Corso di Laurea in Chimica Industriale

Chimica Fisica II

Lezione 4

Particella libera

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

Particella libera (1)

Prologo: particella libera e particelle confinate

Una delle proprietà più singolari della meccanica delle particelle quantistiche consiste nell'esistenza di livelli energetici discreti (quantizzazione). La necessità di postulare questa discretezza si è rivelata fin dagli albori della fisica quantistica...
Tuttavia nei limiti della fisica classica l'ammissione della discretezza degli stati atomici è stata una proposizione assolutamente estranea che contraddiceva tutto il sistema delle nozioni classiche.

La meccanica quantistica, con le sue equazioni, rende conto della discretezza in modo assolutamente naturale. L'introduzione di numeri quantici per descrivere i possibili valori osservati dei diversi osservabili che caratterizzano un determinato sistema quantistico deriva essenzialmente dalla presenza di un campo di forze (ossia di un potenziale) che operi causando un confinamento spaziale del sistema.

Particella libera (2)

La trattazione quantistica (risoluzione dell'equazione di Schroedinger) della particella libera (particella soggetta ad un potenziale $U(x,t) = U_0$ che senza perdita di generalità può essere assunto nullo) porta a stati del sistema non quantizzati. In questo caso le funzioni d'onda soluzione dell'equazione di Schroedinger descrivono stati necessariamente caratterizzati da energie continue…

La trattazione quantistica (risoluzione dell'equazione di Schroedinger) di particelle confinate (particelle soggette ad un potenziale conservativo $U(x,t) = U(x)$ con $U(x)$ funzione analitica non dipendente dal tempo ma solo dallo spazio) porta a stati del sistema quantizzati. In questo caso le funzioni d'onda soluzione dell'equazione di Schroedinger descrivono stati necessariamente caratterizzati da energie discrete…

Particella libera (3)

La trattazione quantistica (risoluzione dell'equazione di Schroedinger) della particella libera (particella soggetta ad un potenziale $U(x,t) = U_0$ che senza perdita di generalità può essere assunto nullo) porta a stati del sistema non quantizzati. In questo caso le funzioni d'onda soluzione dell'equazione di Schroedinger descrivono stati necessariamente caratterizzati da energie continue…

La trattazione quantistica (risoluzione dell'equazione di Schroedinger) di particelle confinate (particelle soggette ad un potenziale conservativo $U(x,t) = U(x)$ con $U(x)$ funzione analitica non dipendente dal tempo ma solo dallo spazio) porta a stati del sistema quantizzati. In questo caso le funzioni d'onda soluzione dell'equazione di Schroedinger descrivono stati necessariamente caratterizzati da energie discrete…

In tal caso…
La quantizzazione delle energie di un sistema quantistico deriva essenzialmente dalla presenza di un campo di potenziale che operi nello spazio un confinamento del sistema. Di qui la necessità di introdurre numeri quantici per caratterizzare i possibili valori misurabili degli osservabili relativi ad un sistema quantistico confinato.

Atomi e molecole sono sistemi quantistici costituiti da elettroni confinati nello spazio dai campi di forze generati dai nuclei. In tal caso i diversi osservabili che caratterizzano sistemi atomici e molecolari devono necessariamente dipendere da numeri quantici.

Particella libera (4)

Nello sviluppo storico della meccanica quantistica l'interpretazione della quantizzazione degli osservabili di un sistema in riferimento alla presenza di un potenziale confinante ha costituito senza dubbio il primo, fondamentale, risultato concettuale ritenuto assolutamente rilevante….

Tuttavia ben presto ci si accorse che dall'equazione fondamentale della meccanica quantistica e dall'interpretazione del significato delle sue soluzioni derivano anche altre conseguenze non meno originali della quantizzazione.

L'interpretazione delle funzioni d'onda in termini di densità di probabilità (Born e scuola di Copenhagen) ha permesso di dare una spiegazione ad una serie di fenomeni osservati inerenti il comportamento di elettroni confinati in buche di potenziale (stati elettronici di minima energia non nulla…) o in regioni di spazio caratterizzate da barriere di potenziale (effetto tunnel…).

Fenomeni inerenti il trasporto di carica (conduzione elettrica) in sistemi caratterizzati da interfaccie di materiali diversi, conduttori e non, non sarebbero interpretabili senza le leggi fondamentali della meccanica quantistica…

Non ultimo l'interpretazione delle funzioni d'onda ha permesso di comprendere il significato più profondo della meccanica quantistica ed arrivare ad enunciare quell' misterioso ed enigmatico principio denominato principio di indeterminazione di Heisemberg…

Particella libera (5)

Soluzione dell'equazione di Schroedinger per la particella libera

L'equazione di Schroedinger per la particella quantistica libera (1-dimensionale):

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2}$$

caratterizzata da un campo scalare di potenziale:

$$U(x,t) = U_0 = 0$$

può essere risolta attraverso la tecnica di separazione delle variabili.

Assumendo la soluzione della forma:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) = e^{i(kx-\omega t)} \qquad k = \frac{2\pi}{\lambda} = 2\pi\bar{\nu} \quad \omega = \frac{2\pi}{P} = 2\pi\nu \quad \omega = kc$$

l'equazione si può riscrivere sottoforma di sistema di due equazioni, la prima dipendente solo dal tempo (evoluzione temporale degli stati) e la seconda dipendente solo dallo spazio (funzione d'onda dello stato stazionario).

$$\frac{\partial \varphi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\varphi(t)$$

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

Particella libera (6)

Per quanto inerente l'evoluzione temporale, la semplice equazione differenziale:

$$\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\varphi(t)$$

ha soluzione:

$$\varphi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

che si può riscrivere nella forma:

$$\varphi(t) = e^{-i\omega t} \qquad \text{con} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Particella libera (6)

Per quanto inerente l'evoluzione temporale, la semplice equazione differenziale:

$$\frac{\partial\varphi(t)}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar}E\varphi(t)$$

ha soluzione:

$$\varphi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$$

che si può riscrivere nella forma:

$$\varphi(t) = e^{-i\omega t} \qquad \text{con} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

Per quanto riguarda l'altra equazione differenziale dipendente solo dalle coordinate spaziali, quella denominata dello stato stazionario:

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

è facile verificare che una possibile soluzione può essere scritta nella forma:

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \qquad \text{con} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$$

e con A e B coefficienti reali.

Particella libera (7)

Vale infatti:

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

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right)$$

$$= -\frac{\hbar^2}{2m}\left(A(ik)^2 e^{ikx} + B(-ik)^2 e^{-ikx}\right)$$

$$= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right)$$

$$= E\left(Ae^{ikx} + Be^{-ikx}\right) \qquad \text{con:} \qquad E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

In tal caso la funzione d'onda completa per la particella libera si scrive:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\varphi(t) = \left(A\,e^{ikx} + B\,e^{-ikx}\right)\,e^{-i\omega t} = A\,e^{ikx}e^{-i\omega t} + B\,e^{-ikx}e^{-i\omega t}$$

La soluzione generale $\Psi(x,t)$ dell'equazione di Schroedinger della particella libera può essere scritta dunque come combinazione lineare (a coefficienti A e B reali) di due funzioni esponenziali a valori complessi:

$$\boxed{\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} + B\,e^{-i(kx+\omega t)} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}}$$

Particella libera (8)

La funzione d'onda per la particella libera può scriversi dunque:

$$\boxed{\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} + B\,e^{-i(kx+\omega t)} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}}$$

con coefficienti A e B reali.

Nel caso particolare in cui nella soluzione generale si ponga $B=0$ la funzione d'onda continua ad essere a valori complessi e vale:

$$\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} = \Psi_{\rightarrow}(x,t)$$

con modulo quadrato:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) = \left|A\right|^2$$

La densità di probabilità è dunque indipendente da x e questo significa che lo è anche la probabilità dw di trovare la particella in una certa regione di spazio dx:

$$dw = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = \left|A\right|^2 dx$$

La funzione d'onda:

$$\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} = \Psi_{\rightarrow}(x,t)$$

è associata ad una particella in moto equiverso all'asse x e completamente delocalizzata sull'intero asse x …

Particella libera (9)

Un discorso analogo vale nel caso in cui nella soluzione generale:

$$\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} + B\,e^{-i(kx+\omega t)}$$

si ponga $A=0$ e in tal caso vale:

$$\Psi(x,t) = B\,e^{-i(kx+\omega t)} = \Psi_{\leftarrow}(x,t)$$

con modulo quadrato:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) = |A|^2$$

La densità di probabilità è dunque indipendente da x e questo significa che lo è anche la probabilità dw di trovare la particella in una certa regione di spazio dx:

$$dw = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = |A|^2\,dx$$

La funzione d'onda:

$$\Psi(x,t) = B\,e^{-i(kx+\omega t)} = \Psi_{\leftarrow}(x,t)$$

è associata ad una particella in moto controverso all'asse x e completamente delocalizzata sull'intero asse x …

Particella libera (10)

Nel caso particolare in cui nella soluzione generale:

$$\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)} + B\, e^{-i(kx+\omega t)} = \Psi_{\rightarrow}(x,t) + \Psi_{\leftarrow}(x,t)$$

si ponga $A = B$ (reali) la funzione d'onda continua ad essere a valori complessi e si scrive:

$$\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)} + A\, e^{-i(kx+\omega t)} = \Psi_{\rightarrow}(x,t) + \Psi_{\leftarrow}(x,t)$$

con modulo quadrato:

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \Psi^*(x,t)\Psi(x,t) = \left(A^* e^{-i(kx-\omega t)} + A^* e^{i(kx+\omega t)}\right)\left(A e^{i(kx-\omega t)} + A e^{-i(kx+\omega t)}\right)$$
$$= \ldots. = 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)$$

La densità di probabilità è dunque dipendente da x e questo significa che lo è anche la probabilità dw di trovare la particella in una certa regione di spazio dx:

$$dw = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)\, dx$$

La funzione d'onda:

$$\Psi(x,t) = A\, e^{i(kx-\omega t)} + A\, e^{-i(kx+\omega t)} = \Psi_{\rightarrow}(x,t) + \Psi_{\leftarrow}(x,t)$$

è dunque associata ad una particella simultaneamente in moto (nell'istante t) nel verso dell'asse x positivo e nel verso opposto all'asse x negativo…

Particella libera (10)

Nel cas

$\Psi(x,t)$

si pong ... ssi e si

scrive:

$\Psi(x,t)$

con mo

$|\Psi(x,t$ ... $\omega t)\big)$

La den ... ne lo è

anche l ... dx:

$dw = |\Psi$

> *"If quantum mechanics hasn't profoundly shocked you, you haven't understood it yet."*
>
> Niels Bohr (1885- 1962)

> *"I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics."*
>
> Richard Phillips *Feynman* (1918 – 1988)

La funzione d'onda:

$$\Psi(x,t) = A\,e^{i(kx-\omega t)} + A\,e^{-i(kx+\omega t)} = \Psi_{\rightarrow}(x,t) + \Psi_{\leftarrow}(x,t)$$

è dunque associata ad una particella simultaneamente in moto (nell'istante t) nel verso dell'asse x positivo e nel verso opposto all'asse x negativo…

Particella libera (11)

Il modulo quadro della funzione d'onda fornisce la densità di probabilità di trovare la particella libera nello spazio 1-dimensionale.

Analiticamente:

$$
\begin{aligned}
\left|\Psi(x,t)\right|^2 &= \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t) \\
&= \left(A^*\, e^{-i(kx-\omega t)} + A^*\, e^{i(kx+\omega t)}\right)\left(A\, e^{i(kx-\omega t)} + A\, e^{-i(kx+\omega t)}\right) \\
&= |A|^2 \left(e^{i(kx-\omega t)} e^{-i(kx-\omega t)} + e^{i(kx-\omega t)} e^{i(kx+\omega t)} + e^{-i(kx+\omega t)} e^{-i(kx-\omega t)} + \right. \\
&\qquad\qquad \left. + e^{-i(kx+\omega t)} e^{i(kx+\omega t)}\right) \\
&= |A|^2 \left(1 + e^{i(kx-\omega t)} e^{i(kx+\omega t)} + e^{-i(kx+\omega t)} e^{-i(kx-\omega t)} + 1\right) \\
&= |A|^2 \left(2 + e^{i(2kx)} + e^{-i(2kx)}\right) \\
&= |A|^2 \left(2 + 2\cos(2kx)\right) \\
&= 2|A|^2 \left(1 + \cos(2kx)\right) \\
&= 2|A|^2 \left(\mathrm{sen}^2(kx) + \cos^2(kx) + \cos^2(kx) - \mathrm{sen}^2(kx)\right) \\
&= 4|A|^2 \cos^2(kx)
\end{aligned}
$$

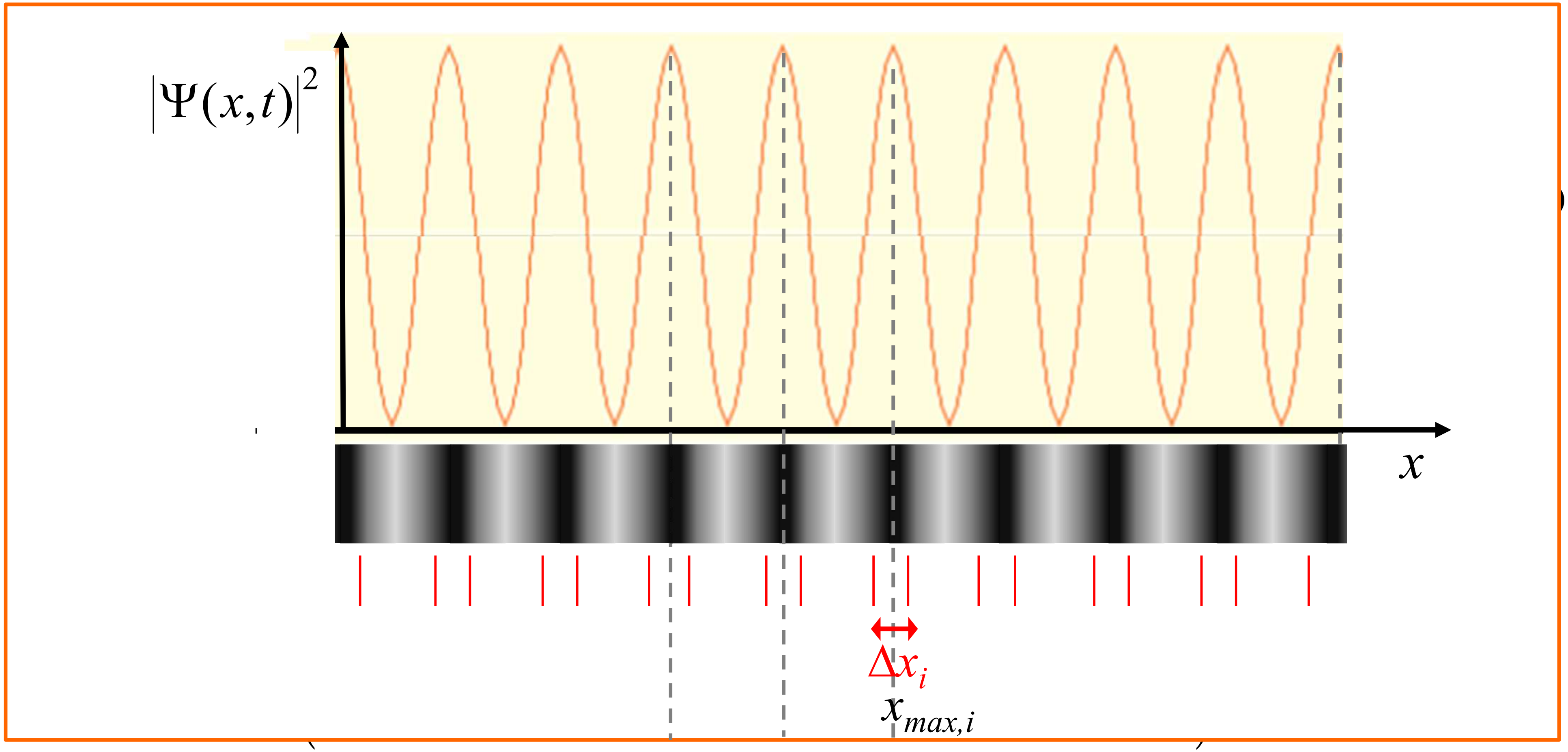
Anche in questo caso la particella continua ad essere delocalizzata nello spazio…

Particella libera (11)

Il modulo quadro della funzione d'onda fornisce la densità di probabilità di trovare la particella libera nello spazio 1-dimensionale.

Analiticamente:

$$|\Psi(x,t)|^2 = \Psi^*(x,t)\,\Psi(x,t)$$



$$= 4|A|^2 \cos^2(kx)$$

Anche in questo caso la particella continua ad essere delocalizzata nello spazio x…

Particella libera (12)

Per una particella libera valgono in definitiva:

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)} + A e^{-i(kx+\omega t)} \qquad \text{con:} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \left|\psi(x,t)\right|^2 = 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)$$

Sulla base dell'interpretazione della funzione d'onda in termini di densità di probabilità si può scrivere che la probabilità di trovare la particella nell'elemento di linea infinitesimo dx centrato nella posizione x vale:

$$dw = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)\, dx$$

che implica una delocalizzazione della particella…

Particella libera (13)

Per una particella libera valgono in definitiva:

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)} + A e^{-i(kx+\omega t)} \qquad \text{con:} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

$$\left|\Psi(x,t)\right|^2 = \left|\psi(x,t)\right|^2 = 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)$$

Sulla base dell'interpretazione della funzione d'onda in termini di densità di probabilità si può scrivere che la probabilità di trovare la particella nell'elemento di linea infinitesimo dx centrato nella posizione x vale:

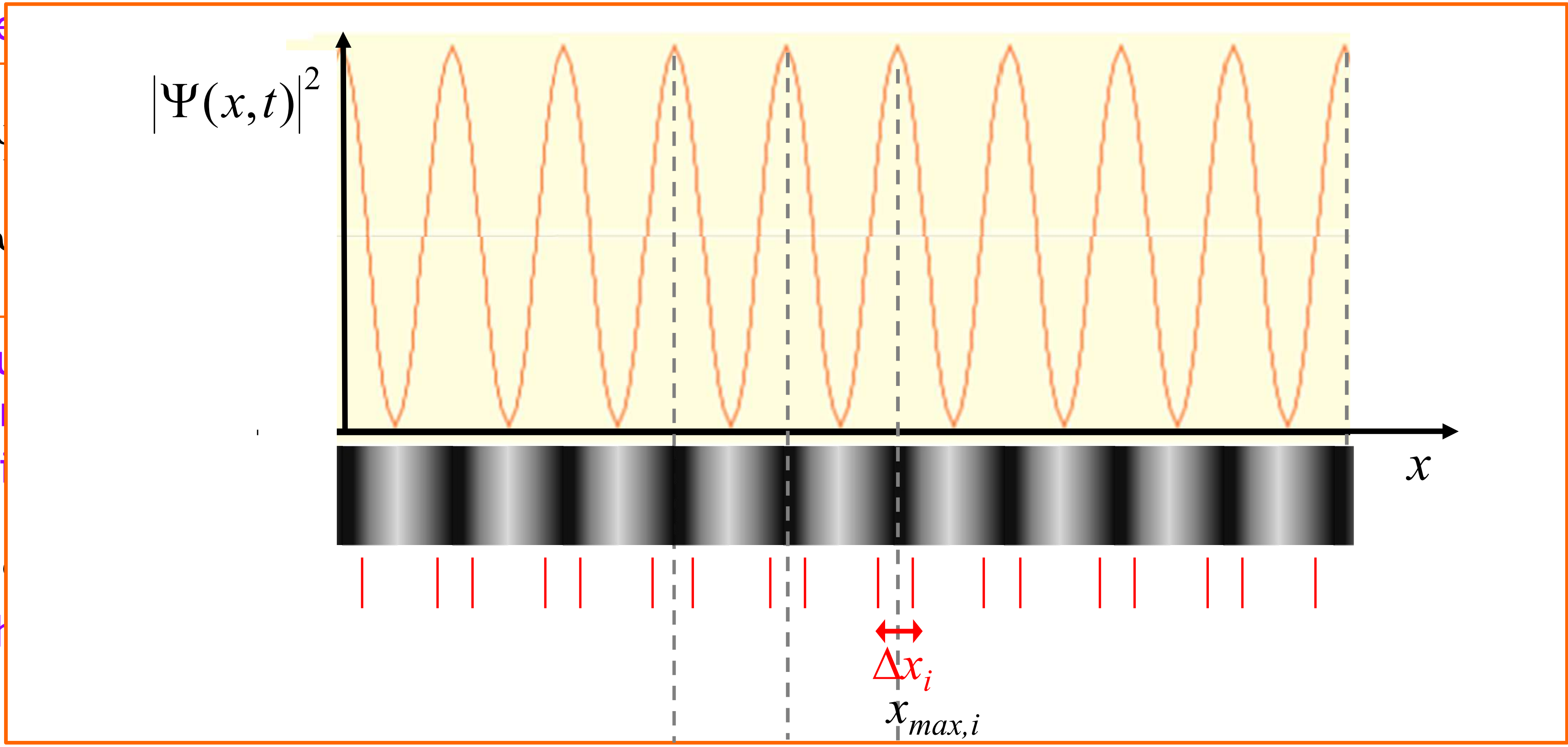
$$dw = \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)\, dx$$

che implica una delocalizzazione della particella...

Siano $x_{\max,i}$ $(i = 1,2,3,\ldots)$ le posizioni corrispondenti ai massimi di densità di probabilità. Integrando sulla regione $[x_{\max,i} - \Delta x/2 \, , \, x_{\max,i} + \Delta x/2]$ si ottiene la probabilità di trovare la particella all'interno della regione Δx centrata sulla posizione $x_{\max,i}$ dell' i-esimo massimo:

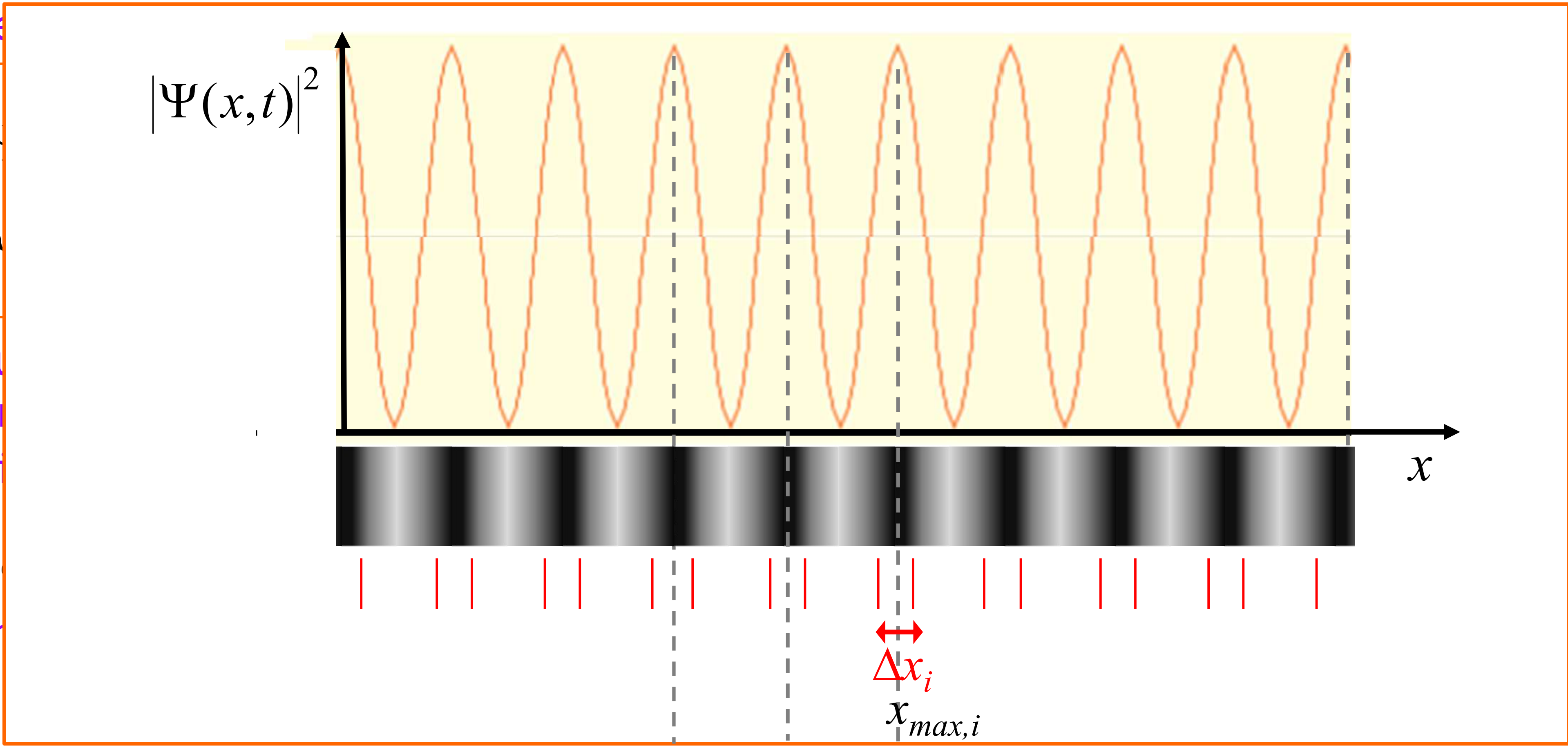
$$w\left(x_{\max,i}\right) = \int_{x_{\max,i}-\Delta x/2}^{x_{\max,i}+\Delta x/2} \left|\Psi(x,t)\right|^2 dx = \int_{x_{\max,i}-\Delta x/2}^{x_{\max,i}+\Delta x/2} 4\left|A\right|^2 \cos^2(kx)\, dx$$

Particella libera (14)



Siano $x_{\max,i}$ ($i = 1,2,3,\ldots$) le posizioni corrispondenti ai massimi di densità di probabilità. Integrando sulla regione $[x_{\max,i} - \Delta x/2\ ,\ x_{\max,i} + \Delta x/2]$ si ottiene la probabilità di trovare la particella all'interno della regione Δx centrata sulla posizione $x_{\max,\mathrm{i}}$ dell' i-esimo massimo:

$$w\left(x_{\max,i}\right) = \int_{x_{\max,i}-\Delta x/2}^{x_{\max,i}+\Delta x/2} \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = \int_{x_{\max,i}-\Delta x/2}^{x_{\max,i}+\Delta x/2} 4\left|A\right|^2 \cos^2\left(kx\right) dx$$



Avendo considerato tutte e sole posizioni $x_{\max,i}$ ($i = 1,2,3,\ldots$) che massimizzano la densità di probabilità è evidente che, per valori di Δx presi sufficientemente piccoli ($\Delta x << \left|x_{\max,i} - x_{\max,i-1}\right|$), il calcolo dell'integrale porta a valori di probabilità non nulli e sempre uguali indipendentemente dall'i-esimo massimo considerato.

$$w\left(x_{\max,i}\right) = \int_{x_{\max,i}-\Delta x/2}^{x_{\max,i}+\Delta x/2} \left|\Psi\left(x,t\right)\right|^2 dx = \int_{x_{\max,i}-\Delta x/2}^{x_{\max,i}+\Delta x/2} 4\left|A\right|^2 \cos^2\left(kx\right) dx$$

Questo significa che, per ogni istante di tempo, la particella può venire a trovarsi simultaneamente in infinite regioni dello spazio…!!!

Particella libera (16)

Il principio di indeterminazione applicato alla particella libera

L'espressione della funzione d'onda della particella libera:

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)} + A e^{-i(kx+\omega t)} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

è quella di un'onda *complessa* monocromatica, valendo come noto:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Questo implica che l'impulso p della particella libera (per ogni istante t) risulta ben definito (dalla relazione di De Broglie) e quindi che l'indeterminazione Δp_x sull'impulso tende a zero.

In definitiva per la particella libera vale $\Delta p_x \to 0$.

Particella libera (17)

Il principio di indeterminazione applicato alla particella libera

L'espressione della funzione d'onda della particella libera:

$$\Psi(x,t) = A e^{i(kx-\omega t)} + A e^{-i(kx+\omega t)} \qquad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar}$$

è quella di un'onda *complessa* monocromatica, valendo come noto:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Questo implica che l'impulso p della particella libera (per ogni istante t) risulta ben definito (dalla relazione di De Broglie) e quindi che l'indeterminazione Δp_x sull'impulso tende a zero.

In definitiva per la particella libera vale $\Delta p_x \to 0$.

D'altra parte la densità di probabilità di posizione della particella libera:

$$|\psi(x,t)|^2 = 4|A|^2 \cos^2(kx)$$

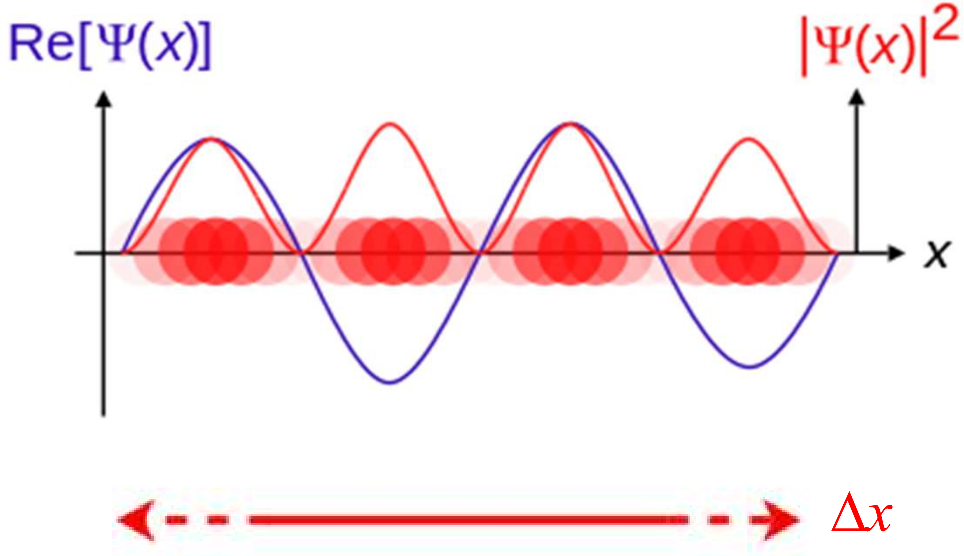
ha un andamento oscillante nello spazio e non dipende dal tempo. Questo significa che, per ogni istante di tempo, la particella può venire a trovarsi simultaneamente in infinite regioni dello spazio…

In definitiva per la particella libera quantistica vale $\Delta x \to \infty$.

Particella libera (18)

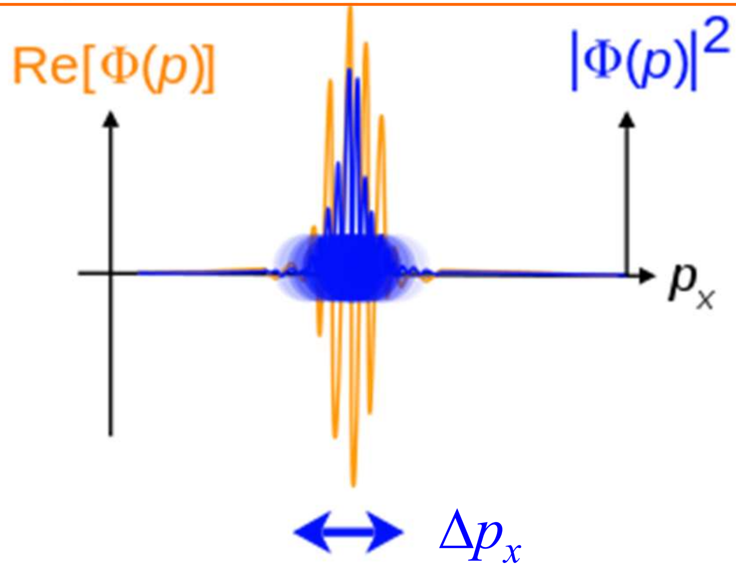
La particelle quantistica libera è descrivibile in termini di una funzione d'onda monocromatica. Questo porta alla determinazione esatta del suo impulso $p_x = h/\lambda$ e alla completa delocalizzazione della sua posizione x…

La particella libera è dunque caratterizzata da un impulso determinato ($\Delta p_x \to 0$) ma da una posizione completamente indeterminata ($\Delta x \to \infty$) .



posizione x indeterminata

$\Delta x \to +\infty$



impulso p determinato

$\Delta p_x \to 0$

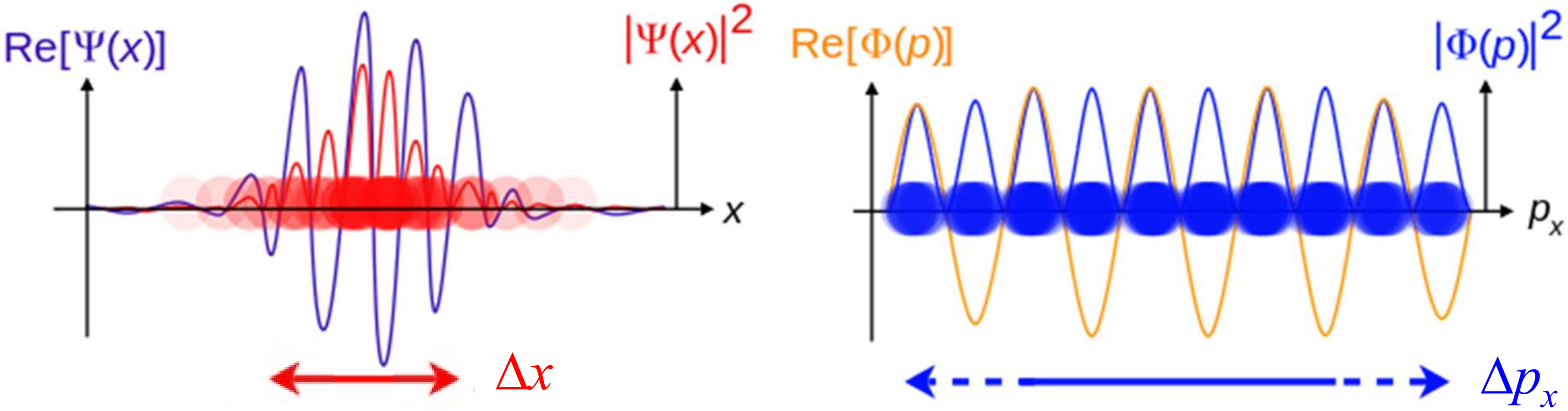
Il risultato è in accordo con il principio di indeterminazione di Heisemberg…

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$$

Particella libera (19)

Particelle quantistiche soggette all'azione di un campo di forze sono descrivibili in termini di pacchetti d'onda. Un pacchetto d'onda, in termini di analisi di Fourier, è il risultato della sovrapposizione di un numero molto grande (al limite infinito) di onde monocromatiche caratterizzate da lunghezze d'onda e ampiezze diverse. Questo porta ad un'indeterminazione sull'impulso p_x della particella e alla localizzazione della sua posizione x…

La particella legata è dunque caratterizzata da una posizione determinata $(\Delta x \to 0)$ ma da un impulso completamente indeterminato $(\Delta p_x \to 0)$.



posizione x determinata

$\Delta x \to 0$

impulso p indeterminato

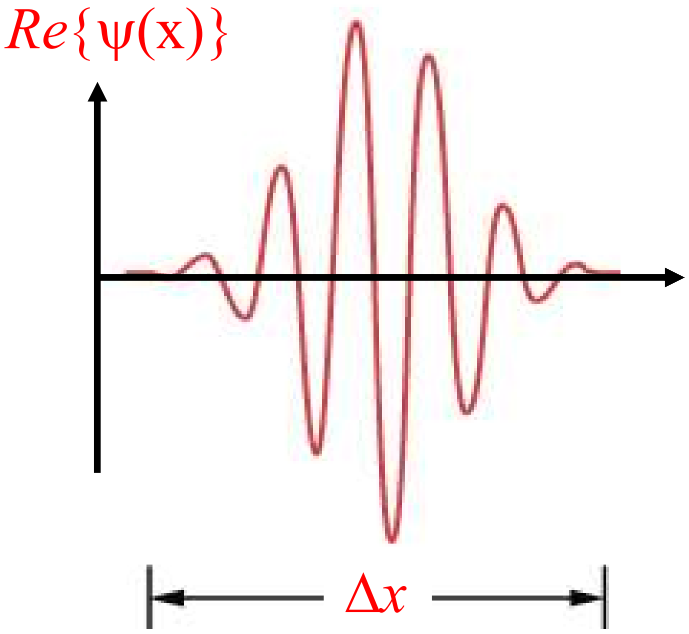
$\Delta p_x \to +\infty$

Il risultato è in accordo con il principio di indeterminazione di Heisemberg…

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \hbar/2$$

Particella libera (20)

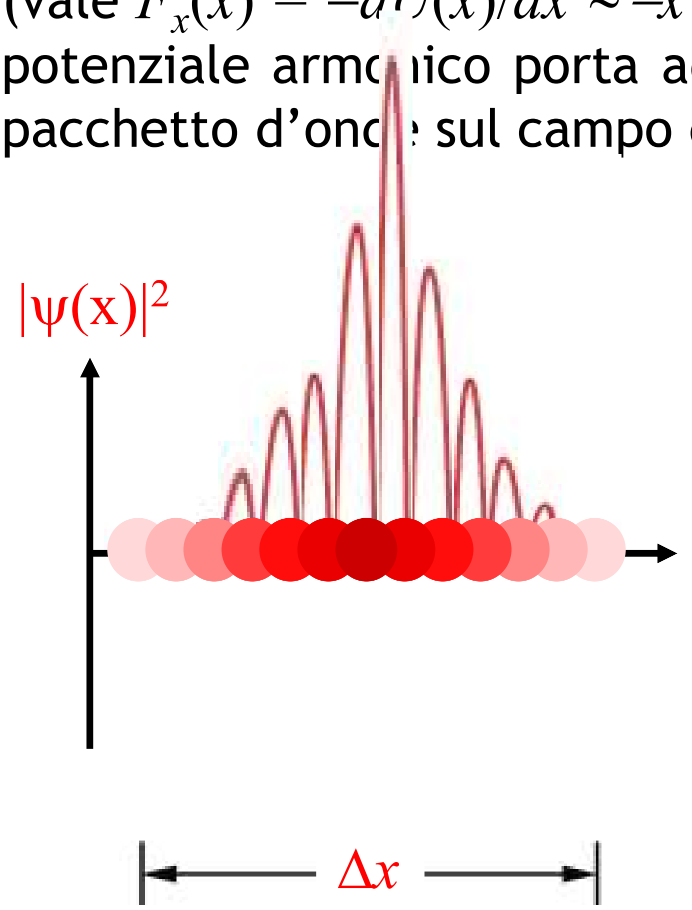
Una particella confinata nello spazio è caratterizzata da una buca di energia potenziale. Si assuma che tale buca sia descritta da una funzione analitica di tipo $U(x) \sim x^2$. In tal caso la forza confinante la particella è una forza di tipo armonico (vale $F_x(x) = -dU(x)/dx \sim -x$). La risoluzione dell'equazione di Schroedinger con un potenziale armonico porta ad una funzione d'onda descritta analiticamente da un pacchetto d'onde sul campo complesso...



delocalizzazione
sulla posizione
della particella!

Particella libera (21)

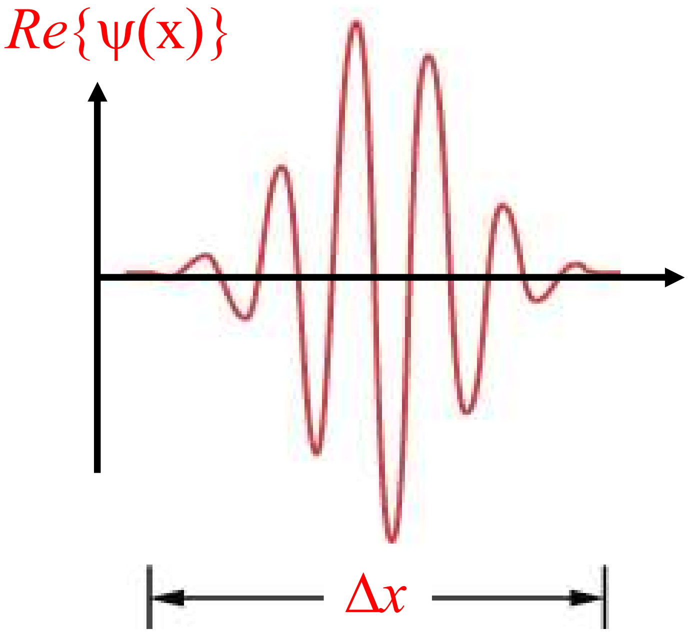
Una particella confinata nello spazio è caratterizzata da una buca di energia potenziale. Si assuma che tale buca sia descritta da una funzione analitica di tipo $U(x) \sim x^2$. In tal caso la forza confinante la particella è una forza di tipo armonico (vale $F_x(x) = -dU(x)/dx \sim -x$). La risoluzione dell'equazione di Schroedinger con un potenziale armonico porta ad una funzione d'onda descritta analiticamente da un pacchetto d'onde sul campo complesso...



delocalizzazione
sulla posizione
della particella!

Particella libera (22)

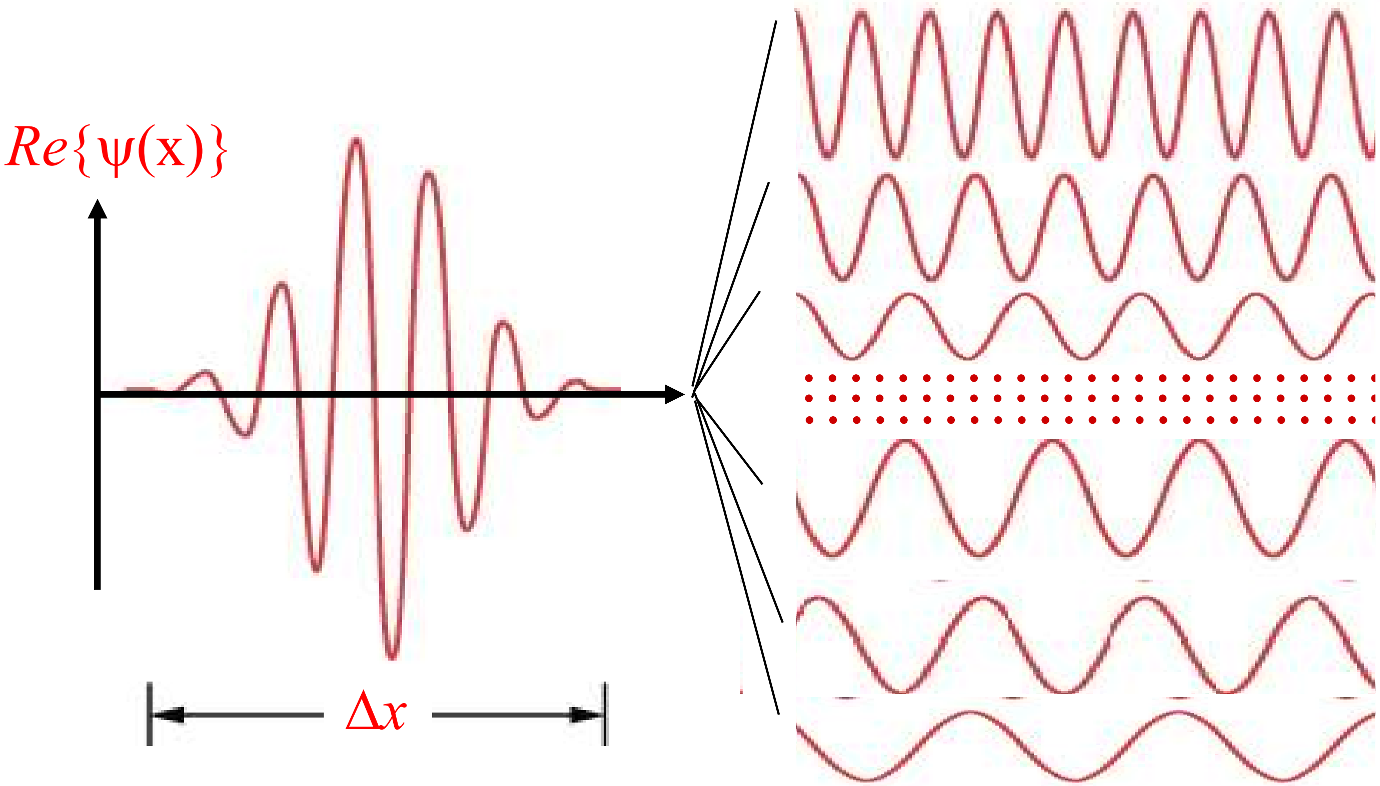
Una particella confinata nello spazio è caratterizzata da una buca di energia potenziale. Si assuma che tale buca sia descritta da una funzione analitica di tipo $U(x) \sim x^2$. In tal caso la forza confinante la particella è una forza di tipo armonico (vale $F_x(x) = -dU(x)/dx \sim -x$). La risoluzione dell'equazione di Schroedinger con un potenziale armonico porta ad una funzione d'onda descritta analiticamente da un pacchetto d'onde sul campo complesso...



delocalizzazione
sulla posizione
della particella!

Particella libera (23)

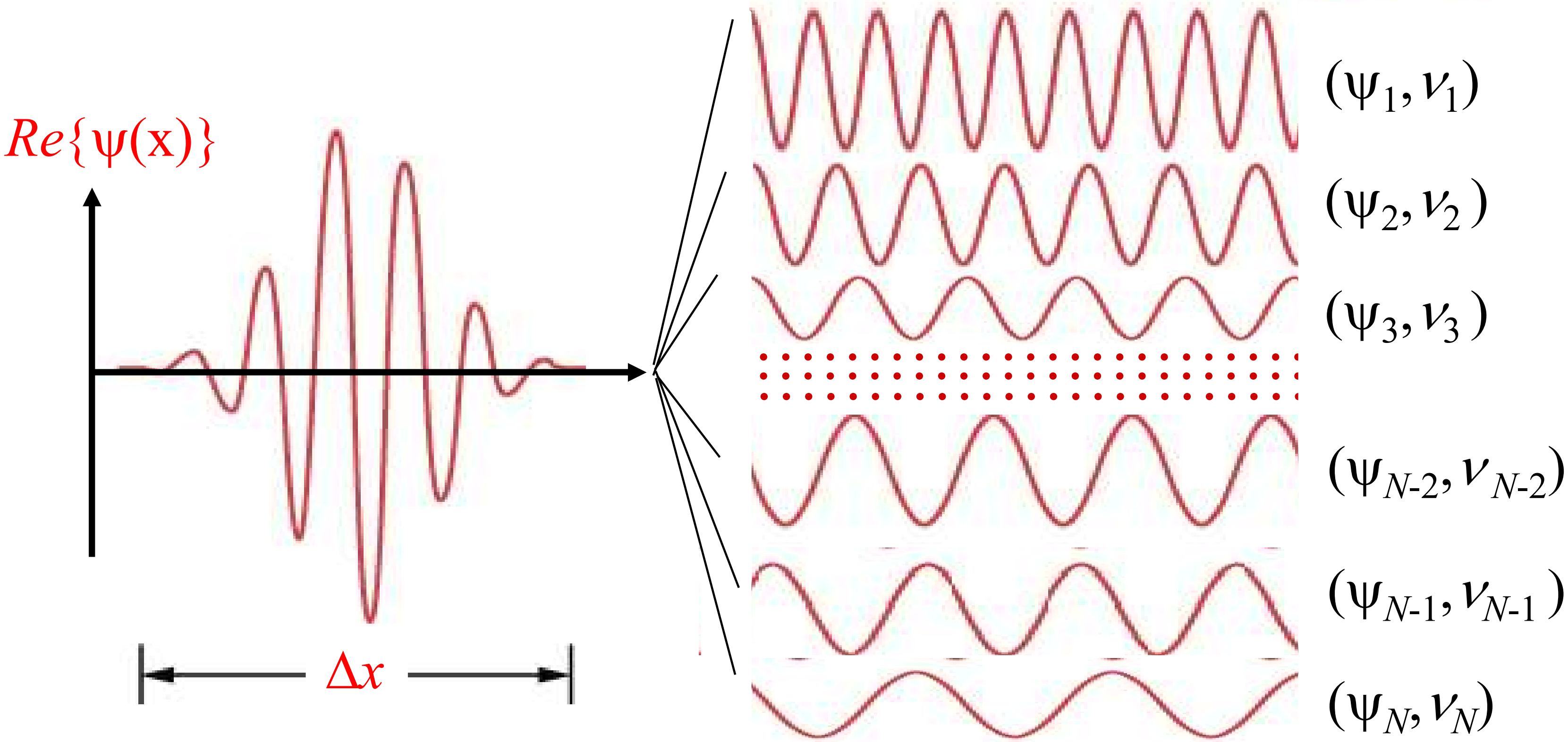
Una particella confinata nello spazio è caratterizzata da una buca di energia potenziale. Si assuma che tale buca sia descritta da una funzione analitica di tipo $U(x) \sim x^2$. In tal caso la forza confinante la particella è una forza di tipo armonico (vale $F_x(x) = -dU(x)/dx \sim -x$). La risoluzione dell'equazione di Schroedinger con un potenziale armonico porta ad una funzione d'onda descritta analiticamente da un pacchetto d'onde sul campo complesso...



Secondo la teoria di Fourier, un pacchetto d'onda di questo tipo è il risultato della sovrapposizione spaziale di un grandissimo numero (al limite tendente ad infinito) di componenti armoniche monocromatiche caratterizzate da diverse frequenze molto vicine (al limite infinitamente vicine) e diverse ampiezze...

Particella libera (24)

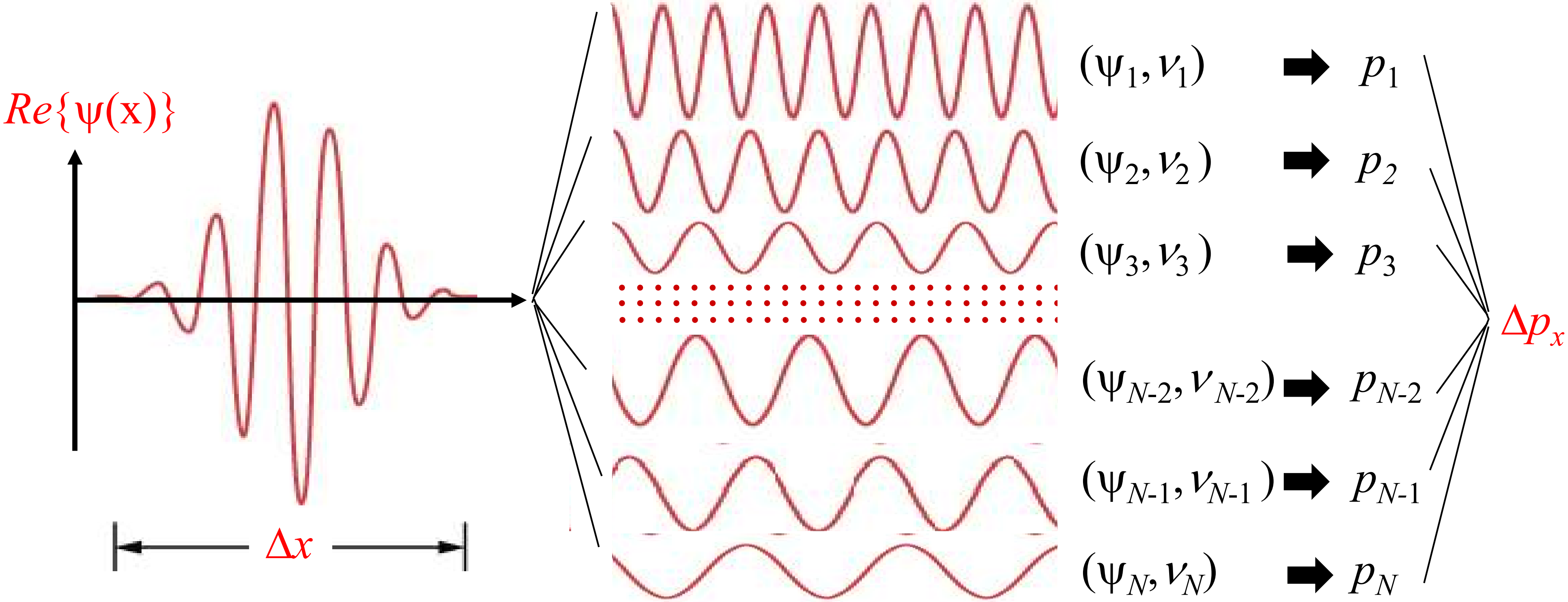
Una particella confinata nello spazio è caratterizzata da una buca di energia potenziale. Si assuma che tale buca sia descritta da una funzione analitica di tipo $U(x) \sim x^2$. In tal caso la forza confinante la particella è una forza di tipo armonico (vale $F_x(x) = -dU(x)/dx \sim -x$). La risoluzione dell'equazione di Schroedinger con un potenziale armonico porta ad una funzione d'onda descritta analiticamente da un pacchetto d'onde sul campo complesso...



Secondo la teoria di Fourier, un pacchetto d'onda di questo tipo è il risultato della sovrapposizione spaziale di un grandissimo numero (al limite tendente ad infinito) di componenti armoniche monocromatiche caratterizzate da diverse frequenze molto vicine (al limite infinitamente vicine) e diverse ampiezze...

Particella libera (25)

Una particella confinata nello spazio è caratterizzata da una buca di energia potenziale. Si assuma che tale buca sia descritta da una funzione analitica di tipo $U(x) \sim x^2$. In tal caso la forza confinante la particella è una forza di tipo armonico (vale $F_x(x) = -dU(x)/dx \sim -x$). La risoluzione dell'equazione di Schroedinger con un potenziale armonico porta ad una funzione d'onda descritta analiticamente da un pacchetto d'onde sul campo complesso...



Secondo la teoria di Fourier, un pacchetto d'onda di questo tipo è il risultato della sovrapposizione spaziale di un grandissimo numero (al limite tendente ad infinito) di componenti armoniche monocromatiche caratterizzate da diverse frequenze molto vicine (al limite infinitamente vicine) e diverse ampiezze...

Particella libera (26)

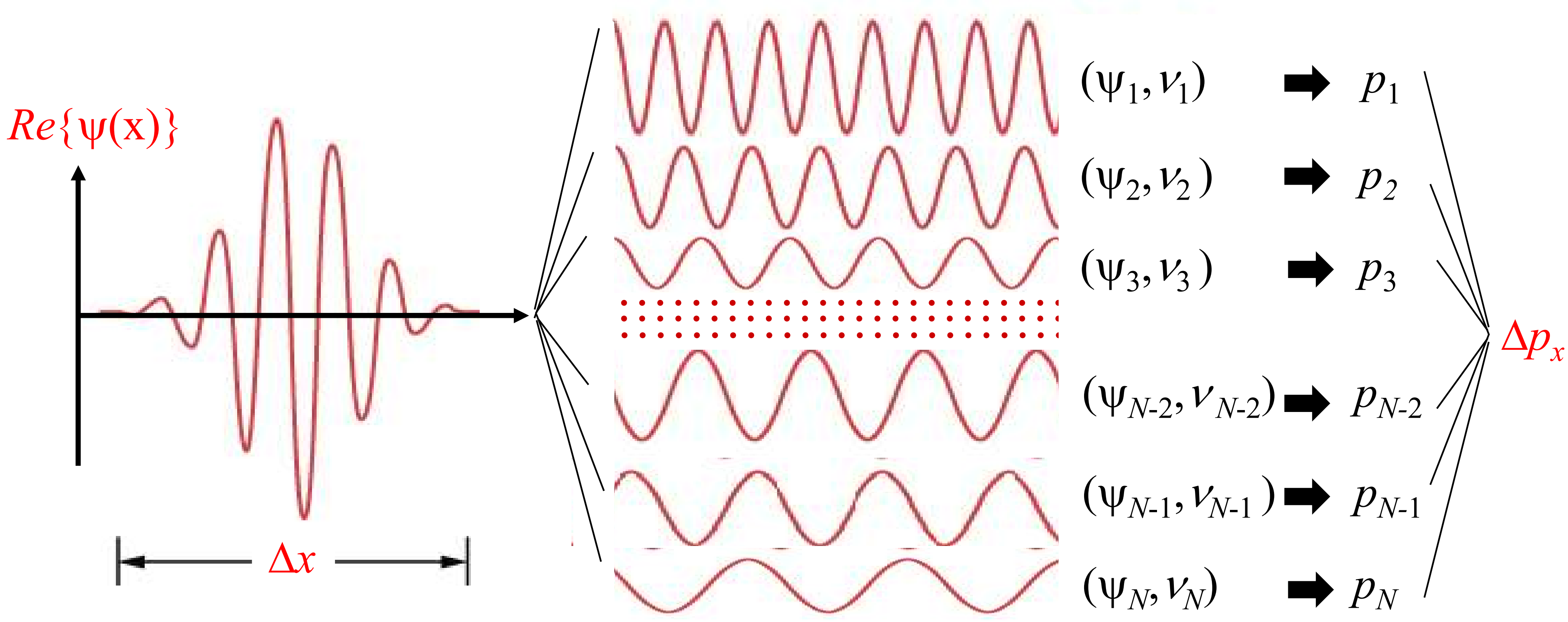
Per la particella confinata valgono le seguenti proposizioni…

Più la particella è confinata nello spazio (ridotta indeterminazione Δx) e più il pacchetto d'onda associato alla particella stessa è localizzato…

Più il pacchetto d'onda è localizzato e più grande è il numero di componenti spettrali richieste per generarlo…

Più grande è il numero di componenti spettrali e più larga è la distribuzione dei valori di impulso associati alle diverse componenti (vale de Broglie!)…

Più larga è la distribuzione dei valori di impulso e maggiore è l'indeterminazione (Δp_x) sulla misura dell'impulso della particella.



Particella libera (27)

Per la particella confinata valgono le seguenti proposizioni…

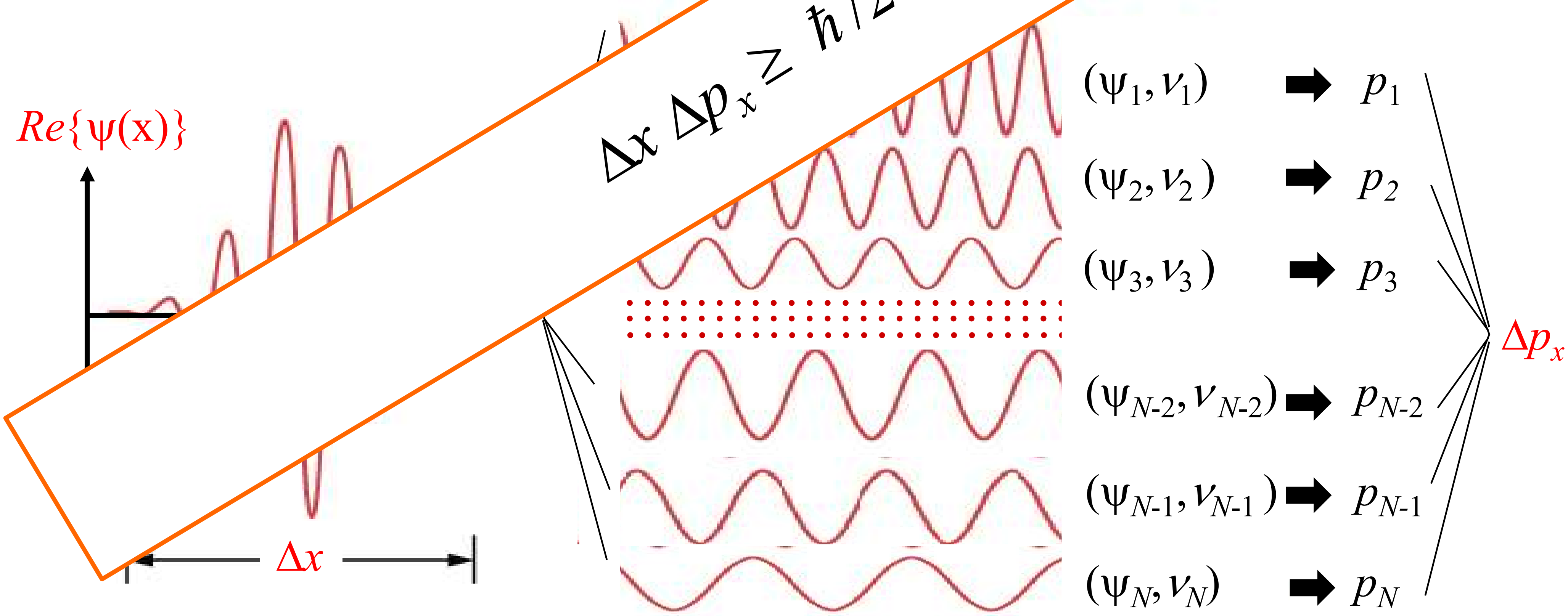
Più la particella è confinata nello spazio (ridotta indeterminazione Δ … il pacchetto d'onda associato alla particella stessa è localizzato…

Più il pacchetto d'onda è localizzato e più grande è il num … spettrali richieste per generarlo…

Più grande è il numero di componenti spettrali e più … zione dei valori di impulso associati alle diverse componenti …

Più larga è la distribuzione dei valori di imp … indeterminazione (Δp_x) sulla misura dell'impulso della parti …

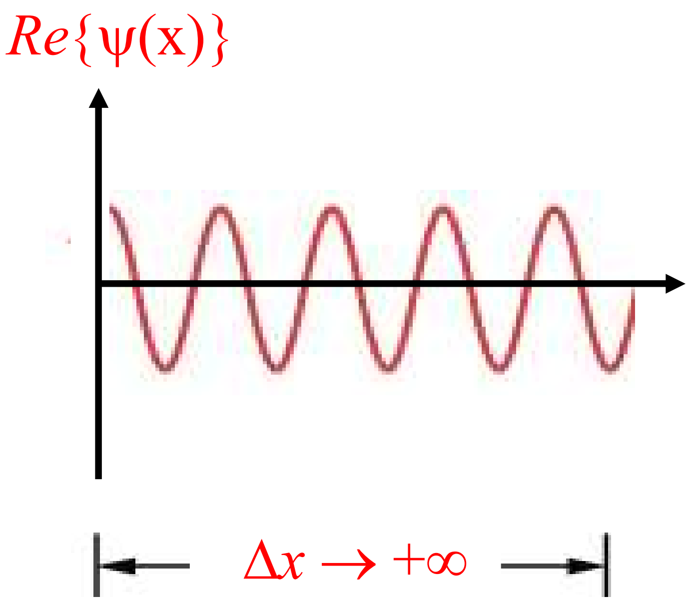
$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar/2$$



Particella libera (28)

Per la particella libera valgono le seguenti proposizioni…

Per la particella libera con energia E non confinata da forze la funzione d'onda è descritta analiticamente da una funzione armonica monocromatica completamente delocalizzata nello spazio (indeterminazione Δx tendente ad infinito)…
Una funzione d'onda armonica monocromatica è caratterizzata da un'unica lunghezza d'onda e dunque da un unico valore di impulso (vale de Broglie!).
Un unico valore di impulso implica un'indeterminazione tendente a zero (Δp_x) sulla misura dell'impulso stesso.



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

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar} \qquad p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

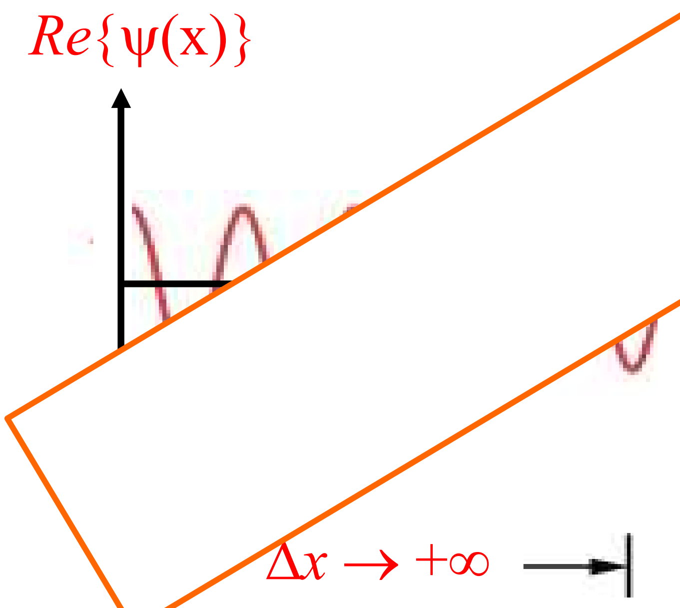
La funzione d'onda è monocromatica e in tal caso i valori di λ e p sono determinati. L'indeterminazione sull'impulso tende dunque a zero ($\Delta p_x \to 0$)

Particella libera (28)

Per la particella libera valgono le seguenti proposizioni…

Per la particella libera con energia E non confinata da forze la funzion… è descritta analiticamente da una funzione armonica monocromatica … delocalizzata nello spazio (indeterminazione Δx tendente ad inf…
Una funzione d'onda armonica monocromatica è car… unica lunghezza d'onda e dunque da un unico valore di impu…).
Un unico valore di impulso implica un'indetermin… zero (Δp_x) sulla misura dell'impulso stesso.

$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \hbar / 2$$



$$\ldots,t) = A e^{i(kx-\omega t)} + A e^{-i(kx+\omega t)}$$

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} = \frac{2\pi}{\lambda} \qquad \omega = \frac{E}{\hbar} \qquad p = \hbar k = \frac{h}{\lambda}$$

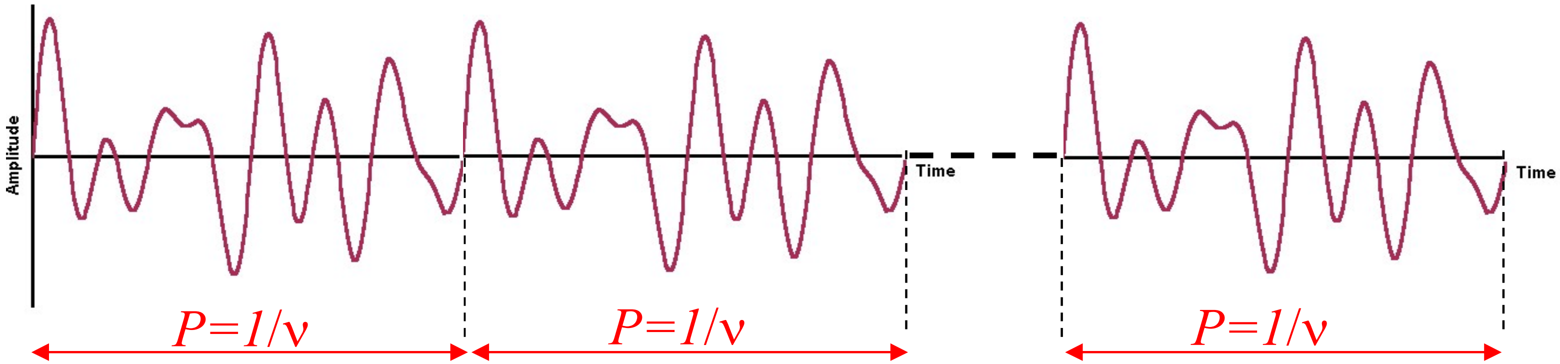
La funzione d'onda è monocromatica e in tal caso i valori di λ e p sono determinati.
L'indeterminazione sull'impulso tende dunque a zero ($\Delta p_x \to 0$)

Particella libera (30)

Sviluppo in serie di Fourier di funzioni periodiche nel tempo

La teoria dello sviluppo in serie di Fourier tratta essenzialmente di come un segnale periodico, sotto opportune condizioni di regolarità, possa essere rappresentato tramite combinazione lineare di segnali esponenziali complessi.

Sia $f(t)$ una Funzione periodica di periodo P :



Vale:

N intero sufficientemente grande

$$f(t) = c_0 + 2\sum_{n=1}^{N} \left[a_n \cos(n\omega t) + b_n \,\mathrm{sen}(n\omega t) \right]$$

con a_n e b_n parametri determinabili a partire dalla funzione $f(t)$ analitica.

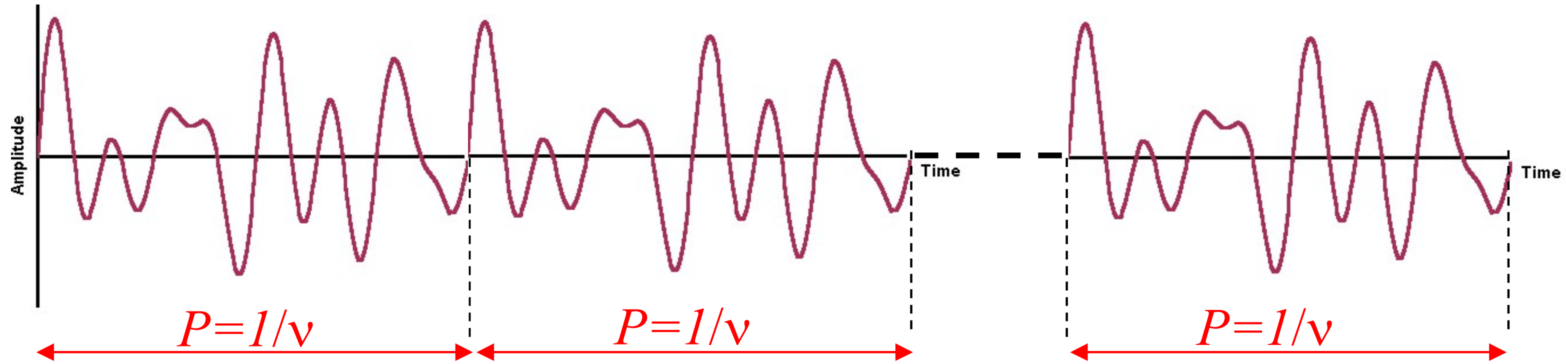
L'analisi di Fourier di una funzione $f(t)$ periodica fornisce dunque il contributo spettrale per ricostruire la funzione su un dominio discreto di frequenze $\omega_n = n\omega$ con N grande quanto necessario per riprodurre correttamente la funzione $f(t)$.

Particella libera (31)

Sviluppo in serie di Fourier di funzioni periodiche nel tempo

La teoria dello sviluppo in serie di Fourier tratta essenzialmente di come un segnale periodico, sotto opportune condizioni di regolarità, possa essere rappresentato tramite combinazione lineare di segnali esponenziali complessi.

Sia $f(t)$ una Funzione periodica di periodo P :



Vale:

$$f(t) = c_0 + 2\sum_{n=1}^{N \text{ intero sufficientemente grande}} \left[a_n \cos(n 2\pi\nu\, t) + b_n \,\mathrm{sen}(n 2\pi\nu\, t) \right]$$

con a_n e b_n parametri determinabili a partire dalla funzione $f(t)$ analitica.

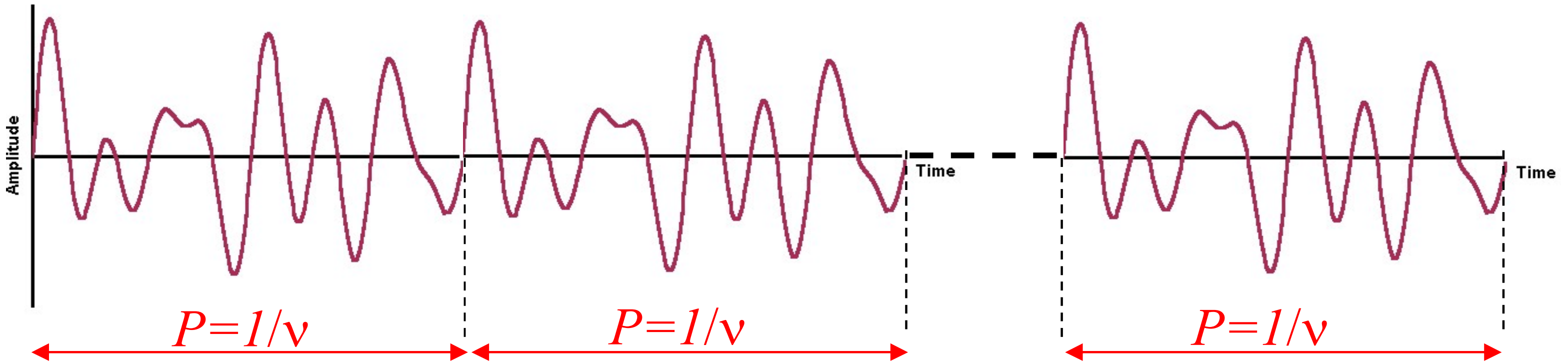
L'analisi di Fourier di una funzione $f(t)$ periodica fornisce dunque il contributo spettrale per ricostruire la funzione su un dominio discreto di frequenze $\nu_n = n\,\nu$ con N grande quanto necessario per riprodurre correttamente la funzione $f(t)$.

Particella libera (32)

Sviluppo in serie di Fourier di funzioni periodiche nel tempo

La teoria dello sviluppo in serie di Fourier tratta essenzialmente di come un segnale periodico, sotto opportune condizioni di regolarità, possa essere rappresentato tramite combinazione lineare di segnali esponenziali complessi.

Sia $f(t)$ una Funzione periodica di periodo P :



Vale:

$$f(t) = c_0 + 2\sum_{n=1}^{N} \left[a_n \cos\left(2\pi\nu_n t\right) + b_n \,\mathrm{sen}\left(n 2\pi\nu_n t\right) \right] \qquad \nu_n = n\nu$$

N intero sufficientemente grande

con a_n e b_n parametri determinabili a partire dalla funzione $f(t)$ analitica.

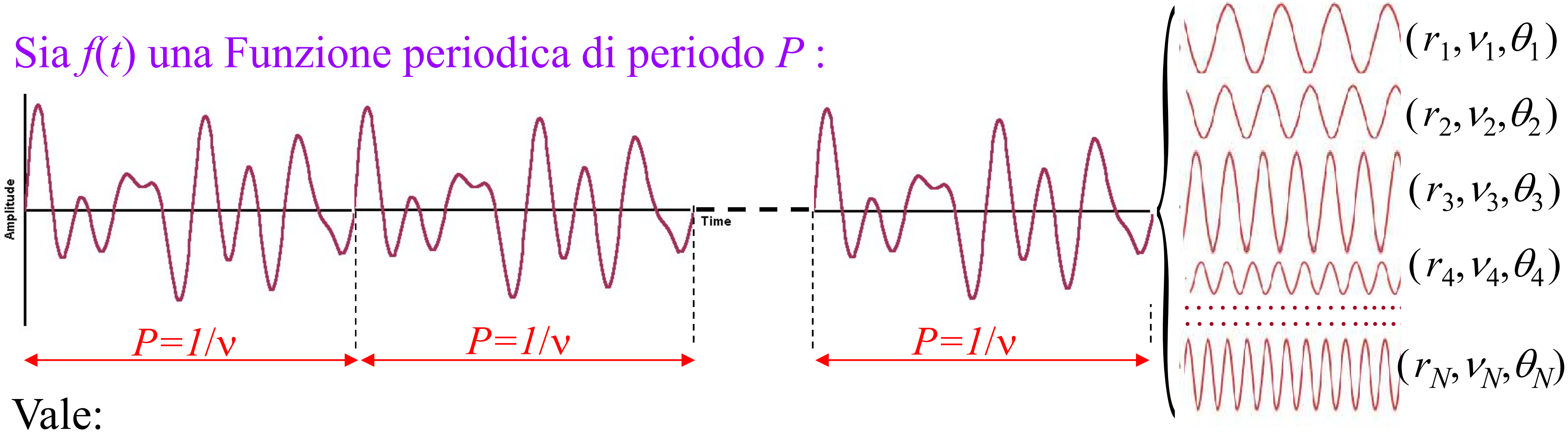
L'analisi di Fourier di una funzione $f(t)$ periodica fornisce dunque il contributo spettrale per ricostruire la funzione su un dominio discreto di frequenze $\nu_n = n\nu$ con N grande quanto necessario per riprodurre correttamente la funzione $f(t)$.

Particella libera (33)

Sviluppo in serie di Fourier di funzioni periodiche nel tempo

La teoria dello sviluppo in serie di Fourier tratta essenzialmente di come un segnale periodico, sotto opportune condizioni di regolarità, possa essere rappresentato tramite combinazione lineare di segnali esponenziali complessi.

Sia $f(t)$ una Funzione periodica di periodo P :



Vale:

N intero sufficientemente grande

$$f(t) = c_0 + 2\sum_{n=1}^{N} r_n \cos(2\pi\nu_n t + \theta_n) \qquad \nu_n = n\nu$$

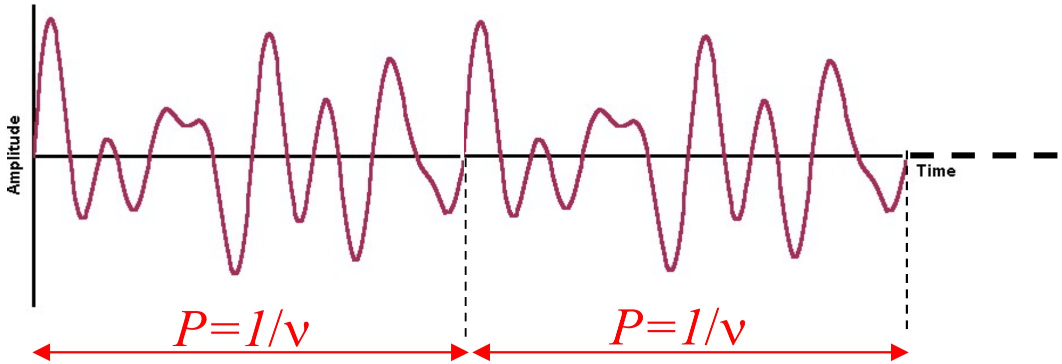
con a_n e b_n parametri determinabili a partire dalla funzione $f(t)$ analitica.

L'analisi di Fourier di una funzione $f(t)$ periodica fornisce dunque il contributo spettrale per ricostruire la funzione su un dominio discreto di frequenze $\nu_n = n\nu$ con N grande quanto necessario per riprodurre correttamente la funzione $f(t)$.

Particella libera (34)

L'analisi di Fourier di segnali periodici costituisce il primo passo verso la teoria della Trasformata di Fourier per l'analisi spettrale di segnali non periodici...

$f(t)$ periodica



Analisi di Fourier

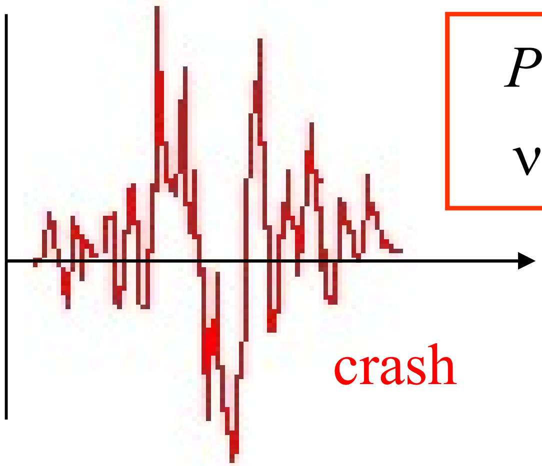
dominio discreto delle ν_n …

N sufficientemente grande …

$$f(t) = c_0 + 2\sum_{n=1}^{N} r_n \cos\left(2\pi\nu_n t + \theta_n\right)$$

$$\boxed{P \to \infty \quad \nu \to 0 \quad \nu_n = n\nu \to 0 \quad N \to +\infty}$$

$f(t)$ non periodica



$$\boxed{P \to \infty \quad \nu \to 0}$$

Trasformate di Fourier

dominio continuo delle ν …

N tendente a infinito…

La funzione $f(t)$ è costituita da infinite componenti a frequenze diverse e infinitamente vicine tra loro ($r(\nu)$ è uno spettro continuo nelle frequenze)

Sviluppo in serie di Fourier di funzioni periodiche nel tempo

$$f_T(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{in\omega t} \qquad \text{con} \qquad c_n = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f_T(t)\, e^{-in\omega t} dt$$

Trasformate di Fourier di funzioni aperiodiche nel tempo

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega) e^{i\omega t} d\omega \qquad \text{con} \qquad F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) e^{-i\omega t} dt$$

In entrambi i casi il segnale viene espresso come combinazione lineare di esponenziali complessi:

- Nell'ambito delle serie di Fourier per l'analisi di segnali $f_T(t)$ periodici, gli esponenziali complessi sono pesati tramite coefficienti c_n definiti per valori discreti di frequenze $\omega_n = n\omega$;
- Nell'ambiro della teoria delle trasformate di Fourier per segnali $f(t)$ non periodici, gli esponenziali complessi sono pesati tramite un'ampiezza continua $F(\omega)\, d\omega / 2\pi$ definita su un continuo di frequenze ω.

Osservazione

La trasformata di Fourier $F(\omega)$ costituisce lo spettro del segnale $f(t)$. Se $f(t)$ è una funzione a valori reali allora $F(\omega)$ è a valori complessi e lo spettro del segnale è individuato dal suo modulo $|F(\omega)|$ e dalla sua fase $\arg(F(\omega))$.

Particella libera (35)

Sviluppo in serie di Fourier di funzioni periodiche nel tempo

$$f_T(t) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n e^{in\omega t} \qquad \text{con} \qquad c_n = \frac{1}{T}\int_{-\frac{T}{2}}^{\frac{T}{2}} f_T(\ldots$$

Trasformate di Fourier di funzioni aperiodiche nel t...

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} F(\omega)e^{i\omega t}d\omega \qquad \text{con} \qquad F \ldots t$$

In entrambi i casi il segnale ... combinazione lineare di esponenziali complessi:

- Nell'ambito delle seri... ...si di segnali $f_T(t)$ periodici, gli esponenziali comp... ...e coefficienti c_n definiti per valori discreti di freq...
- Nell'ambi... ...ormate di Fourier per segnali $f(t)$ non periodici, gli esp... ...o pesati tramite un'ampiezza continua $F(\omega)\, d\omega /$ 2... ...o di frequenze ω.

Osse...

La tras... ...ourier $F(\omega)$ costituisce lo spettro del segnale $f(t)$. Se $f(t)$ è una funzione ... ...i reali allora $F(\omega)$ è a valori complessi e lo spettro del segnale è individuato dal suo modulo $|F(\omega)|$ e dalla sua fase $\arg(F(\omega))$.

“Showing a Fourier transform to a physics student generally produces the same reaction as showing a crucifix to Count Dracula”