

Programma dettagliato 2022

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. Significato fisico dei coefficienti di Fourier.

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

Evoluzione temporale di un operatore hermitiano.

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 di L^2 e di L_z . Momento angolare e atomo di idrogeno.

Il rotore rigido e quantizzazione della rotazione.

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.

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. Principio di esclusione di Pauli.

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.

Principio variazionale ed equazione secolare

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.