Corso di Laurea in Chimica Industriale

Chimica Fisica II

Lezione 8

Esercizi
(terza 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

Esercizio 30

Una particella di massa $6.65\cdot10^{-27}$ Kg è confinata in una buca di potenziale a pareti infinite di larghezza L. L'energia del livello caratterizzato da $n = 3$ è $2.00\cdot10^{-24}$ J. Calcolare la larghezza della buca di potenziale sapendo che vale $E_n = n^2 h^2 / 8mL^2$.

A partire dalla relazione:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

si ottiene:

$$L = \pm\left(\frac{n^2 h^2}{8mE_n}\right)^{1/2} = \pm\frac{n\,h}{(8mE_n)^{1/2}}$$

scartando la soluzione negativa (per senso fisico) si trova:

$$L = \frac{3\cdot(6.626\cdot10^{-34}\ \mathrm{J\,s})}{\left(8\cdot(6.65\cdot10^{-27}\ \mathrm{Kg})\cdot(2.00\cdot10^{-24}\ \mathrm{J})\right)^{1/2}} = 6.09\cdot10^{-9}\ \mathrm{m} = 6.09\ \mathrm{nm}$$

Esercizio 31

Si consideri una buca di potenziale di larghezza L e una particella confinata al suo interno descritta dalla funzione d'onda è $\psi_n(x) = (2/L)^{1/2}\, sen(n\pi x/L)$. Calcolare la posizione della particella per la quale la densità di probabilità di essere trovata risulta del 25% della massima densità di probabilità ottenuta quando $n=1$.

Vale:

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

Per $n=1$ la funzione d'onda e la densità di probabilità risultano:

$$\psi_1(x) = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} sen\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

$$\left|\psi_1(x)\right|^2 = \left(\frac{2}{L}\right) sen^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)$$

La densità di probabilità è massimizzata nelle posizioni x che verificano:

$$\frac{\pi x}{L} = \frac{\pi}{2} + k\pi \quad \text{con} \quad k = 0,\ 1,\ 2,\ 3, \ldots$$

In tal caso la densità di probabilità risulta massima nelle posizioni:

$$x = \frac{1}{2}L,\ \frac{3}{2}L,\ \frac{5}{2}L,\ \frac{7}{2}L,\ \ldots$$

Di queste posizioni l'unica posizione accettabile (perché confinata all'interno della buca) risulta:

$$x = \frac{1}{2}L$$

e in questa posizione la densità di probabilità (massima) vale:

$$\left|\psi_1\left(\frac{L}{2}\right)\right|^2 = \left(\frac{2}{L}\right) sen^2\left(\frac{\pi}{L}\frac{L}{2}\right) = \frac{2}{L}$$

La posizione x per la quale la densità di probabilità risulta essere il 25% della densità di probabilità appena trovata (il 25% della densità di probabilità massima), verifica la seguente equazione:

$$\left|\psi_1(x)\right|^2 = \left(\frac{2}{L}\right) sen^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) = \frac{1}{4}\frac{2}{L} = \frac{1}{2L}$$

La posizione x cercata (per la quale la densità di probabilità risulta essere il 25% della densità di probabilità massima), verifica dunque:

$$sen^2\left(\frac{\pi x}{L}\right)=\frac{1}{4}$$

ossia:

$$\frac{\pi x}{L}=arcsen\left(\pm\frac{1}{2}\right)$$

$$x=\pm\frac{L}{\pi}arcsen\left(\frac{1}{2}\right)=\pm 0.17L$$

Esercizio 32

Calcolare la separazione energetica tra i livelli $n=4$ e $n=5$ di un atomo di deuterio in una buca uno-dimensionale di larghezza $L=5.0$ nm.

A partire dalla relazione:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8mL^2}$$

si calcola:

$$E_5 - E_4 = \frac{25h^2}{8mL^2} - \frac{16h^2}{8mL^2} = \frac{9h^2}{8mL^2}$$

ossia:

$$E_5 - E_4 = \frac{9 \cdot (6.626 \cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\,s})^2}{8 \cdot (1.6605 \cdot 10^{-27}\ \mathrm{Kg}) \cdot (5.0 \cdot 10^{-9}\ \mathrm{m})^2} = 5.9 \cdot 10^{-24}\ \mathrm{J}$$

Esercizio 33

Si calcoli la separazione in energia espressa in J e in eV tra i due livelli caratterizzati da $n=2$ e $n=1$ di un elettrone in una buca di potenziale di larghezza $L=1.0$ nm a pareti infinite (box).

Una particella in una regione uno-dimensionale delimitata da due pareti infinite a $x=0$ e $x=L$ si trova in stati descritti da funzioni d'onda del tipo:

$$\psi_n = \left(\frac{2}{L}\right)^{1/2} sen\left(\frac{n\pi x}{L}\right) \qquad n = 1, 2, 3, \ldots$$

con energie:

$$E_n = \frac{n^2 h^2}{8 m_e L^2}$$

La separazione in energia tra i due livelli $n=2$ e $n=1$ risulta:

$$E_2 - E_1 = \frac{4h^2}{8 m_e L^2} - \frac{h^2}{8 m_e L^2} = 3\frac{h^2}{8 m_e L^2}$$

Inserendo i dati numerici:

$$E_2 - E_1 = 3\frac{h^2}{8m_e L^2}$$

$$= 3\frac{\left(6.626\cdot 10^{-34}\ \mathrm{J\,s}\right)^2}{8\cdot 9.109\cdot 10^{-31}\ \mathrm{Kg}\cdot\left(1.0\cdot 10^{-9}\ \mathrm{m}\right)^2}$$

$$= 3\cdot 6.02\cdot 10^{-20}\ \mathrm{J}$$

$$= 18.06\cdot 10^{-20}\ \mathrm{J}$$

Conversione in eV:

$$E_2 - E_1 = 18.06\cdot 10^{-20}\ \mathrm{J} = 18.06\cdot 10^{-20}\ \mathrm{J}\left(\frac{1}{1.602\cdot 10^{-19}}\frac{\mathrm{eV}}{\mathrm{J}}\right)$$

$$= 1.127\,\mathrm{eV}$$

Esercizio 34

Si consideri una particella in una buca di potenziale cubica. Si calcoli la degenerazione dello stato che è caratterizzato da un'energia pari a tre volte quella dello stato fondamentale.

Per il caso tridimensionale l'energia di una particella confinata in una buca di potenziale vale:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2}\right)\frac{h^2}{8m} \qquad 0 \le x \le L_1 \, , 0 \le y \le L_2 \, , 0 \le z \le L_3 \; .$$

Se la geometria della buca è cubica ($L_1 = L_2 = L_3 = L$) la formula sopra si semplifica:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right)\frac{h^2}{8mL^2}$$

L'energia dello stato fondamentale è:

$$E_{1,1,1} = 3\frac{h^2}{8mL^2}$$

Esercizi [74]

Il problema chiede la degenerazione dello stato con energia:

$$E = 3E_{1,1,1} = 3 \cdot 3 \frac{h^2}{8mL^2} = 9 \frac{h^2}{8mL^2}$$

Stati caratterizzati da (n_1, n_2, n_3) con energia pari a:

$$E_{n_1,n_2,n_3} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_1^2 + n_2^2 + n_3^2\right) = \frac{h^2}{8mL^2}9$$

sono evidentemente caratterizzati da numeri quantici (interi positivi non nulli) che verificano la condizione:

$$n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 9$$

Esistono tre stati che verificano questa condizione:

$$\left(n_1, n_2, n_3\right) = (1,2,2), (2,1,2), (2,2,1)$$

La degenerazione dello stato caratterizzato da un'energia tre volte superiore a quella dello stato fondamentale è 3.

Esercizio 35

Per una particella in una buca 2-dimensionale con dimensioni $L_1 = L$ e $L_2 = 2L$ si trovi uno stato che è degenere con lo stato $n_1 = n_2 = 2$.

Per una buca 2-dimensionale vale:

$$E_{n_1,n_2} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2}\right)$$

con n_1 e n_2 interi positivi non nulli.

Nel caso specifico, con $L_1 = L$ e $L_2 = 2L$, vale:

$$E_{n_1,n_2} = \frac{h^2}{8m}\left(\frac{n_1^2}{L^2} + \frac{n_2^2}{4L^2}\right) = \frac{h^2}{8mL^2}\left(n_1^2 + \frac{n_2^2}{4}\right)$$

L'energia dello stato caratterizzato da $n_1 = n_2 = 2$ vale:

$$E_{2,2} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(2^2 + \frac{2^2}{4}\right) = \frac{h^2}{8mL^2}5$$

E' facile verificare che questo stato è degenere con lo stato $n_1 = 1$, $n_2 = 4$:

$$E_{1,4} = \frac{h^2}{8mL^2}\left(1^2 + \frac{4^2}{4}\right) = \frac{h^2}{8mL^2}5$$

Esercizio 36

La funzione d'onda all'interno di una barriera di potenziale di altezza U_0 e di larghezza estremamente lunga (al limite +∞) è:

$$\psi(x) = Ne^{-kx}$$

Si calcoli:

(a) la probabilità che la particella sia all'interno della barriera;

(b) la profondità di penetrazione media della particella all'interno della barriera.

Valgono:

$$P_{[0,+\infty[} = \int_0^{+\infty} \left|\psi(x,t)\right|^2 dx = N^2 \int_0^{+\infty} e^{-2kx} dx = N^2 \left. \frac{e^{-2kx}}{-2k} \right|_0^{+\infty} = \frac{N^2}{2k}$$

$$\langle x \rangle = \int_0^{+\infty} \psi(x)\, x\, \psi^*(x)\, dx = N^2 \int_0^{+\infty} x\, e^{-2kx} dx = \frac{N^2}{(2k)^2} = \frac{N^2}{4k^2}$$

Esercizio 37

Si calcoli la probabilità di penetrazione di un elettrone all'interno di una barriera di potenziale di altezza 2.00 eV e ampiezza 0.25 nm se la sua energia cinetica iniziale risulta di 0.90 eV.

Si utilizzano le formule trovate per la probabilità di penetrazione nel caso della barriera di potenziale:

$$T = \frac{|A|^2}{|F|^2} = \frac{1}{1+G} \qquad G = \frac{\left(e^{a/D} - e^{-a/D}\right)^2}{16\varepsilon(1-\varepsilon)}$$

con:

$$D = \frac{1}{k_2} = \left[\frac{\hbar^2}{2m(U_0 - E)}\right]^{1/2} \qquad \varepsilon = \frac{E}{U_0}$$

con i dati forniti: E=0.90 eV, U_0=2.00 eV, a=0.25 nm e $m=m_e$.

Esercizi [78]

Inserendo i dati: E=0.90 eV, U_0=2.00 eV, a=0.25 nm e m=m_e, si ottiene:

$$D=\frac{1}{k_2}=\left[\frac{\left(1.055\cdot10^{-34}\text{ Js}\right)^2}{2\left(9.109\cdot10^{-34}\text{ Kg}\right)\left(1.1\cdot1.602\cdot10^{-19}\text{ J}\right)}\right]^{1/2}=1.86\cdot10^{-10}\text{ m}$$

$$\varepsilon=\frac{E}{U_0}=\frac{0.90\,\text{eV}}{2.00\,\text{eV}}=0.45$$

$$\frac{a}{D}=\frac{250\text{ pm}}{186\text{ pm}}=1.34$$

$$G=\frac{\left(e^{1.34}-e^{-1.34}\right)^2}{16\cdot0.45\cdot0.55}=3.23$$

Alla fine la probabilità di penetrazione risulta:

$$T=\frac{|A|^2}{|F|^2}=\frac{1}{1+G}=\frac{1}{1+3.23}=0.24$$