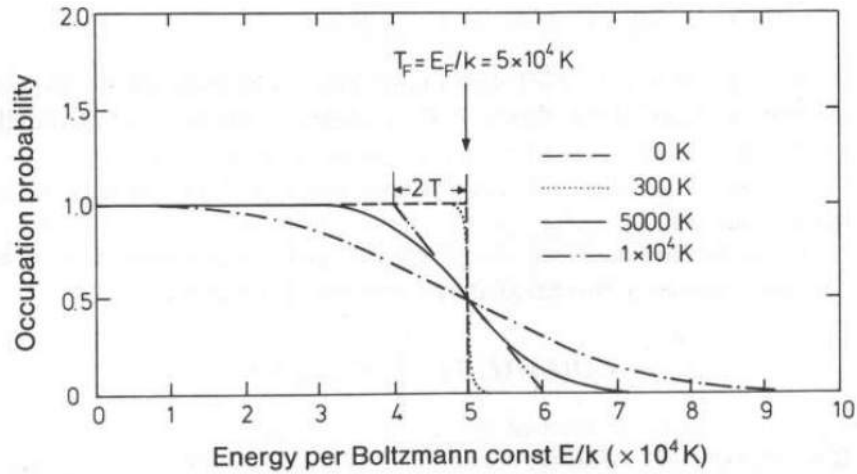


Figura 8.4: Grafico $f(E, T) - E$

Caratteristiche della funzione:

- Per $E = \mu$: $f(\mu, T) = \frac{1}{1+1} = \frac{1}{2}$ (punto di flesso).
- **A $T = 0$ K:**
 - Se $E < \mu$: l'esponenziale tende a 0 (o $-\infty$ all'esponente), quindi $f \rightarrow 1$.
 - Se $E > \mu$: l'esponenziale tende a $+\infty$, quindi $f \rightarrow 0$.

Siamo riusciti a ricreare una funzione a gradino.

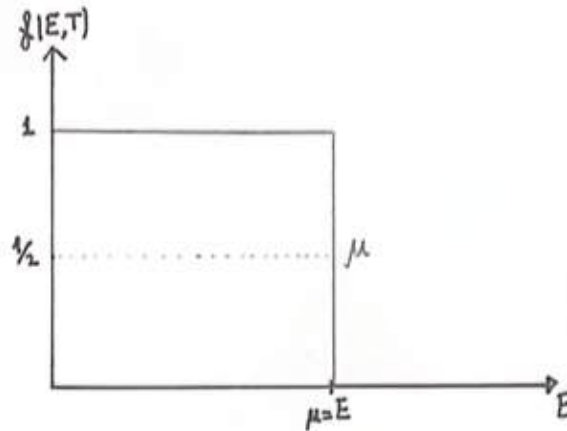


Figura 8.5: Grafico $f(E, T) - E$ a $T=0$ K

Il potenziale chimico allo zero assoluto coincide con l'**Energia di Fermi** (E_F).

$$\mu(T = 0) = E_F$$

8.3 Posizione del Livello di Fermi

Vogliamo determinare dove si colloca E_F nei diversi materiali.

8.3.1 Conduttori (Metalli)

Confrontiamo la banda di conduzione con la funzione di Fermi-Dirac. L'intervallo di energia in cui la funzione passa da 1 a 0 è circa $k_B T \approx 0.025$ eV (a temperatura ambiente). Questa è una zona piccolissima rispetto alle energie in gioco: la temperatura influisce poco sulle proprietà macroscopiche dei conduttori.

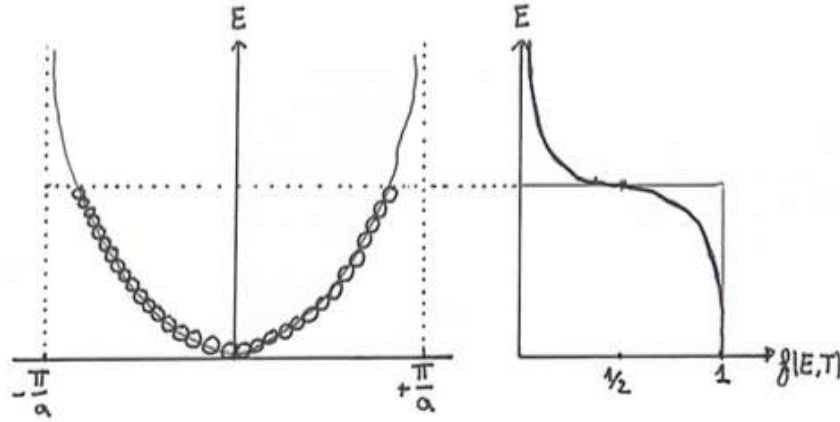


Figura 8.6: Confronto grafico di banda conduzione con grafico $E - f(E, T)$

Possiamo calcolare la posizione di E_F usando la densità degli stati $g(E)$:

$$g(E) = \frac{L^3}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} E^{\frac{1}{2}}$$

Imponiamo che l'integrale della densità degli stati pesata per la probabilità di occupazione sia uguale al numero totale di elettroni N_e :

$$\int_0^\infty g(E) f(E) dE = N_e$$

Allo zero assoluto ($T = 0$), la funzione $f(E)$ è 1 fino a E_F e 0 dopo, quindi l'integrale diventa:

$$\int_0^{E_F} g(E) dE = N_e \quad (8.1)$$

Da qui si ricava E_F per un metallo.

8.3.2 Isolanti e Semiconduttori

Per gli isolanti il calcolo è più complesso. Il livello di Fermi si trova all'interno della **banda proibita**, tra la banda di valenza (BV) e la banda di conduzione (BC).

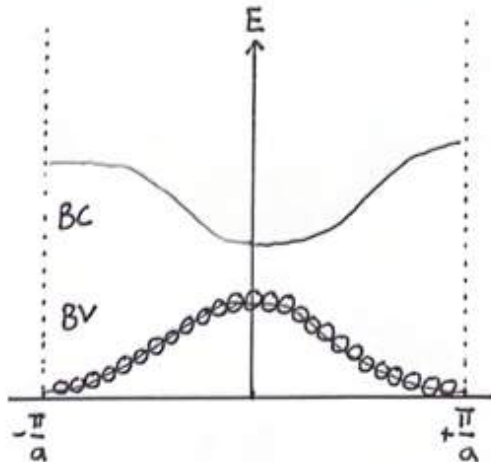


Figura 8.7: Grafico bande di un isolante

- A $T = 0$: BV piena, BC vuota.
- A $T > 0$: Alcuni elettroni saltano in BC lasciando "buchi" (lacune) in BV.

Per la neutralità di carica, il numero di elettroni in BC deve essere uguale al numero di lacune in BV:

$$\int_{BV} g_{BV}(E)[1 - f(E)]dE = \int_{BC} g_{BC}(E)f(E)dE$$

Nota: $[1 - f(E)]$ rappresenta la probabilità di avere un posto vuoto (lacuna).

Risultato (senza svolgere i conti): Il livello di Fermi si trova circa a **metà della banda proibita**. La posizione esatta dipende dal rapporto tra le masse efficaci degli elettroni e delle lacune.

8.4 Informazioni sull'Esame e Logistica

- **Materiale:** Sul sito caricherà presto esempi di compiti per la parte quantistica.
- **Prossime lezioni:** Dopo Natale rimangono 2 lezioni (6 ore totali). Il corso teorico è finito; queste ore saranno dedicate a svolgere vecchi temi d'esame.
- **Tipologia esame:** Domande in forma chiusa, generalmente più semplici degli esercizi svolti in classe. Basta conoscere i concetti base.

Date appelli:

- **Scritti:** 22 Gennaio e 06 Febbraio.
- **Orali:**
 - Primo appello: dal 27 Gennaio al 05 Febbraio.
 - Secondo appello: dal 10 Febbraio al 17 Febbraio.

(I range sono ampi per sicurezza, spreando che chiamerà tutti).