

# Programma dettagliato

Molto importante

Importante

Facoltativo-curiosità

Crisi della meccanica classica, Quantizzazione di Planck, [Relazione di de Broglie](#), Esperimento delle due fenditure.

Primo postulato. Introduzione al calcolo di probabilità

Valore di aspettazione e varianza. Calcolo della varianza. Passaggio da distribuzioni discrete a distribuzioni continue

Basi complete ortonormali degli spazi vettoriali. Notazione di Dirac (*Bra e Ket*). Operatori lineari.

Operatore trasposto coniugato. Gli operatori hermitiani

Postulato 2. Rappresentazione posizione e operatore momento.

Dimostrazione delle 2 proprietà degli operatori hermitiani ed enunciazione della 3 proprietà

Postulato 3. Misura in MQ. Probabilità di misura di un certo autovalore

Misure in sequenza

Commutatore e variabili compatibili. Deviazione standard in MQ. Disuguaglianza di Schwarz.

Derivazione del Principio di Indeterminazione di Heisenberg

Commutazione  $[x,p]$ . Definizione di CSCO. Operatore proiezione

Equazione di Schrödinger e quarto postulato.

Conservazione della normalizzazione. Equazione in notazione bra e ket

Teorema di Ehrenfest e [dimostrazione del teorema di Ehrenfest](#).

Equazione di Schrödinger a potenziale costante risolta con separazione delle variabili spazio-tempo.

Stati stazionari. Combinazione di stati stazionari. Equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo

Buca infinita: stati e autovalori

Evidenza per il caso modello di buca infinita dei principali aspetti della MQ:

energia di punto zero, variazione dei valori di aspettazione delle osservabili, effetto della misura.

Esempio di applicazione nel calcolo degli stati del butadiene.

Introduzione alle serie e alla trasformata di Fourier. Soluzione Eq. Schrodinger per particella libera

Costruzione del pacchetto d'onde. Definizione di velocità di fase e velocità di gruppo.

Funzione delta di Dirac e cenni alla ortonormalità alla Dirac.

Descrizione del problema di barriera finita e dell'effetto tunnel quantistico. Condizioni di continuità in problema di scattering.

Microscopio STM: principio di funzionamento

Oscillatore armonico classico. Riduzione al problema ad un corpo del problema di oscillazione di due masse.

Approssimazione armonica delle oscillazioni molecolari.

Operatori  $a+$   $a-$ , Hamiltoniana dell'oscillatore armonico scritta in funzione di  $a+a-$

Stato fondamentale ed energia di stato fondamentale per l'oscillatore armonico 1D.

Forma delle soluzioni dell'oscillatore armonico, espressione di  $x$  e  $p$  in funzione degli operatori  $a+$  e  $a-$ .

Equazione di Schrodinger 3D.

Particella in scatola cubica.

Potenziali radiali: passaggio alle coordinate sferiche e forma dell'Equazione di Schrodinger in coordinate sferiche.

Separazione delle coordinate radiale e angolari.

Forma della soluzione della parte angolare: le armoniche sferiche e i numeri  $l$  e  $m$ .

Forma delle soluzioni della parte radiale dell'equazione di Schrodinger per l'atomo di idrogeno.

Numero quantico principale  $n$  e degenerazione dello spettro di idrogeno. Formula di Rydberg e serie di emissioni principali.

Definizione di momento angolare. Momento angolare in coordinate cartesiane. Derivazione delle proprietà di commutazione. Operatori  $L+$  e  $L-$

Momento angolare in coordinate sferiche (solo definizione). Autovalori e autovettori. Momento angolare e atomo di idrogeno.

Gli orbitali atomici: forma e numeri quantici.

Densità di probabilità radiale. Valore di aspettazione del raggio orbitale. Valore più probabile del raggio orbitale.

Armoniche sferiche e trasformazione in armoniche sferiche reali per la rappresentazione grafica degli orbitali. Raggio di Bohr ridotto.

Regole di selezione nelle transizioni elettroniche e spettro di emissione dell'idrogeno (solo cenno).

Effetto Zeeman semplificato, rapporto giromagnetico dell'elettrone.

Esperimento di Stern-Gerlach (qualitativo).

Spin: operatori di spin per l'elettrone, matrici di Pauli, misura di  $S_z$

Autovalori e autovettori delle matrici di spin

Misura di  $S_x$  su autostato di  $S_z$

Somma di spin, somma di momenti angolari

Calcolo dei coefficienti con l'utilizzo degli operatori di spostamento per il caso di due particelle.

Coefficienti di Clebsch Gordan: utilizzo della tavola

Concetto di spin-orbitali. Misura di osservabili su combinazione lineare di spin-orbitali.

Calcolo della costante di moltiplicazione per il problema agli autovalori degli operatori di spostamento.

Teoria delle perturbazioni indipendenti da tempo: perturbazioni al primo grado su stati non degeneri.

Teorema per l'estensione della teoria non degenera a stati degeneri (solo enunciato).

Introduzione alle correzioni relativistiche, di Lamb e di struttura iperfine. [Interazione spin-orbita](#)

Termine spettroscopico e livelli atomo di idrogeno con correzioni spin-orbita.

Introduzione al problema delle particelle identiche.

Postulato del principio di simmetria.

Due particelle: casi di particelle distinguibili, fermioni indistinguibili, bosoni indistinguibili. Integrali di scambio

Determinanti di Slater.

Soluzione approssimata per l'atomo di elio.

Unità atomiche, Hamiltoniana in unità atomiche.

Atomo di elio: approccio perturbativo.

Principio variazionale.

Orbitali di Slater

Metodo di Hartree Fock applicato all'elio.

Approssimazione di Koopmans per l'energia di ionizzazione.

Atomo di elio: energia di correlazione e interazione di configurazione

Estensione del metodo HF ad atomi con più elettroni (solo introduzione al problema e trattazione qualitativa)

Configurazione elettronica e Aufbau con regola di Madelung.

Accoppiamento dei momenti angolari L-S: il momento angolare totale J.

Termine spettroscopico del carbonio. Regole di Hund.

Problema equazione secolare.

Principio variazionale ed equazione secolare

Applicazione del determinante secolare al problema di buca infinita.

Approssimazione di Born Oppenheimer e separazione delle parti elettroniche e nucleari nella hamiltoniana di molecole. PES di una molecola.

Orbitali molecolari e metodo MO-LCAO.

Molecola  $H_2^+$ : determinante secolare. Orbitale legante e antilegante.

Molecola  $H_2$ . Soluzione come determinante di Slater di orbitali molecolari.

Interazione di configurazione di orbitali molecolari.

Molecole biatomiche: introduzione alla struttura elettronica

Cenni a molecole più grandi (esempio dell'etilene) e all'ibridizzazione degli orbitali.