

Programma svolto nel corso di Struttura della Materia 2016-2017-2018 (canale Bachelet)

Fisica atomica (24 ore tra lezioni, complementi ed esercizi)

lezioni (capitolo 1 di "Elementi di fisica atomica, molecolare e dei solidi", Bachelet & Servedio)

Spettri atomici: da Fraunhofer a Bunsen e Kirchhoff; reticolo di diffrazione; spettro dell'idrogeno e degli alcalini. Richiami di elettromagnetismo, meccanica classica e meccanica quantistica: unità elettrostatiche; potenziale vettore, gauge trasversa, onda piana monocromatica; elettrone e nucleo in campo elettromagnetico; hamiltoniana quantistica imperturbata; unità atomiche; perturbazioni periodiche nel tempo. Spettro dell'idrogeno: probabilità di transizione, "regola d'oro" di Fermi, assorbimento ed emissione stimolata; approssimazione di dipolo, regole di selezione; emissione spontanea, coefficienti di Einstein; a quale transizione elettronica corrisponde la riga più intensa dell'idrogeno. Dall'idrogeno alla Tavola Periodica: proprietà periodiche degli elementi; orbitali, principio di Pauli, core e valenza; energie e raggi atomici, trend sorprendenti; elettroni interagenti, campo elettrostatico medio, rimozione della degenerazione coulombiana; come mai gli atomi alcalini hanno spettro diverso dall'idrogeno.

complementi (da "Physics of atoms and molecules", Bransden & Joachain e [sito del corso](#))

Contare gli atomi? Elettrone libero classico e quantistico, pacchetto gaussiano. Tubo catodico, esperimento Franck-Hertz. Tecniche spettroscopiche e sorgenti storiche. Esperimento Stern-Gerlach. Spettri degli atomi alcalini e degli atomi con un solo "elettrone ottico": difetto quantico e carica efficace. L'atomo di idrogeno: correzioni relativistiche, effetti di un campo magnetico o elettrico esterni. Atomi alcalini in campo magnetico: esercizio di fisica atomica del 20/6/16. Principio variazionale associato all'equazione di Schrödinger (Landau) [cenni alle derivate funzionali per chi ancora non le sa]. Elio e atomi a due elettroni, stato fondamentale e primo stato eccitato. Derivazione del metodo Hartree-Fock dal principio variazionale per atomi a due elettroni e a più elettroni. Aufbau, regole di Hund, atomi con più elettroni di valenza: competizione fra effetti a molti elettroni, effetti relativistici e campi esterni.

Fisica molecolare (24 ore tra lezioni, complementi ed esercizi)

lezioni (capitolo 2 di "Elementi di fisica atomica, molecolare e dei solidi", Bachelet & Servedio)

Lo ione molecolare H_2^+ , prototipo delle molecole biatomiche omonucleari: approssimazione di Born e Oppenheimer (qui alcuni passaggi in più); approssimazione armonica; approssimazione di rotatore rigido, livelli energetici roto-vibrazionali; H_2 e molecole omonucleari: approssimazione LCAO, uso della simmetria, valor medio dell'hamiltoniana, stato legante e antilegante; base né ortogonale, né completa, completezza e ortonormalità nello spazio vettoriale euclideo a tre dimensioni; spazio di Hilbert a infinite dimensioni, sottospazi a dimensione finita; l'esempio di H_2^+ ; con una base di due sole funzioni il principio variazionale associato all'equazione di Schrödinger genera un problema secolare 2×2 . Modello di molecola biatomica eteronucleare. Molecole biatomiche con più di un elettrone: l'esempio di Na_2 . Molecole poliatomiche cicliche: simmetrie e legame con i solidi: rivisitazione del dimero omonucleare; trimero omonucleare; catena di N atomi chiusa su se stessa; l'esempio del benzene C_6H_6 .

complementi (da "Physics of atoms and molecules", Bransden & Joachain e [sito del corso](#))

Calore specifico dell'idrogeno molecolare. Correzioni anarmoniche e centrifughe: potenziale di Morse. Derivazione delle regole di selezione di dipolo per una molecola biatomica modello nella quale sia gli elettroni sia i nuclei possono assorbire ed emettere radiazione elettromagnetica. Passaggio da una base non ortogonale a una ortogonale nel metodo LCAO. Teoria degli orbitali molecolari e teoria Heitler-London come casi limite della teoria esatta: modello di Hubbard della molecola H_2 neutra (Ashcroft-Mermin). "Termini" elettronici e proiezione del momento angolare totale nelle molecole biatomiche. Effetto serra e fisica molecolare. Orbitali ibridi: l'esempio del carbonio.

Cenni alla fisica dei solidi (8 ore di lezione)

lezioni (inizio capitolo 3 di "Elementi di fisica atomica, molecolare e dei solidi", Bachelet & Servedio)

Tight binding a primi vicini: catena lineare infinita di atomi con un orbitale 1s per atomo con condizioni periodiche al bordo. Stesso modello tight binding per un reticolo quadrato e per un reticolo cubico semplice, sempre con condizioni periodiche al bordo. Bande di energia, densità degli stati, energia di Fermi, e superficie di Fermi.

esercizi di fisica atomica e molecolare svolti in aula nel periodo 2016-2018