

CHIMICA FISICA II - LE COSE DA SAPERE

PIERO DECLEVA

Aspetti elementari: elettroni, nuclei, forze, scale di energia. Quantizzazione dei livelli energetici, transizioni tra livelli, regola di Bohr. Dualismo onda-particella, relazione di de Broglie. Esperimento di diffrazione. Polarizzazione dei fotoni.

Osservabili compatibili e incompatibili, CSCO. Associazione stati-vettrici, osservabili-operatori, risultati delle misure, probabilit , valori medi, stato dopo la misura. Evoluzione temporale, stati stazionari, frequenze di Bohr, matrici di transizione.

Particella classica, osservabili fondamentali $\hat{x}$ e $\hat{p}$, commutatori, rappresentazione degli stati e degli operatori. Forma dell'hamiltoniano. Soluzione dell'eq. di Schr dinger per potenziali costanti, particella nella scatola in 1D e 3D, hamiltoniano separabile. Buca finita. Origine della quantizzazione. Propriet  asintotiche del potenziale e caratteristiche dello spettro. Invarianza per Parit  e simmetria delle soluzioni; simmetria, commutazione, numeri quantici, degenerazione. Il teorema variazionale. Oscillatore armonico, frequenza, autovalori e autovettrici. Operatori a e a^+ e loro azione sugli autovettrici. (per gli ambiziosi, derivazione della soluzione) Momento angolare, regole di commutazione, autostati comuni di L^2 e L_z , azione degli operatori L_+ e L_- (non occorre ricordare la normalizzazione $\sqrt{l(l+1) - m(m \pm 1)}$). (per gli ambiziosi, derivazione della soluzione). Spin. Coordinate polari, Armoniche Sferiche. Separazione dello spin. Campo centrale, equazione radiale, propriet  delle soluzioni. Atomo idrogenoide. Separazione del centro di massa, massa ridotta. Cenno alla struttura fine e iperfine. Sistemi a molte particelle. Stati prodotto. Simmetria e antisimmetria, connessione con lo spin, principio di Pauli. Prodotti antisimmetrizzati, base. Numero totale degli stati prodotto e antisimmetrici. Approssimazione a particelle indipendenti, hamiltoniano separabile. Configurazioni elettroniche degli atomi, guscio chiuso e gusci aperti, degenerazione. Splitting di multipletto. Momento angolare totale, regola di composizione. Commutazione di momento angolare totale e parit  con l'hamiltoniano, indicizzazione delle soluzioni, numeri quantici totali. La struttura di $He\ 1s2s, 1s2p$, singoletti e tripletti di spin. $C\ 1s^22s^22p^2$. Cenno all'accoppiamento spin-orbita, momento angolare totale. Approssimazione di Born-Oppenheimer, Hamiltoniano elettronico e nucleare. Superfici di energia potenziale, loro significato. Gradi di libert  interni. Molecole biatomiche, soluzione del problema radiale. Approssimazione del rotatore rigido e dell'oscillatore armonico, i livelli energetici. Contributo elettronico, vibrazionale e rotazionale all'energia totale. Transizioni e spettri. Cenno alle molecole poliatomiche, vibrazione e rotazione. Effetti isotopici. Interconversione tra isomeri e conformeri, reattivit . Soluzione del problema elettronico, molecola H_2^+ , l'approccio LCAO. Orbitali molecolari nelle molecole biatomiche e poliatomiche.