



Corso di Laurea in Chimica Industriale

Chimica Fisica II

Lezione 7

Esercizi
(seconda parte)

A.A. 2022-2023

Marco Ruzzi



Dipartimento di Scienze Chimiche
Università degli Studi di Padova
Via Marzolo 1 35129 Padova
E-mail: marco.ruzzi@unipd.it

Esercizi [39]

Esercizio 23

Si normalizzino le seguenti funzioni d'onda:

- a. $\psi(x) = \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ nel dominio $0 \leq x \leq L$
- b. $\psi(x) = A$ nel dominio $-L \leq x \leq L$
- c. $\psi(r) = e^{-r/a_0}$ nello spazio tridimensionale \mathbb{R}^3
- d. $\psi(r) = r e^{-r/2a_0}$ nello spazio tridimensionale \mathbb{R}^3

Nota 1

Vale il seguente integrale notevole:

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

Nota 2

L'elemento di volume infinitesimo in coordinate polari assume la forma:

$$dV = r^2 \text{sen} \theta \, d\theta \, d\phi \, dr$$

Esercizi [40]

Nel testo le funzioni d'onda $\psi(\mathbf{r})$ non sono normalizzate ossia sono tali che:

$$\int \psi(\mathbf{r})^* \psi(\mathbf{r}) dV \neq 1$$

Normalizzare una funzione d'onda $\psi(\mathbf{r})$ significa trovare la costante moltiplicativa N (reale) per la quale valga la seguente relazione:

$$\int (N\psi(\mathbf{r}))^* (N\psi(\mathbf{r})) dV = N^2 \int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) dV = 1$$

da cui:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) dV \right)^{1/2}}$$

- In tal caso la funzione d'onda $\psi_N(\mathbf{r}) = N\psi(\mathbf{r})$ risulta normalizzata.

Nota 3

L'integrale sopra è un integrale di volume e deve essere esteso sull'intero dominio di volume dove è definita la funzione d'onda.

Esercizi [41]

La costante N di normalizzazione è data da:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int \psi^* (\mathbf{r}) \psi (\mathbf{r}) dV \right)^{1/2}}$$

con l'integrale di volume esteso sull'intero dominio della funzione d'onda.

La funzione d'onda può essere espressa, a seconda dei casi, in termini di coordinate cartesiane o di coordinate polari. A seconda dei casi dunque l'operazione di normalizzazione richiede che dV sia espresso in coordinate cartesiane o in coordinate polari.

Rappresentazione dello spazio in coordinate cartesiane:

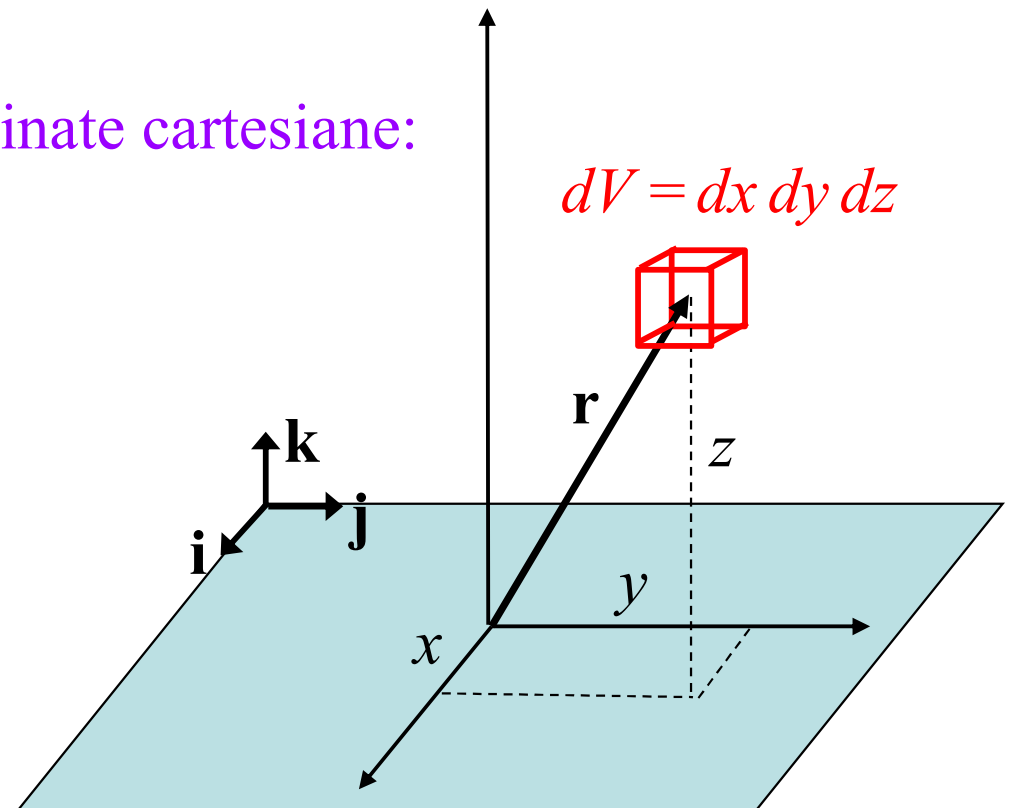
$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{i} = 0$$

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 1$$

$$\mathbf{r} = x \mathbf{i} + y \mathbf{j} + z \mathbf{k}$$

$$\psi (\mathbf{r}) = \psi (x, y, z)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} dV = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} dx dy dz$$



Esercizi [42]

La costante N di normalizzazione è data da:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int \psi^* (\mathbf{r}) \psi (\mathbf{r}) dV \right)^{1/2}}$$

con l'integrale di volume esteso sull'intero dominio della funzione d'onda.

La funzione d'onda può essere espressa, a seconda dei casi, in termini di coordinate cartesiane o di coordinate polari. A seconda dei casi dunque l'operazione di normalizzazione richiede che dV sia espresso in coordinate cartesiane o in coordinate polari.

Rappresentazione dello spazio in coordinate polari:

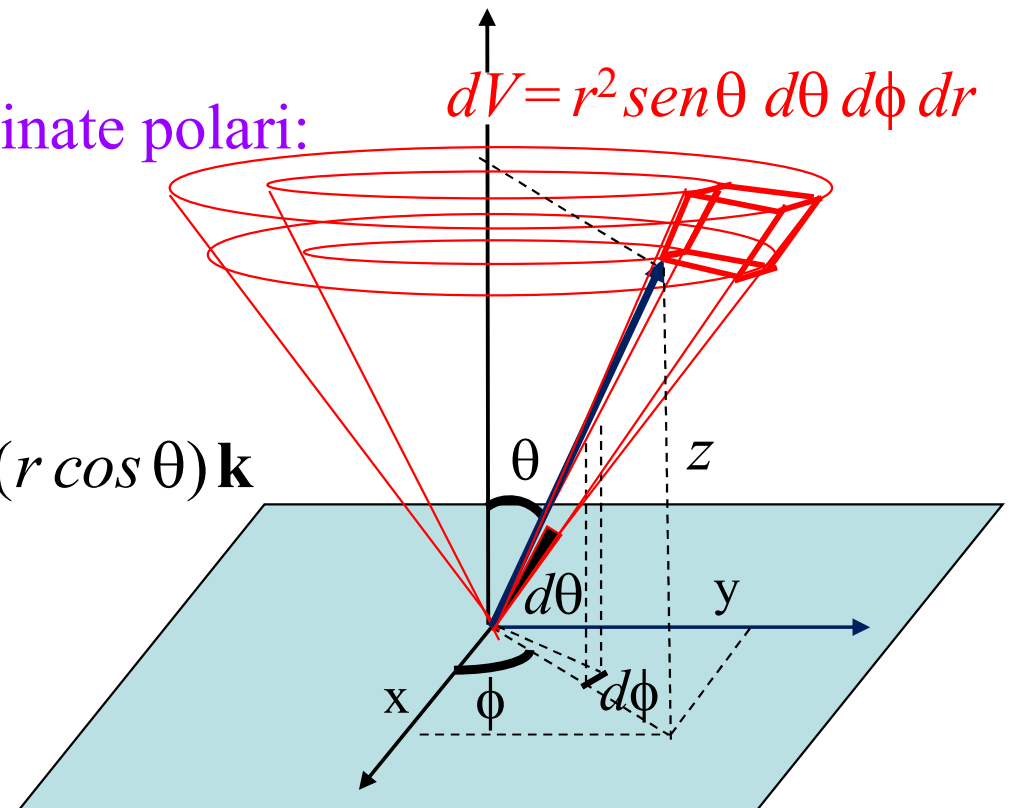
$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{k} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{i} = 0$$

$$\mathbf{i} \cdot \mathbf{i} = \mathbf{j} \cdot \mathbf{j} = \mathbf{k} \cdot \mathbf{k} = 1$$

$$\mathbf{r} = (r \operatorname{sen} \theta \cos \phi) \mathbf{i} + (r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi) \mathbf{j} + (r \cos \theta) \mathbf{k}$$

$$\psi (\mathbf{r}) = \psi (r, \theta, \phi)$$

$$\int_{\mathbb{R}^3} dV = \int_0^{+\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r^2 \operatorname{sen} \theta d\theta d\phi dr$$



Esercizi [43]

a. $\psi(x) = \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$ nel dominio $0 \leq x \leq L$

La costante di normalizzazione risulta (vedi dimostrazione nella slide seguente):

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_0^L \psi^*(x) \psi(x) dx\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_0^L \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\frac{L}{2}\right)^{1/2}} = \pm \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$$

La funzione d'onda normalizzata risulta quindi:

$$\varphi(x) = N\psi(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

Nota: A rigore si sarebbe dovuto scrivere:

$$\varphi(x) = N\psi(x) = \pm \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$$

ma, come noto, funzioni d'onda che differiscono per un termine del tipo $e^{i\pi}$ coincidono in quanto tale termine non ha influenza in termini di densità di probabilità.

Esercizi [44]

Per normalizzare della funzione d'onda:

$$\psi(x) = \text{sen}\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \quad \text{nel dominio } 0 \leq x \leq L$$

si deve calcolare:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_0^L \psi^*(x) \psi(x) dx\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_0^L \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx\right)^{1/2}}$$

Per ottenere N è necessario risolvere l'integrale:

$$I = \int_0^L \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx$$

ossia:

$$I = \int_0^L \text{sen}^2(kx) dx \quad \text{con: } k = \frac{n\pi}{L}$$

Eseguendo la sostituzione: $kx = u \Rightarrow x = \frac{1}{k}u \Rightarrow dx = \frac{1}{k}du$

l'integrale diventa:

$$I = \frac{1}{k} \int_0^{kL} \text{sen}^2 u du$$

e si risolve facilmente per parti come segue...

Esercizi [45]

$$\begin{aligned}\int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du &= \int_0^{kL} \text{sen} u \cdot \text{sen} u \, du \\ &= -\cos u \cdot \text{sen} u \Big|_0^{kL} - \int_0^{kL} (-\cos u) \cdot \cos u \, du \\ &= -\frac{1}{2} \text{sen} 2u \Big|_0^{kL} + \int_0^{kL} \cos^2 u \, du \\ &= -\frac{1}{2} \text{sen} 2u \Big|_0^{kL} + \int_0^{kL} (1 - \text{sen}^2 u) \, du \\ &= -\frac{1}{2} \text{sen} 2u \Big|_0^{kL} + \int_0^{kL} du - \int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du\end{aligned}$$

Vale dunque l'identità:

$$2 \int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du = -\frac{1}{2} \text{sen} 2u \Big|_0^{kL} + \int_0^{kL} du$$

e quindi:

$$\int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du = -\frac{1}{4} \text{sen} 2u \Big|_0^{kL} + \frac{1}{2} u \Big|_0^{kL} = -\frac{1}{4} \text{sen}(2kL) + \frac{1}{2} kL$$

Esercizi [46]

Vale dunque:

$$\int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du = -\frac{1}{4} \text{sen}(2kL) + \frac{1}{2} kL$$

e ricordando che si era posto: $k = \frac{n\pi}{L}$
si ha:

$$\int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du = -\frac{1}{4} \text{sen}\left(2 \frac{n\pi}{L} L\right) + \frac{1}{2} \frac{n\pi}{L} L = -\frac{1}{4} \text{sen}(n 2\pi) + n \frac{\pi}{2} = n \frac{\pi}{2}$$

Alla fine l'integrale I al denominatore di N risulta:

$$I = \frac{1}{k} \int_0^{kL} \text{sen}^2 u \, du = \frac{1}{k} n \frac{\pi}{2} = \frac{L}{n\pi} n \frac{\pi}{2} = \frac{L}{2}$$

e la costante di normalizzazione N assume valore:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_0^L \text{sen}^2 \frac{n\pi x}{L} dx\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{I^{1/2}} = \pm \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2}$$



Esercizi [47]

b. $\psi(x) = A$ nel dominio $-L \leq x \leq L$

La costante di normalizzazione risulta:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-L}^L \psi^*(x) \psi(x) dx\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-L}^L A^2 dx\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{(A^2 2L)^{1/2}} = \pm \frac{1}{A(2L)^{1/2}}$$

La funzione d'onda normalizzata risulta quindi:

$$\varphi(x) = N\psi(x) = \frac{1}{A(2L)^{1/2}} A$$



Esercizi [48]

c. $\psi(r) = e^{-r/a_0}$ nello spazio tridimensionale \mathbb{R}^3

La costante di normalizzazione risulta:

$$\begin{aligned}
 N &= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} \int_0^{+\pi} \int_0^{2\pi} \psi^*(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr \right)^{1/2}} \\
 &= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} \int_0^{+\pi} \int_0^{2\pi} e^{-2r/a_0} r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr \right)^{1/2}} \\
 &= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} e^{-2r/a_0} r^2 \, dr \int_0^{+\pi} \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\frac{a_0^3}{4} \cdot 2 \cdot 2\pi \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{(a_0^3 \pi)^{1/2}}
 \end{aligned}$$

Per risolvere l'integrale sopra, in r , si fa uso dell'integrale notevole:

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} \, dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

La funzione d'onda normalizzata risulta:

$$\varphi(r) = N\psi(r) = \frac{1}{a_0^{3/2} \pi^{1/2}} e^{-r/a_0}$$



Esercizi [49]

d. $\psi(r) = r e^{-r/2a_0}$ nello spazio tridimensionale \mathbb{R}^3

La costante di normalizzazione risulta:

$$\begin{aligned}
 N &= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} \int_0^{+\pi} \int_0^{2\pi} \psi^*(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr \right)^{1/2}} \\
 &= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} \int_0^{+\pi} \int_0^{2\pi} r^2 e^{-r/a_0} r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr \right)^{1/2}} \\
 &= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} r^2 e^{-r/a_0} r^2 \, dr \int_0^{+\pi} \sin \theta \, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(4! a_0^5 \cdot 2 \cdot 2\pi \right)^{1/2}}
 \end{aligned}$$

Per risolvere l'integrale sopra, in r , si fa uso dell'integrale notevole:

$$\int_0^{+\infty} x^n e^{-ax} \, dx = \frac{n!}{a^{n+1}}$$

La funzione d'onda normalizzata risulta:

$$\varphi(r) = N\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{96} a_0^{5/2} \pi^{1/2}} r e^{-r/2a_0}$$



Esercizi [50]

Esercizio 24

Normalizzare la seguente funzione d'onda su tutto \mathbb{R} :

$$\psi(x) = e^{-ax^2} \quad (a \text{ costante reale positiva})$$

facendo uso del seguente integrale notevole:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \pi^{1/2}$$

Vale:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} e^{-ax^2} dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} dx \right)^{1/2}}$$

L'integrale al denominatore è facilmente calcolabile a partire dall'integrale notevole fornito nel testo:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} \frac{1}{(2a)^{1/2}} du = \frac{1}{(2a)^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du = \frac{\pi^{1/2}}{(2a)^{1/2}}$$

Esercizi [51]

Vale dunque:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax^2} dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\frac{\pi^{1/2}}{(2a)^{1/2}} \right)^{1/2}} = \pm \left(\frac{2a}{\pi} \right)^{1/4}$$

La funzione d'onda normalizzata è:

$$\psi(x) = \left(\frac{2a}{\pi} \right)^{1/4} e^{-ax^2}$$



Esercizi [52]

Esercizio 25

Normalizzare la seguente funzione d'onda su tutto \mathbb{R} :

$$\psi(x) = e^{-ax}$$

con a costante reale positiva.

Vale:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax} e^{-ax} dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax} dx \right)^{1/2}}$$

L'integrale al denominatore è evidentemente divergente:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2ax} dx = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u} \frac{1}{(2a)} du = \frac{1}{(2a)} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u} du = -\frac{1}{(2a)} e^{-u} \Big|_{-\infty}^{+\infty}$$

e in tal caso la funzione d'onda è non normalizzabile.



Esercizi [53]

Esercizio 26

Si immagini una particella in moto 1-dimensionale lungo l'asse x . Si dica quali delle seguenti funzioni d'onda sono delle buone funzioni d'onda per la particella considerata:

$$(a) \quad \psi(x) = x^2 \qquad (b) \quad \psi(x) = \frac{1}{x} \qquad (c) \quad \psi(x) = e^{-x^2}$$

E' noto che la probabilità di trovare la particella in una regione infinitesima 1-dimensionale compresa tra x e $x + dx$ vale: $dW = \psi^*(x)\psi(x) dx$ se e solo se la funzione d'onda $\psi(x)$ è normalizzata.

Per la funzione d'onda (a) vale:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x)\psi(x) dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 x^2 dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\frac{x^5}{5} \Big|_{-\infty}^{+\infty} \right)^{1/2}}$$

e l'integrale al denominatore è evidentemente divergente. La funzione d'onda (a) dunque non è normalizzabile su tutto \mathbb{R} . Lo sarebbe stata se la funzione d'onda fosse stata ristretta su un dominio limitato $[-L, L]$. □

Esercizi [54]

Per la funzione d'onda (b) vale:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^2} dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(-\frac{1}{x} \Big|_{-\infty}^{+\infty} \right)^{1/2}}$$

e l'integrale al denominatore è evidentemente divergente. La funzione d'onda (b) dunque non è normalizzabile su tutto \mathbb{R} . Lo sarebbe stata se la funzione d'onda fosse stata ristretta su un dominio limitato $[-L, L]$. In ogni caso, la funzione d'onda (b) non è definita a causa della singolarità in $x = 0$. □

Per la funzione d'onda (c) vale:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \psi(x) dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-2x^2} dx \right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\frac{1}{2^{1/2}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-u^2} du \right)^{1/2}} = \pm \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4}$$

Per il calcolo si è fatto uso dell'integrale notevole:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2} dx = \pi^{1/2}$$

La funzione d'onda (c) dunque è normalizzabile su tutto \mathbb{R} .

La funzione d'onda normalizzata si scrive: $\psi(x) = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-x^2}$ ■

Esercizi [55]

Esercizio 27

La funzione d'onda di una particella confinata, nel suo stato fondamentale, in una buca di potenziale di larghezza L , ha la seguente forma:

$$\psi = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

Supponendo che $L=10.0$ nm calcolare la probabilità che la particella sia:

- (a) nel dominio spaziale tra $x_1=4.95$ e $x_2=5.05$ nm;
- (b) nel dominio spaziale tra $x_1=1.95$ e $x_2=2.05$ nm;
- (c) nel dominio spaziale tra $x_1=9.90$ e $x_2=10.00$ nm;
- (d) nella semidominio superiore (tra $x_1=5.00$ e $x_2=10.00$ nm);
- (e) nel terzo di dominio collocato al centro (tra $x_1=3.33$ e $x_2=6.66$ nm).

La probabilità infinitesima $d\omega$ di trovare la particella in un volumetto dV infinitesimo di spazio è calcolabile attraverso la seguente espressione:

$$d\omega(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) dV$$

Nel caso monodimensionale:

$$d\omega(x) = |\psi(x)|^2 dx = \psi^*(x)\psi(x) dx$$

Esercizi [56]

Per passare dal calcolo infinitesimo:

$$dw(x) = |\psi(x)|^2 dx = \psi^*(x)\psi(x) dx$$

al calcolo finito è necessario integrare nello spazio:

$$w(x)|_{x \in [a,b]} = \int_a^b |\psi(x)|^2 dx = \int_a^b \psi^*(x)\psi(x) dx$$

Sostituendo la funzione d'onda data si ottiene la probabilità di trovare la particella nel dominio finito $[a, b]$:

$$\begin{aligned} w(x)|_{x \in [a,b]} &= \int_a^b \left| \left(\frac{2}{L} \right)^{1/2} \text{sen} \left(\frac{\pi x}{L} \right) \right|^2 dx \\ &= \frac{2}{L} \int_a^b \text{sen}^2 \left(\frac{\pi x}{L} \right) dx \\ &= \left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi} \text{sen} \frac{2\pi x}{L} \right) \Big|_a^b \\ &= \frac{(b-a)}{L} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi b}{L} - \text{sen} \frac{2\pi a}{L} \right) \end{aligned}$$

Esercizi [57]

Vale:

$$w(x) \Big|_{x \in [a,b]} = \frac{(b-a)}{L} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi b}{L} - \text{sen} \frac{2\pi a}{L} \right)$$

con $L = 10.0 \text{ nm}$.

Si ottiene nei diversi casi:

$$\begin{aligned} \text{(a)} \quad w(x) \Big|_{x \in [4.95, 5.05]} &= \frac{(5.05 \text{ nm} - 4.95 \text{ nm})}{10.0 \text{ nm}} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi \cdot 5.05 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} - \text{sen} \frac{2\pi \cdot 4.95 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} \right) \\ &= 0.010 + 0.010 = 0.020 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(b)} \quad w(x) \Big|_{x \in [1.95, 2.05]} &= \frac{(2.05 \text{ nm} - 1.95 \text{ nm})}{10.0 \text{ nm}} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi \cdot 2.05 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} - \text{sen} \frac{2\pi \cdot 1.95 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} \right) \\ &= 0.010 + 0.031 = 0.007 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(c)} \quad w(x) \Big|_{x \in [10.00, 9.90]} &= \frac{(10.00 \text{ nm} - 9.90 \text{ nm})}{10.0 \text{ nm}} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi \cdot 10.00 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} - \text{sen} \frac{2\pi \cdot 9.90 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} \right) \\ &= 0.010 + 0.009993 = 6 \cdot 10^{-6} \end{aligned}$$

Esercizi [58]

$$\begin{aligned} \text{(d) } w(x, t) \Big|_{x \in [10.00, 5.00]} &= \frac{(10.00 \text{ nm} - 5.00 \text{ nm})}{10.0 \text{ nm}} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi \cdot 10.00 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} - \text{sen} \frac{2\pi \cdot 5.00 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} \right) \\ &= 0.5 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{(e) } w(x, t) \Big|_{x \in [(2/3)L, (1/3)L]} &= \frac{((2/3)10.0 \text{ nm} - (1/3)10.0 \text{ nm})}{10.0 \text{ nm}} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{2\pi \cdot (2/3)10.00 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} - \right. \\ &\quad \left. - \text{sen} \frac{2\pi \cdot (1/3)10.00 \text{ nm}}{10.0 \text{ nm}} \right) \\ &= \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi} \left(\text{sen} \frac{4\pi}{3} - \text{sen} \frac{2\pi}{3} \right) \\ &= 0.61 \end{aligned}$$



Esercizi [59]

Esercizio 28

Si consideri una buca di potenziale 2-dimensionale e una particella al suo interno confinata tra 0 e $L_x=L$ nella direzione x e tra 0 e $L_y=L$ nella direzione y . A partire dalla funzione d'onda normalizzata della particella:

$$\psi(x, y) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} \text{sen}\left(\frac{\pi y}{L}\right)$$

si calcoli la probabilità che la particella si trovi in una posizione della buca compresa:

- (a) tra $x_1 = 0$ e $x_2 = L/2$, $y_1 = 0$ e $y_2 = L/2$;
- (b) tra $x_1 = L/4$ e $x_2 = 3L/4$, $y_1 = L/4$ e $y_2 = 3L/4$.

La probabilità infinitesima $d\omega$ di trovare la particella in un volumetto infinitesimo dV di spazio è calcolabile attraverso la seguente espressione:

$$d\omega(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) dV$$

Nel caso bidimensionale:

$$d\omega(x, y) = |\psi(x, y)|^2 dx dy = \psi^*(x, y)\psi(x, y) dx dy$$

Esercizi [60]

Per passare dal calcolo infinitesimo al calcolo finito è necessario integrare nello spazio:

$$w(x, y) \Big|_{\substack{x \in [x_1, x_2] \\ y \in [y_1, y_2]}} = \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} |\psi(x, y)|^2 dx dy = \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \psi^*(x, y) \psi(x, y) dx dy$$

Sostituendo la funzione d'onda data si ottiene:

$$\begin{aligned} w(x, y) \Big|_{\substack{x \in [x_1, x_2] \\ y \in [y_1, y_2]}} &= \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \left(\frac{2}{L}\right) \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) \cdot \left(\frac{2}{L}\right) \text{sen}^2\left(\frac{\pi y}{L}\right) dx dy \\ &= \int_{x_1}^{x_2} \left(\frac{2}{L}\right) \text{sen}^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx \cdot \int_{y_1}^{y_2} \left(\frac{2}{L}\right) \text{sen}^2\left(\frac{\pi y}{L}\right) dy \end{aligned}$$

Gli integrali si risolvono facilmente per sostituzione prime e per parti poi.

Alla fine del calcolo risulta:

$$w(x, y) \Big|_{\substack{x \in [x_1, x_2] \\ y \in [y_1, y_2]}} = \left\{ \frac{x_2 - x_1}{L} - \frac{1}{2\pi} \left[\left(\text{sen} \left(\frac{2\pi x_2}{L} \right) - \text{sen} \left(\frac{2\pi x_1}{L} \right) \right) \right] \right\} \cdot \left\{ \frac{y_2 - y_1}{L} - \frac{1}{2\pi} \left[\left(\text{sen} \left(\frac{2\pi y_2}{L} \right) - \text{sen} \left(\frac{2\pi y_1}{L} \right) \right) \right] \right\}$$

Esercizi [61]

La probabilità di trovare la particella tra $x_1=0$ e $x_2=L/2$, $y_1=0$ e $y_2=L/2$ risulta:

$$\begin{aligned} w(x, y) \Big|_{\substack{x \in [0, L/2] \\ y \in [0, L/2]}} &= \left\{ \frac{(L/2) - 0}{L} - \frac{1}{2\pi} \left[\left(\text{sen} \left(\frac{2\pi L}{L} \frac{L}{2} \right) - \text{sen} \left(\frac{2\pi}{L} 0 \right) \right) \right] \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ \frac{(L/2) - 0}{L} - \frac{1}{2\pi} \left[\left(\text{sen} \left(\frac{2\pi L}{L} \frac{L}{2} \right) - \text{sen} \left(\frac{2\pi}{L} 0 \right) \right) \right] \right\} \\ &= \frac{1}{4} \end{aligned}$$

La probabilità di trovare la particella tra $x_1=L/4$ e $x_2=3L/4$, $y_1=L/4$ e $y_2=3L/4$ risulta:

$$\begin{aligned} w(x, y) \Big|_{\substack{x \in [L/4, 3L/4] \\ y \in [L/4, 3L/4]}} &= \left\{ \frac{(3L/4) - (L/4)}{L} - \frac{1}{2\pi} \left[\left(\text{sen} \left(\frac{2\pi 3L}{L} \frac{L}{4} \right) - \text{sen} \left(\frac{2\pi L}{L} \frac{L}{4} \right) \right) \right] \right\} \\ &\quad \cdot \left\{ \frac{(3L/4) - (L/4)}{L} - \frac{1}{2\pi} \left[\left(\text{sen} \left(\frac{2\pi 3L}{L} \frac{L}{4} \right) - \text{sen} \left(\frac{2\pi L}{L} \frac{L}{4} \right) \right) \right] \right\} \\ &= \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi} \right)^2 \end{aligned}$$



Esercizi [62]

Esercizio 29

La funzione d'onda dell'atomo d'idrogeno si scrive:

$$\psi(r) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r/a_0}$$

con $a_0 = 53$ pm.

Calcolare la probabilità che l'elettrone possa essere trovato all'interno di una sfera con raggio a_0 centrata sul nucleo.

Vale:

$$dw(\mathbf{r}) = |\psi(\mathbf{r})|^2 dV$$

$$w(\mathbf{r})|_{sfera} = \int_{sfera} |\psi(\mathbf{r})|^2 dV$$

Passando alle coordinate polari (problema a simmetria sferica...):

$$w(r)|_{Sfera(r \leq a_0)} = \int_0^{a_0} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} |\psi(r, \theta, \phi)|^2 r^2 \sin\theta d\theta d\phi dr$$

Esercizi [63]

Analiticamente:

$$w(r)|_{Sfera(r \leq a_0)} = \int_0^{a_0} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \psi^*(r, \theta, \phi) \psi(r, \theta, \phi) r^2 \operatorname{sen}\theta d\theta d\phi dr$$

$$\psi(r, \theta, \phi) = \left(\frac{1}{\pi a_0^3} \right)^{1/2} e^{-r a_0}$$

$$\begin{aligned} w(r)|_{Sfera(r \leq a_0)} &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{a_0} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^2 e^{-2r a_0} \operatorname{sen}\theta d\theta d\phi dr \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{a_0} r^2 e^{-2r a_0} dr \int_0^\pi \operatorname{sen}\theta d\theta \int_0^{2\pi} d\phi \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \int_0^{a_0} r^2 e^{-2r a_0} dr \cdot (2) \cdot (2\pi) \\ &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \int_0^{a_0} \left(\frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} \right) 2r dr \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi) \end{aligned}$$

Esercizi [64]

$$\begin{aligned}
 &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{-a_0} \int_0^{a_0} e^{-2r a_0} r \, dr \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi) \\
 &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{-a_0} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r \Big|_0^{a_0} - \int_0^{a_0} \left(\frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} \right) 1 \, dr \right\} \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi) \\
 &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{+2a_0^2} r \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{-a_0} \int_0^{a_0} \left(\frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} \right) 1 \, dr \right\} \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi) \\
 &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{+2a_0^2} r \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{-a_0} \left\{ \frac{1}{-2a_0} \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} \Big|_0^{a_0} \right\} \right\} \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi) \\
 &= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{+2a_0^2} r \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{-a_0} \frac{1}{-2a_0} \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} \Big|_0^{a_0} \right\} \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi)
 \end{aligned}$$

Esercizi [65]

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \frac{e^{-2r a_0}}{+2a_0^2} r \Big|_0^{a_0} + \frac{1}{-a_0} \frac{1}{-2a_0} \frac{e^{-2r a_0}}{-2a_0} \Big|_0^{a_0} \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi)$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ e^{-2r a_0} \left(-\frac{1}{2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{2a_0^2} r \Big|_0^{a_0} - \frac{1}{4a_0^3} \Big|_0^{a_0} \right) \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi)$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ -e^{-2r a_0} \left(\frac{1}{2a_0} r^2 \Big|_0^{a_0} + \frac{1}{2a_0^2} r \Big|_0^{a_0} + \frac{1}{4a_0^3} \Big|_0^{a_0} \right) \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi)$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ -e^{-2r a_0} \left(\frac{r^2}{2a_0} + \frac{r}{2a_0^2} + \frac{1}{4a_0^3} \right) \Big|_0^{a_0} \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi)$$

$$= \frac{1}{\pi a_0^3} \left\{ -e^{-2a_0^2} \left(\frac{a_0^2}{2a_0} + \frac{a_0}{2a_0^2} + \frac{1}{4a_0^3} \right) + 1 \left(\frac{1}{4a_0^3} \right) \right\} \cdot (2) \cdot (2\pi)$$

Si noti che per $a_0 > 0$ il termine all'interno della parentesi graffa è positivo. ■