Corso di Laurea in Chimica Industriale

Chimica Fisica II

Zoom meeting del 04/04/2022

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

Esercizio 23

Si normalizzino le seguenti funzioni d'onda:

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

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

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

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

$$dV = r^2 sen\,\theta\; d\theta\; d\phi\; dr$$

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:

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

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:

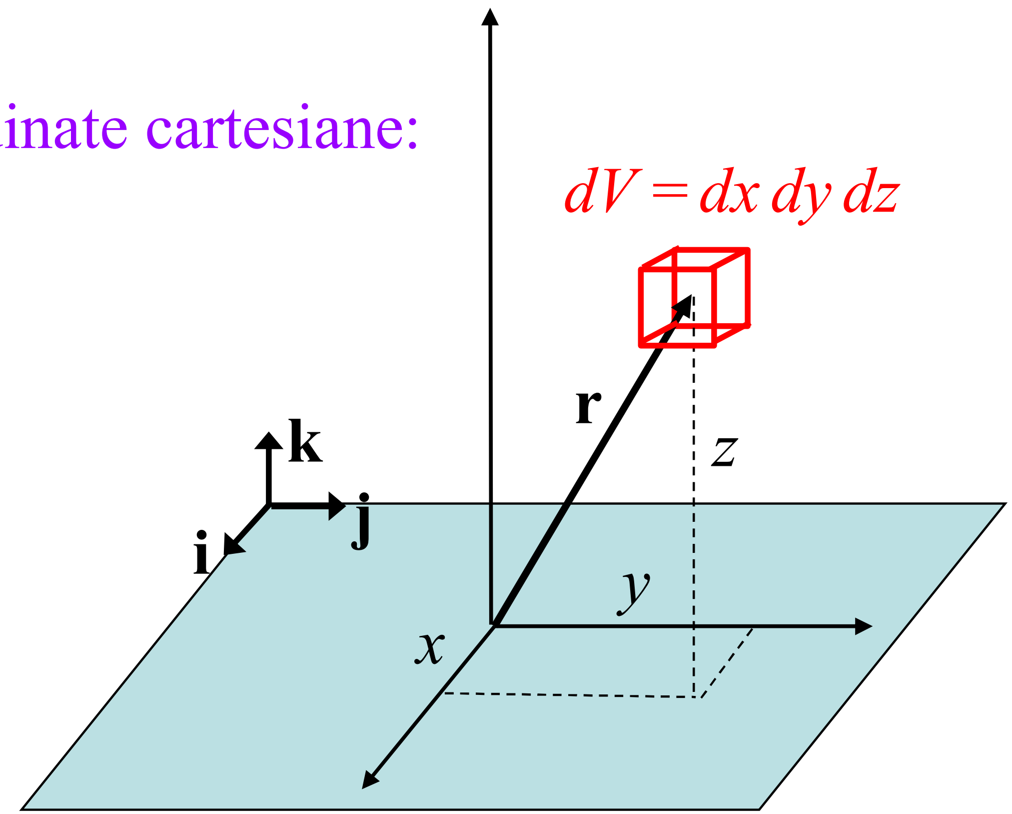
$$\mathbf{i}\cdot\mathbf{j} = \mathbf{j}\cdot\mathbf{k} = \mathbf{k}\cdot\mathbf{i} = 0$$

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

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

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

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



Esercizi [42]

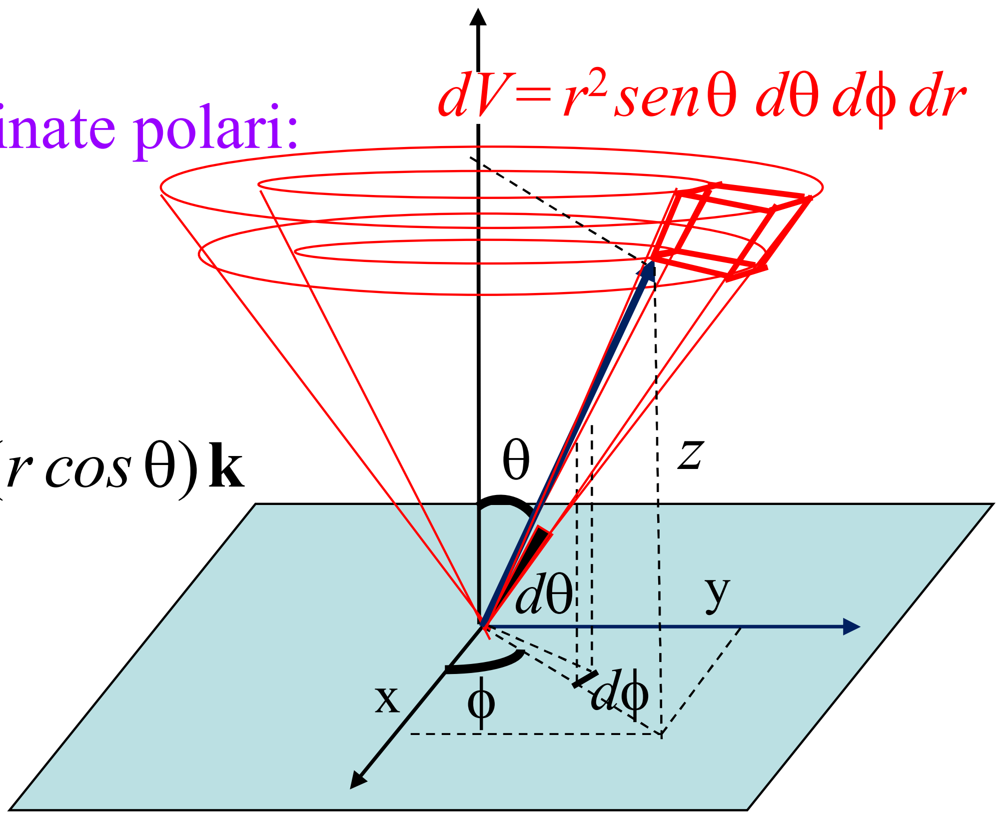
La costante N di normalizzazione è data da:

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

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:



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

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

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

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

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

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

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

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

La funzione d'onda normalizzata risulta quindi:

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

Nota: A rigore si sarebbe dovuto scrivere:

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

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.

Per normalizzare della funzione d'onda:

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

si deve calcolare:

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

Per ottenere N è necessario risolvere l'integrale:

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

ossia:

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

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

l'integrale diventa:

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

e si risolve facilmente per parti come segue…

$$\int_0^{kL} sen^2 u\, du = \int_0^{kL} sen\, u \cdot sen\, u\ \ du$$

$$= -\cos u \cdot sen\, u \Big|_0^{kL} - \int_0^{kL} (-\cos u) \cdot \cos u\ \ du$$

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

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

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

Vale dunque l'identità:

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

e quindi:

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

$$\int_0^{kL} sen^2 u\, du = \int_0^{kL} sen\, u \cdot sen\, u \;\; du$$

$$= -\cos u \cdot sen\, u \Big|_0^{kL} - \int_0^{kL} (-\cos u) \cdot \cos u \;\; du$$

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

$$= -\frac{1}{2} sen\, 2u \Big|^{kL} + \int^{kL} (1 - sen^2 u) \;\; du$$

Vale:

$$\int_{u_1}^{u_2} sen^2 u \;\; du = -\frac{1}{4} sen\, 2u \Big|_{u_1}^{u_2} + \frac{1}{2} u \Big|_{u_1}^{u_2}$$

Vale inoltre:

$$\int_{u_1}^{u_2} \left(1 - cos^2 u\right) \;\; du = \int_{u_1}^{u_2} 1\, du - \int_{u_1}^{u_2} cos^2 u\, du = -\frac{1}{4} sen\, 2u \Big|_{u_1}^{u_2} + \frac{1}{2} u \Big|_{u_1}^{u_2}$$

da cui:

$$\int_{u_1}^{u_2} cos^2 u \;\; du = +\frac{1}{4} sen\, 2u \Big|_{u_1}^{u_2} + \frac{1}{2} u \Big|_{u_1}^{u_2}$$

Vale dunque:

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

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

si ha:

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

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

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

e la costante di normalizzazione N assume valore:

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

□

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

La costante di normalizzazione risulta:

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

La funzione d'onda normalizzata risulta quindi:

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

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

La costante di normalizzazione risulta:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi} \psi^*(r,\theta,\phi)\,\psi(r,\theta,\phi)\, r^2 sen\,\theta\; d\theta\; d\phi\; dr\right)^{1/2}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi} e^{-2r/a_0}\; r^2 sen\,\theta\; d\theta\; d\phi\; dr\right)^{1/2}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} e^{-2r/a_0}\; r^2 dr \int_0^{+\pi} sen\,\theta\; d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(\frac{a_0^3}{4}\cdot 2\cdot 2\pi\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(a_0^3\pi\right)^{1/2}}$$

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:

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

□

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

La costante di normalizzazione risulta:

$$N = \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi} \psi^*(r,\theta,\phi)\,\psi(r,\theta,\phi)\, r^2 sen\,\theta\, d\theta\, d\phi\, dr\right)^{1/2}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty}\int_0^{+\pi}\int_0^{2\pi} r^2 e^{-r/a_0}\; r^2 sen\,\theta\, d\theta\, d\phi\, dr\right)^{1/2}}$$

$$= \pm \frac{1}{\left(\int_0^{+\infty} r^2 e^{-r/a_0}\; r^2 dr \int_0^{+\pi} sen\,\theta\, d\theta \int_0^{2\pi} d\phi\right)^{1/2}} = \pm \frac{1}{\left(4!\, a_0^5 \cdot 2 \cdot 2\pi\right)^{1/2}}$$

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:

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

Esercizio 24

Normalizzare la seguente funzione d'onda su tutto R:

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

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:

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

Vale dunque:

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

La funzione d'onda normalizzata è:

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

Esercizio 25

Normalizzare la seguente funzione d'onda su tutto 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.

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:

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

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

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 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 R.

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

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:

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

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 dw di trovare la particella in un volumetto dV infinitesimo di spazio è calcolabile attraverso la seguente espressione:

$$dw(\mathbf{r}) = \left|\psi(\mathbf{r})\right|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\, dV$$

Nel caso monodimensionale:

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

Per passare dal calcolo infinitesimo:

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

al calcolo finito è necessario integrare nello spazio:

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

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

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

Per passare dal calcolo infinitesimo:

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

al calcolo finito è necessario integrare nello spazio:

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

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

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

$$= \frac{2}{L}\int_a^b sen^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx$$

$$= \left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi} sen\frac{2\pi x}{L}\right)\Bigg|_a^b$$

$$= \frac{(b-a)}{L} - \frac{1}{2\pi}\left(sen\frac{2\pi b}{L} - sen\frac{2\pi a}{L}\right)$$

Vale:

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

con $L = 10.0$ nm.

Si ottiene nei diversi casi:

(a) $$w(x)\Big|_{x\in[4.95,5.05]} = \frac{(5.05\,\text{nm} - 4.95\,\text{nm})}{10.0\,\text{nm}} - \frac{1}{2\pi}\left(sen\frac{2\pi\cdot 5.05\,\text{nm}}{10.0\,\text{nm}} - sen\frac{2\pi\cdot 4.95\,\text{nm}}{10.0\,\text{nm}}\right)$$

$$= 0.010 + 0.010 = 0.020$$

(b) $$w(x)\Big|_{x\in[1.95,2.05]} = \frac{(2.05\,\text{nm} - 1.95\,\text{nm})}{10.0\,\text{nm}} - \frac{1}{2\pi}\left(sen\frac{2\pi\cdot 2.05\,\text{nm}}{10.0\,\text{nm}} - sen\frac{2\pi\cdot 1.95\,\text{nm}}{10.0\,\text{nm}}\right)$$

$$= 0.010 + 0.031 = 0.041$$

(c) $$w(x)\Big|_{x\in[10.00,9.90]} = \frac{(10.00\,\text{nm} - 9.90\,\text{nm})}{10.0\,\text{nm}} - \frac{1}{2\pi}\left(sen\frac{2\pi\cdot 10.00\,\text{nm}}{10.0\,\text{nm}} - sen\frac{2\pi\cdot 9.90\,\text{nm}}{10.0\,\text{nm}}\right)$$

$$= 0.010 + 0.009993 = 0,019993$$

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

$$= 0.5$$

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

$$\left. - sen\frac{2\pi\cdot(1/3)10.00\,\mathrm{nm}}{10.0\,\mathrm{nm}} \right)$$

$$= \frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi}\left(sen\frac{4\pi}{3} - sen\frac{2\pi}{3} \right)$$

$$= 0.61$$

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:

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

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 dw di trovare la particella in un volumetto infinitesimo dV di spazio è calcolabile attraverso la seguente espressione:

$$dw(\mathbf{r}) = \left|\psi(\mathbf{r})\right|^2 dV = \psi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})\, dV$$

Nel caso bidimensionale:

$$dw(x,y) = \left|\psi(x,y)\right|^2 dx\,dy = \psi^*(x,y)\psi(x,y)\, dx\,dy$$

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

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

Sostituendo la funzione d'onda data si ottiene:

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

$$= \int_{x_1}^{x_2}\left(\frac{2}{L}\right) sen^2\left(\frac{\pi x}{L}\right) dx \cdot \int_{y_1}^{y_2}\left(\frac{2}{L}\right) sen^2\left(\frac{\pi y}{L}\right) dy$$

Gli integrali si risolvono facilmente per sostituzione prime e per parti poi. Alla fine del calcolo risulta:

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

$$\cdot\left\{\frac{y_2-y_1}{L} - \frac{1}{2\pi}\left[\left(sen\left(\frac{2\pi y_2}{L}\right) - sen\left(\frac{2\pi y_1}{L}\right)\right)\right]\right\}$$

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

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

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:

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

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:

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

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

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

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

Analiticamente:

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

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

$$w(r)\Big|_{Sfera(r\le a_0)}=\frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{a_0}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}r^2\,e^{-2r\,a_0}\,sen\theta\,d\theta\,d\phi\,dr$$

$$=\frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{a_0}r^2\,e^{-2r\,a_0}\,dr\int_0^{\pi}sen\theta\,d\theta\int_0^{2\pi}d\phi$$

$$=\frac{1}{\pi a_0^3}\int_0^{a_0}r^2\,e^{-2r\,a_0}\,dr\cdot(2)\cdot(2\pi)$$

$$=\frac{1}{\pi a_0^3}\left\{\frac{e^{-2r\,a_0}}{-2a_0}r^2\Bigg|_0^{a_0}-\int_0^{a_0}\left(\frac{e^{-2r\,a_0}}{-2a_0}\right)2r\,dr\right\}\cdot(2)\cdot(2\pi)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

$$=\frac{1}{\pi a_0^3}\left\{-e^{-2ra_0}\left(\frac{r^2}{2a_0}+\frac{r}{2a_0^2}+\frac{1}{4a_0^3}\right)\Big|_0^{a_0}\right\}\cdot(2)\cdot(2\pi)$$

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

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