UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI GENOVA

FACOLTÀ DI SCIENZE MATEMATICHE, FISICHE E NATURALI

CORSO DI STUDI IN FISICA

DISPENSE DEL CORSO DI FISICA MODERNA

Carlo Maria BECCHI

Massimo D'ELIA

Dipartimento di Fisica, Università di Genova,
via Dodecaneso 33, 16146 Genova

Indice

1 INTRODUZIONE **3**

2 LA RELATIVITÀ RISTRETTA **7**

2.0.1 L'esperimento di Michelson e le trasformazioni di Lorentz. 8

2.0.2 La cinematica relativistica 19

3 MECCANICA ONDULATORIA **35**

3.0.3 La crisi dei modelli classici 35

3.0.4 L'effetto fotoelettrico 36

3.0.5 La teoria dei quanti di Bohr 41

3.0.6 L'interpretazione di de Broglie 44

3.0.7 L'equazione di Schrödinger 51

3.0.8 La barriera di potenziale 65

3.0.9 Le buche di potenziale e i livelli energetici 76

3.0.10 L'oscillatore armonico 81

3.0.11 Il caso di un potenziale periodico: lo spettro a bande. . 87

4 LA TEORIA STATISTICA DELLA MATERIA. **103**

4.0.12 L'equilibrio termico col metodo di Gibbs 108

4.0.13 La pressione e le equazioni di stato 113

4.0.14 La distribuzione Gran Canonica e il gas perfetto 122

A I tetravettori **145**

B Termidinamica e entropia **149**

Capitolo 1

INTRODUZIONE

Negli ultimi anni del XIX secolo lo sviluppo delle tecniche e il raffinamento degli apparecchi di misura produssero una messe di nuovi dati la cui interpretazione comportò profondi cambiamenti nella formulazione delle leggi della fisica e nello sviluppo della nuova fenomenologia.

Numerosi risultati sperimentali hanno portato alla nascita della *nuova fisica*, fra questi ricordiamo molto schematicamente quelli di Hertz sull'effetto foto-elettrico, la misura della distribuzione in frequenza dell'energia emessa da un forno ideale, il famigerato *corpo nero*, e in generale l'inaplicabilità dell'*equipartizione dell'energia* alle basse temperature risultante dalle violazioni della legge di Dulong e Petit. Altrettanto importanti furono la scoperta dell'elettrone, le misure di Michelson circa l'indipendenza della velocità della luce dal sistema di riferimento, la rivelazione degli spettri a righe della radiazione atomica.

Dal punto di vista teorico, fra i temi principali che alimentarono la nuova fisica va ricordato, nell'ambito dell'elettromagnetismo, la mancata identificazione dell'etere, il mezzo portatore delle onde elettromagnetiche, e la conseguente interpretazione di Einstein-Lorentz del principio di *relatività* di Galileo che afferma l'equivalenza di tutti i sistemi di riferimento in moto rettilineo uniforme rispetto alle stelle fisse.

Alla luce dell'interpretazione elettromagnetica della radiazione, della scoperta dell'elettrone, e degli studi di Rutherford sulla struttura atomica, l'anomalia nell'emissione del corpo nero e la particolare struttura a righe degli spettri atomici portarono alla formulazione della teoria dei *quanti*, alla nascita della *fisica atomica* e, in stretto collegamento con queste,alla formulazione quantistica della *teoria statistica della materia*.

Questo corso di *Introduzione alla Fisica Moderna*, ben distinta da quella *Classica* sviluppata nel corso del XIX secolo, e da quella *Contemporanea* che, iniziata negli anni '30 del secolo XX e riguarda la natura delle *Interazioni Fondamentali* e la fisica della materia in condizioni estreme, si prefigge lo scopo di introdurre in modo quantitativo, seppure sommario e necessariamente schematico, gli aspetti principali della *relatività ristretta*, della *fisica dei quanti* e delle sue applicazioni alla *teoria statistica della materia*.

Nei libri di testo correnti i tre capitoli principali della nuova fisica dei primi 30 anni del XX secolo, la relatività speciale di Einstein, la meccanica quantistica di Schrödinger, e la fisica statistica quantistica vengono presentati insieme solo a livello introduttivo/descrittivo, mentre le presentazioni analitiche sono contenute in volumi distinti, in vista anche dell'esame di aspetti tecnici assai complessi. Dal punto di vista didattico questo stato di cose pone seri problemi.

Infatti, mentre è assolutamente evidente la necessità di presentare insieme i tre temi, date le loro strette interrelazioni, si pensi al ruolo giocato dalla relatività speciale nella formulazione dell'ipotesi ondulatoria di De Broglie e quello della fisica statistica nelle formulazione dell'ipotesi dei quanti, è anche chiara la necessità che questa presentazione unitaria sia corredata da strumenti analitici sufficienti per un'adeguata comprensione dei contenuti e delle conseguenze delle nuove teorie.

D'altra parte, dato che stiamo parlando di un testo introduttivo, rimane inevitabile il vincolo sulle dimensioni del testo e sui suoi prerequisiti; non è possibile utilizzare un'enciclopedia a scopo introduttivo. Questo impone, , per quel che riguarda l'analisi, una selezione degli ambiti più qualificati sotto il punto di vista del rapporto contenuto fisico/formalismo. Per questo, nell'ambito della relatività speciale abbiamo rinunciato alla presentazione delle formulazione covariante dell'elettrodinamica e ci siamo limitati a giustificare i teoremi di conservazione dell'energia e dell'impulso, e quindi alla cinematica relativistica il cui impatto sulla fisica è evidente.

Per quel che riguarda la meccanica quantistica di Schrödinger, dopo aver presentato con una certa cura l'origine dell'equazione e la natura della funzione d'onda con le naturali implicazioni a livello d'indeterminazione, abbiamo ritenuto di metterne in evidenza le conseguenze qualitative sugli spettri dei livelli energetici, rinunciando a discutere in dettaglio gli spettri atomici, aldilà del modello di Bohr. Questo ci ha permesso di limitare il grosso dell'analisi a problemi 1-dimensionali studiando l'origine dei livelli energetici discreti e di quelli a bande senza peraltro rinunciare all'esame dell'effetto tunnel. Le estensioni a più dimensioni sono state limitate ai casi banalmente separabili, cioè l'oscillatore

armonico e la buca a pareti completamente riflettenti. Si tratta dei sistemi di maggior utilità per le applicazioni alla fisica statistica.

Passando a quest'ultimo argomento, che, come è ormai tradizione consolidata, abbiamo basato sulla costruzione degli insiemi statistici di Gibbs e sulle conseguenti leggi di distribuzione, abbiamo ritenuto importante trattare i casi più significativi del punto di vista degli effetti quantistici, cioè i gas perfetti degeneri, concentrandoci sulle leggi di distribuzione e sulle equazioni di stato e limitando a una brevissima appendice la presentazione dell'entropia.

L'obiettivo di creare un testo introduttivo, ma analitico, ha evidentemente richiesto l'inclusione di raccolte di esercizi significative associate ai singoli capitoli del testo. Ci siamo sforzati in ciò di evitare, quanto possibile la confusione fra esercizi e complementi al testo. Evidentemente è grande la tentazione di spostare nella raccolta di esercizi alcuni capitoli di rilevante interesse fisico, guadagnando così in snellezza della presentazione generale. La conseguenza negativa di questa scelta è che gli esercizi diventano eccessivamente lunghi e articolati, dissuadendo lo studente medio dal tentare di fornire una risposta personale prima di verificarne l'esattezza tramite lo schema di soluzione suggerito. D'altra parte ci siamo sforzati di limitare la frazione di quegli esercizi, peraltro necessari, il cui tema è limitato a un'analisi degli ordini di grandezza degli effetti studiati. Il quadro che risultante, per quel che riguarda gli esercizi, vorrebbe essere la proposta di una lista, sufficientemente consistente di proposte di verifica della teoria semplici e sostanzialmente indipendenti, ma tecnicamente non banali. Speriamo che il lettore convenga con noi che il risultato cercato è stato raggiunto.

Passando all'organizzazione in capitoli, quello sulla *relatività ristretta* è diviso in due sezioni contenenti rispettivamente le trasformazioni di Lorentz e sulla cinematica relativistica, ciascuna seguita dai corrispondenti esercizi. Il capitolo sulla *meccanica ondulatoria* è articolato in otto sezioni rispettivamente riguardanti l'effetto foto-elettrico, la teoria di Bohr, l'interpretazione di De Broglie, l'equazione di Schrödinger, seguite da una proposta di esercizi e dalle altre sezioni sulla barriera di potenziale, le buche di potenziale, l'oscillatore armonico, e gli spettri a bande seguiti da un'altra raccolta di esercizi. Il capitolo sulla *teoria statistica della materia*, infine, comprende, oltre all'introduzione, una sezione sulla distribuzione canonica di Gibbs, seguita da una seconda sulle equazioni di stato, corredata da esercizi, e da una sezione finale sulla distribuzione gran-canonica e i gas perfetti quantistici. In appendice vengono presentati il formalismo tetra-vettoriale della relatività ristretta (Appendice A) e l'entropia (Appendice B).

Testi Consigliati Per un'introduzione generale:

- D.Halliday, R.Resnick, J.Walker,
  Fondamenti di Fisica - Fisica Moderna.
  Casa Editrice Ambrosiana.
- K.Krane
  Modern Physics - 2.nd edition
  John Wiley inc.

Capitolo 2

LA RELATIVITÀ RISTRETTA

Le equazioni di Maxwell nel vuoto descrivono la propagazione di segnali elettromagnetici con velocità $c \equiv \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}$. Dato che, secondo il principio di relatività di Galileo, passando da un sistema di riferimento a un altro, le velocità si sommano come vettori, il vettore velocità del segnale luminoso in un riferimento inerziale (O) si somma vettorialmente con la velocità di O rispetto a un altro sistema inerziale O' fornendo la velocità del segnale luminoso rispetto a O'. Per un generico valore della velocità relativa il modulo di quella del segnale cambierà col sistema di riferimento. Dobbiamo concludere che, se le equazioni di Maxwell sono valide per O, non lo sono per un generico O'.

L'interpretazione più naturale di questo paradosso si basa sull'analogia con le onde elastiche assumendo l'esistenza di un mezzo estremamente rigido e rarefatto le cui deformazioni corrisponderebbero ai campi elettromagnetici. Il mezzo fu battezzato *etere* e si pose il problema di individuare il sistema di riferimento solidale con l'etere.

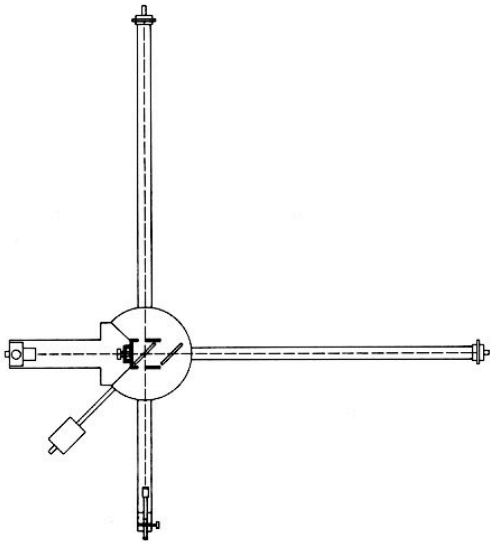
Considerando che il rapporto fra la velocità orbitale della terra e quella della luce vale circa 10^{-4}, la rivelazione dell'eventuale moto della terra rispetto all'etere richiede una misura della velocità della luce con una precisione migliore di una parte su diecimila. Vedremo come Michelson riuscì, impiegando metodi interferenziali, a raggiungere questa precisione in misure di velicità.

Un altro aspetto dello stesso problema appare se si considera la forza scambiata fra due cariche in quiete relativa. Dal punto di vista di un osservatore in quiete rispetto alle cariche, la forza è determinata dalla legge di Coulomb. Quindi, se le cariche hanno lo stesso segno, si respingono nel modo ben noto. Però un osservatore che vede le cariche in movimento deve considerare che esse generano anche campi magnetici che agiscono sulle altre cariche in moto secon-

do la legge di forza di Lorentz. Se la velocità delle cariche è perpendicolare alla loro distanza relativa, si vede subito che la forza di Lorentz è opposta a quella Coulombiana e porta a una riduzione della forza elettrostatica di un fattore $1 - v^2/c^2$. Per quanto piccola, la differenza delle forze scambiate nei due sistemi inerziali corrisponde a una differenza nelle accelerazioni che è incompatibile col principio di Galileo alla cui luce anche la legge di Coulomb non può essere valida in qualunque sistema di riferimento inerziale. Essa vale solo nel sistema dell'etere. Evidentememte è difficile raggiungere una precisione sufficiente a verificare quest'effetto in una misura di forza; si consideri, per esempio, che, nel caso di due elettroni accelerati tramite una differenza di potenziale di 10^4 V si ha: $v^2/c^2 \simeq 4\ 10^{-4}$. Per questo la misura del moto della terra rispetto all'etere fu effettuate tramite lo studio della velocità della luce.

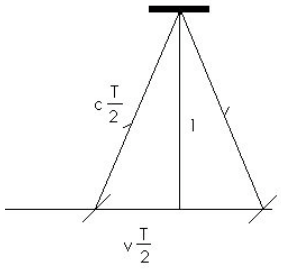
2.0.1 L'esperimento di Michelson e le trasformazioni di Lorentz.

L'analisi sperimentale fu eseguita da Michelson con un interferometro a due braccia del tipo schematizzato in figura. La sorgente L genera un fascio che è diviso in due dallo specchio semiriflettente S. I due fasci percorrono nei due sensi i bracci 1 e 2 dell'interferometro essendo riflessi agli estremi dei bracci stessi.



In S i fasci si ricombinano interferendo lungo il tratto che raggiunge l'obiettivo O. L'interferometro misura la differenza ΔT dei tempi impiegati dai due fasci nei loro percorsi. Se i due bracci hanno la stessa lunghezza l e la luce si muove con la stessa velocità c lungo i due percorsi $\Delta T = 0$ e in O si ha luce (interferenza costruttiva).

Se però l'apparato è in movimento con velocità v rispetto all'etere e per semplicità poniamo che la velocità sia parallela al braccio 2, il percorso lungo il fascio 1 verrà visto dall'etere come riportato in figura e il tempo di percorrenza nel cammino di andata e ritorno lungo il braccio 1 risulta dal teorema di Pitagora:

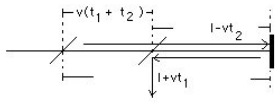


$$c^2T^2 = 4l^2 + v^2T^2 \ ,$$

da cui si ha:

$$T = \frac{2l/c}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \, ,$$

Considerando invece l'altro fascio, si ha un tempo di andata t_1 lungo il braccio 2 e di ritorno t_2 dati da



$$t_1 = \frac{l}{c - v} \qquad t_2 = \frac{l}{c + v} \ ,$$

quindi il tempo di percorrenza totale del fascio 2 è:

$$T' = t_1 + t_2 = \frac{2l/c}{1 - v^2/c^2} = \frac{T}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \ ,$$

per piccoli valori di v/c si ha allora:

$$\Delta T \equiv T' - T = \frac{Tv^2}{2c^2} = \frac{lv^2}{c^3} \ .$$

Questo risultato mostra che l'apparato è in linea di principio in condizione di rilevare movimenti del laboratorio rispetto all'etere.

Se assumiamo di poter valutare una differenza di tempo di percorrenza pari a 1/20 del periodo della luce, cioè, poniamo, $\delta T \sim 5\ 10^{-17}$ secondi, e assumiamo $l = 2\ m$ e quindi $l/c \simeq 0.6 \cdot 10^{-8}\ sec$, otteniamo una sensibilità $\delta v/c = \sqrt{\delta T c/l} \sim 10^{-4}$, cioè $v \sim 3\ 10^4\ m/sec$, che corrisponde alla velocità della

terra nel suo moto orbitale. Confrontando il risultato della misura a distanza di 6 mesi, quando la velocità della terra è variata di $\sim 10^5$m/sec, dovremmo accorgerci del movimento della Terra. L'esperimento, fatto e ripetuto in diversi periodi dell'anno, dimostrò, insieme ad altre osservazioni complementari, che l'etere non esiste.

Da ciò Einstein dedusse che le leggi di trasformazione delle coordinate spazio-temporali previste da Galileo,

$$\begin{aligned} x' &= x - vt \\ t' &= t \end{aligned} \tag{2.1}$$

sono inadeguate e vanno sostituite con altre trasformazioni, sempre lineari, che devono rispettare la condizione di invarianza della velocità della luce, cioè trasformare la retta $x = ct$, legge oraria di un segnale luminoso emesso nell'origine a $t = 0$, in $x' = ct'$. La linearità della trasformazione è necessaria affinché un moto uniforme risulti tale in entrambi i sistemi.

Ponendo che l'origine di O' vista da O appaia in moto con velocità v, si ha:

$$x' = A(x - vt) \ , \tag{2.2}$$

d'altra parte la trasformazione inversa deve essere

$$x = A(x' + vt') \ , \tag{2.3}$$

infatti le due formule devono essere trasformate una nell'altra scambiando $x \leftrightarrow x'$, $t \leftrightarrow t'$, $v \leftrightarrow -v$. Combinando (2.2) e (2.3) si ottiene:

$$t' = \frac{x}{Av} - \frac{x'}{v} = \frac{x}{Av} - \frac{Ax}{v} + At = A\left(t - \frac{x}{v}(1 - \frac{1}{A^2})\right) \ . \tag{2.4}$$

Ponendo $x = ct$ in (2.2) e (2.4) si ha

$$x' = c\,At\,(1 - \frac{v}{t}) \quad , \quad t' = At\left(1 - \frac{c}{v}(1 - \frac{1}{A^2})\right)$$

allora imponendo $x' = ct'$ si ha:

$$\left(1 - \frac{c}{v}(1 - \frac{1}{A^2})\right) = (1 - \frac{v}{c}) \ ;$$

da cui si ottiene senza troppe difficoltà

$$A = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \ . \tag{2.5}$$

Possiamo quindi scrivere:

$$x' = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(x - vt) \quad , \quad t' = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(t - \frac{v}{c^2}x) \; , \tag{2.6}$$

mentre lee coordinate perpendicolari non variano.

$$y = y' \quad , \quad z = z' \; . \tag{2.7}$$

Queste sono le trasformazioni di Lorentz.

Se riscriviamo la (2.6) in termini di x e $x_0 \equiv ct$ otteniamo, ponendo $\sinh\chi \equiv \frac{v}{c}/\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}$:

$$x' = \cosh\chi \; x - \sinh\chi \; x_0 \quad , \quad x'_0 = \cosh\chi \; x_0 - \sinh\chi \; x \; .$$

Da queste equazioni appare una certa analogia con le rotazioni in due dimensioni: $x' = \cos\theta \; x - \sin\theta \; y$, e $y' = \cos\theta \; y + \sin\theta \; x$. Questa analogia si estende al fatto che, mentre le rotazioni conservano la lunghezza $x^2 + y^2$ le (2.6) conserva $x^2 - x_0^2$. Infatti

$$x'^2 - x'^2_0 = (\cosh\chi \; x - \sinh\chi \; x_0)^2 - (\cosh\chi \; x_0 - \sinh\chi \; x)^2 = x^2 - x_0^2 \; .$$

Questo suggerisce di pensare alle trasformazioni di Lorentz come "rotazioni" generalizzate nello spazio-tempo.

Le componenti (x, y, z) della posizione $\vec{r}$ dell'evento e il tempo t sono considerate componenti di un *quadrivettore* di cui $r^2 - c^2t^2$ sostituisce il quadrato della lunghezza invariante per trasformazioni di Lorentz che paraltro può essere negativo. Dati due quadrivettori di coordinate rispettive (x_1, y_1, z_1, t_1) e (x_2, y_2, z_2, t_2) , si può anche definire il loro *prodotto scalare* che vale $x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2 - c^2t_1t_2$ ed è pure invariante.

Il concetto di tetravettore è approfondito in Appendice A.

Tra le conseguenze principali delle trasformazione di Lorentz si ha una diversa legge di addizione delle velocità, attesa, data l'invarianza della velocità della luce. Se consideriamo una particella che, vista dal sistema O, al tempo t sta in x e al tempo $t + \Delta t$ sta in $x + \Delta x$ muovendosi con velocità $V = \Delta x/\Delta t$, nel sistema di riferimento O' sarà

$$\Delta x' = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(\Delta x - v\Delta t) \qquad \Delta t' = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(\Delta t - \frac{v}{c^2}\Delta x) \; ,$$

dividendo ambo i membri si ha

$$V' \equiv \frac{\Delta x'}{\Delta t'} = \frac{\Delta x - v\Delta t}{\Delta t - \frac{v}{c^2}\Delta x} = \frac{V - v}{1 - \frac{vV}{c^2}} \tag{2.8}$$

invece di $V' = V - v$ come previsto dalla relatività Galileiana. Si noti che se $V = c$ anche $V' = c$ e quindi la (2.8) risolve il paradosso della invarianza della velocità della luce.

Inoltre, se l'osservatore O ha un orologio posto in $x = 0$ che batte il tempo con periodo T, l'osservatore O' osserverà un periodo $T' = T/\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$, dunque $T < T'$, cioè un orologio in moto (in questo caso rispetto all'osservatore O') rallenta nel modo indicato (dilatazione dei tempi). Questo risultato è confermato da osservazioni su particelle subatomiche che si disintegrano spontaneamente con ben determinati valori medi dei tempi di vita. La vita media osservata per le particelle in moto aumenta, rispetto a quella delle particelle in quiete con la stessa legge ricavata per l'aumento del periodo dell'orologio. Si noti che il risultato è in accordo con quanto osservato circa il tempo di percorrenza del fascio 1 nell'interferometro di Michelson, che è $2l/c$ se osservato in quiete e $2l/(c\sqrt{1 - v^2/c^2})$ in moto.

Perché il tempo di percorrenza del fascio 2 sia lo stesso, bisogna che la lunghezza l del braccio parallelo alla nella direzione del moto, sia ridotta a $l\ \sqrt{1 - v^2/c^2}$, cioè che il braccio in moto parallelo alla sua lunghezza sia visto contratto.

A conferma di ciò osserviamo che $x_1(t_1) = 0$ e $x_2(t_2) = L$ sono le equazioni parametriche delle linee orarie degli estremi di un segmento di lunghezza L solidale coll'osservatore O. Per l'osservatore O' si ha:

$$x'_1 = \frac{vt_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad , \quad t'_1 = \frac{t_1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad , \quad x'_2 = \frac{L - vt_2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad , \quad t'_1 = \frac{t_1 - \frac{vL}{c^2}}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

L'osservatore O' misura la distanza relativa degli estremi: $L' = x'_2 - x'_1$ per $t'_1 = t'_2$, cioè per $t_1 = t_2 - vL/c^2$ trovando:

$$L' = \frac{L}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - \frac{v(t_2 - t_1)}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = L\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

Questo conferma che in generale un corpo in moto è osservato schiacciato nella direzione della propria velocità (contrazione delle lunghezze).

È evidente che le formule ricavate perdono significato per $v^2/c^2 > 1$, quindi possiamo concludere che non sono possibli sistemi o segnali in movimento con velocità superiori a c.

Un'altra conseguenza delle trasformazioni di Lorentz è la variazione delle leggi dell'effetto Doppler che trattiamo qui nel caso longitudinale in cui il moto del segnale è parallelo a quello relativo dei sistemi di riferimento.

Ricordiamo che un segnale monocromatico che si annulla in $x = 0\ ,\ t = 0$ e ha frequenza ν, lunghezza d'onda λ e ampiezza A_0 è dato da:

$$A(x,t) = A_0 \sin(2\pi(\frac{x}{\lambda} - \nu t)) = A_0 \sin(\frac{2\pi}{\lambda}(x - vt))\ .$$

Poniamo che l'osservatore O' percepisca un segnale di velocità V e ampiezza $A'(x',t') = A_0 \sin(k(x' - Vt'))$. Assumendo che l'osservatore O, in moto con velocità v rispetto a O', rilevi un segnale dello stesso valore nei punti e istanti (*eventi*) corrispondenti, otteniamo il segnale osservato da O:

$$\begin{aligned} A(x,t) &= A_0 \sin(\frac{k}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(x - vt - V(t - \frac{v}{c^2}x))) \\ &= A_0 \sin(\frac{k}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}((1 + \frac{vV}{c^2})x - (v+V)t))\ . \end{aligned} \tag{2.9}$$

Questo vuol dire che la frequenza osservata da O è :

$$\nu = \frac{k(v+V)}{2\pi\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} = \nu' \frac{1-\frac{v}{V}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

che è appunto la legge di trasformazione delle frequenze per l'effetto Doppler longitudinale. Nel caso specifico di onde elettromagnetiche $V = c$ per cui la formula da:

$$\nu = \nu' \sqrt{\frac{1-\frac{v}{c}}{1+\frac{v}{c}}}\ ,$$

se il segnale si muove parallelamente al riferimento O.

La formula per l'effetto Doppler nel caso non longitudinale può essere calcolato in modo del tutto analogo ma, per ragioni di economia di tempo, non viene trattato in modo esplicito

Queste sono le conseguenze geometriche principali delle trasformazioni di Lorentz. Vogliamo ora considerare le principali conseguenze dinamiche. Per questo è necessario richiamare alcuni risultati basilari della meccanica classica.

Esercizi e problemi

1. Un'astronave lunga 150 m si muove rispetto a una stazione spaziale alle velocità $v = 2\,10^8\ m/sec$, qual è la lunghezza dell'astronave misurata dalla stazione?

   Soluzione: $L = L_0\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} \simeq 112\ m$.

2. Dopo quanti anni un orologio atomico (preciso a una parte su 10^{15}) solidale con la terra avrà perduto un secondo rispetto a un orologio identico solidale col sole? (applicare le formule di trasformazione dei tempi come se il moto relativo fosse rettilineo uniforme).

   Soluzione: $T = \frac{1}{1-\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\ 1\ sec \simeq 2\frac{c^2}{v^2}\ sec \simeq 6.35\ anni$.

3. Una particella μ con massa $m = 1,7\ 10^{-28}\ kg$ e carica eguale all'elettrone vive a riposo $10^{-6}\ s$. La particella viene accelerata in un tempo trascurabile tramite una differenza di potenziale pari a $10^8\ V$; quanto tempo vive, nel laboratorio, dopo l'accelerazione?

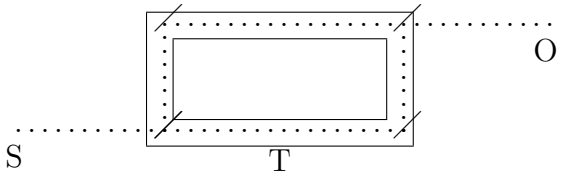
   Soluzione: $t = t_0\ \frac{mc^2+eV}{mc^2} \simeq 1.96\,10^{-6}\ sec$.

4. Viene lanciato un segnale laser della frequenza $\nu = 10^{15} Hertz$ contro uno specchio in moto con velocità opposta al segnale $v = 5\,10^7 m/sec$; si misura successivamente la frequenza ν' della luce laser riflessa dallo specchio e che ritorna all'osservatore precedendo lo specchio. Quanto vale ν'?

   Soluzione: $\nu' = \nu\frac{1+\frac{v}{c}}{1-\frac{v}{c}} \simeq 1.4\,10^{15}\ Hertz$.

5. Nell'esperimento di interferenza descritto in figura un fascio di luce di frequenza $\nu = 10^{15} Hertz$ prodotto in S viene separato in due fasci distinti

che, percorsi i lati di un rettangolo di lunghezza pari a 10 m e 5 m, si ricompongono come indicato in figura interferendo in fase in O. Il percorso rettangolare è contenuto in un tubo T pieno di un liquido con indice di rifrazione $n = 2$; la velocità della luce nel liquido vale quindi $v_c = 1.5\ 10^8\ m/sec$. Se il liquido viene posto in movimento in senso circolatorio antiorario nel tubo con velocità pari a 0.3 m/sec; la velocità della luce lungo i lati del percorso rettangolare cambia insieme alla sua lunghezza d'onda che è vincolata dall'equazione $v_c = \lambda\nu$. Per questa ragione i due fasci si ricompongono in O con una differenza di fase non nulla (la fase è data da 2π volte il rapporto fra la lunghezza del cammino percorso e la lunghezza d'onda). Valutate la differenza di fase $\Delta\phi$ e confrontarla con quella che si avrebbe se si calcolasse la velocità composta tramite la somma vettoriale.



Soluzione: Posto $L = 15\ m$ e usando la formula di Einstein si ha $\Delta\phi = 4\pi Lv(n^2 - 1)/\lambda c(1 - n^2v^2/c^2) \simeq 4\pi Lv(n^2 - 1)/\lambda c \simeq 1.88\ rad$. Usando la formula di Galileo si ha $\Delta\phi = 4\pi Lv(n^2 - 1)/\lambda c\Delta\phi = 4\pi Lvn^2/\lambda c$ che è assurda perché da un risultato non nullo nel caso di tubo vuoto.

6. Il mio orologio anticipa di un secondo all'anno rispetto all'ora ufficiale, nel tentativo di correggere quest'anticipo, pongo l'orologio in movimento circolare con velocità angolare ω al capo di un filo molto robusto di lunghezza $L = 2\ m$, sperando di non alterarne il funzionamento. Quanto deve valere ω per compensare l'anticipo?

Soluzione: Si ha $\Delta t_{or.} = (1 - \epsilon)\Delta t_{uf.}$, con $\epsilon = (1\text{sec.})/(1\text{anno}) \simeq 3.1 \cdot 10^{-8}$. Voglio $\Delta t'_{or.} = \gamma\Delta t_{or.} = \gamma(1-\epsilon)\Delta t_{uf.} = \Delta t_{uf.}$, da cui $\gamma = 1/\sqrt{1 - v^2/c^2} = 1/(1-\epsilon)$. Essendo $\epsilon \ll 1$, si avrà anche $v^2/c^2 \ll 1$, per cui sviluppando in serie ottengo $v^2 \simeq 2\epsilon c^2$ e quindi $\omega = v/L \simeq 3.7 \cdot 10^4$ rad/sec.

7. Si ha un flusso di particelle di carica $1,6\ 10^{-19}$ *Coulomb* in moto lungo l'asse x con velocità $v = 0,9c$. Se l'intensità della corrente trasportata è 10^{-9} *Ampere*, assumendo le particelle equidistanti, calcolarne la densità (il numero per unità di lunghezza) misurata nel sistema di riferimento in moto solidale con le particelle stesse.

   Soluzione: Sia d_0 la distanza fra le particelle misurata nel sistema solidale con le particelle stesse. Nel sistema del laboratorio tale distanza appare contratta e pari a $d = \sqrt{1 - v^2/c^2}d_0$. La corrente misurata nel laboratorio è $i = d^{-1}vq$ dove q è la carica delle particelle. Si ricava quindi per la densità nel sistema solidale con le particelle

$$d_0^{-1} = \sqrt{1 - v^2/c^2}\frac{i}{vq} \simeq 10.1 \text{ particelle/metro}$$

8. Una freccia ha una punta triangolare isoscele con altezza h doppia della base l; a quale velocità v bisogna scagliare la freccia perché la punta appaia come un triangolo equilatero?

   Soluzione: Assumendo che la punta sia stata montata lungo l'asse di simmetria e che la freccia sia stata scagliata bene, l'altezza del triangolo appare contratta nel sistema in cui la freccia si muove, $h' = \sqrt{1 - v^2/c^2}h$, mentre la base, ortogonale al moto, resta invariata $l' = l$. Dalla richiesta $h' = \frac{\sqrt{3}}{2}l'$ (triangolo equilatero) e sapendo $h = 2l$ ricaviamo $v^2/c^2 = 13/16$ e quindi $v \simeq 2.7\ 10^8$ m/sec.

9. Una particella si muove con velocità $v = \frac{1}{2}c$ lungo la bisettrice fra fra l'asse x e l'asse y. Per un osservatore in moto con velocità $V = 0,99\ c$ parallela all'asse x quali sono le componenti della velocità della particella?

   Soluzione: Nel sistema iniziale $v_x = v_y = \frac{1}{2\sqrt{2}}c$. Applicando le regole relativistiche di composizione delle velocità si ricava

$$v'_x = \frac{v_x - V}{1 - v_x V/c^2} \simeq -0.979c\ ; \quad v'_y = \sqrt{1 - V^2/c^2}\frac{v_y}{1 - v_x V/c^2} \simeq 0.0767c\ .$$

10. Due astronavi in moto sulla stessa rotta alla velocità $v = 0,98\ c$ oltrepassano la stazione spaziale Alfa, posta sulla rotta, alla stessa ora di due

giorni successivi. A bordo di ciascuna astronave è posto un sistema radar che permette di misurarne la distanza ralativa. Qual'è il valore fornito dai radar?

Soluzione: Sia L la lunghezza del segmento con estremi le due astronavi nel sistema della stazione Alpha: evidentemente $L = vT$ dove $T = 1$giorno. D'altra parte la distanza misurata nel sistema della stazione appare contratta rispetto alla distanza fra le astronavi nel loro sistema di riposo: quest'ultima è quindi $L_0 = \frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} vT \simeq 1.27\ 10^{14}$ metri.

11. Ci troviamo sulla traiettoria di volo di una astronave che si muove a velocità costante emettendo degli impulsi elettromagnetici ad intervalli di tempo regolari (se misurati nel sistema di riposo dell'astronave). Nella fase in cui l'astronave si avvicina a noi, percepiamo gli impulsi emessi con un intervallo di 1 sec. uno dall'altro. Tale intervallo diventa pari a 2 sec. nella fase in cui l'astronave si allontana da noi. Con quale velocità l'astronave si muove relativamente al nostro sistema di riferimento?

    Soluzione: Detta v la velocità dell'astronave, si ricava

    $$\frac{1 + v/c}{1 - v/c} = 2$$

    da cui $v = 1/3\ c$.

12. Durante un episodio di guerre stellari la stazione α rileva un'astronave nemica a $d = 10^8\ km$ di distanza in avvicinamento con velocità $v = .9c$ e, immediatamente, lancia un missile con velocità $v' = .95\ c$ per distruggerla. L'astronave nemica rileva il missile tramite i segnali elettromagnetici emessi dallo stesso e, immediatamente, lancia un contro missile dello stesso tipo di quello della stazione α, che pertanto si muove con velocità $.95\ c$ nel riferimento dell'astronave.

    Quanto tempo, dopo aver inviato il loro missile, hanno gli abitanti della stazione α per abbandonarla prima che sia distrutta?

    Soluzione: Nel riferimento della stazione l'astronave rileva il lancio del missile della stazione alla distanza: $x_1 = dc/(c + v)$ e al tempo $t_1 = d/(c + v)$ dopo l'istante di allarme di α. Nello stesso riferimento il missile dell'astronave si muove

con velocità $V = (v + v')/(1 + vv'/c^2) \simeq .9973c$ e colpisce la stazione a tempo $t_f = t_1 + x_1/V \simeq 352\ sec$.

13. Si considera il moto relativistico unidimensionale con accelerazione costante a e con condizioni iniziali di riposo nell'origine ($x = v = u = 0$ per $t = \tau = 0$). Le equazioni del moto sono la seguenti:

$$\frac{du}{d\tau} = a\sqrt{1 + \frac{u^2}{c^2}}$$

$$\frac{d\tau}{dt} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$$

$$v = \frac{dx}{dt} = \frac{u}{\sqrt{1 + \frac{u^2}{c^2}}}$$

Determinate la legge oraria $x = x(t)$ per $t > 0$.

Soluzione: Dalla terza equazione del moto che da v in funzione di u si ricava facilmente che

$$\sqrt{1 + \frac{u^2}{c^2}}\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = 1$$

da cui combinando la prima e la seconda equazione del moto si ricava $\frac{du}{dt} = a$. Date le condizioni iniziali si integra subito $u(t) = at$, da cui usando la terza equazione del moto segue

$$v(t) = \frac{at}{\sqrt{1 + \frac{a^2t^2}{c^2}}}$$

che integrata con la condizione $x(0) = 0$ porta a

$$x(t) = \frac{c^2}{a}\left(\sqrt{1 + \frac{a^2t^2}{c^2}} - 1\right) .$$

14. L'astronave A, in moto rispetto alla stazione S con velocità pari a $2,7\ 10^8\ m/sec$ parallela agli assi x dei due sistemi di riferimento, incrocia la stazione stessa all'istante $t_A = t_S = 0$. Sia l'astronave, sia la stazione sono poste nell'origine dei propri sistemi di riferimento. All'istante stesso del

passaggio dell'astronave, S rileva un evento, corrispondente all'emissione di un segnale luminoso, nel punto $x_S = 3\ 10^{13}\ m$. Un evento analogo, ma distinto, è rilevato dall'astronave A nel punto di coordinate: $x_A = 13\ 10^{13}\ m$, $t_A = 2,3\ 10^3\ s$. Determinate le coordinate del primo evento nel sistema dell'astronave. Calcolate l'intervallo di tempo fra i due eventi e la loro distanza spaziale nello stesso riferimento e dite se i due eventi possono essere associati all'emissione di due segnali distinti dallo stesso corpo in movimento.

Soluzione: Le trasformazioni di Lorentz fra i due riferimenti sono: $x_A = \gamma[x_S - \beta c t_S]$, $ct_A = \gamma[ct_S - \beta x_S]$ con $\beta = 0.9$ e quindi $\gamma = 2.294$.

Segue che le coordinate del primo evento in A sono $x_A^{(1)} = 6.882\ 10^{13}\ m$ e $ct_A^{(1)} = -6.194\ 10^{13}\ m$. Quindi $x_A^{(2)} - x_A^{(1)} = 6.118\ 10^{13}\ m < ct_A^{(2)} - ct_A^{(1)} = 6.263\ 10^{13}\ m$ e quindi i due eventi possono essere associati all'emissione di due segnali distinti dallo stesso corpo in movimento con velocità $0.977c$.

15. Ci stiamo muovendo verso la superficie di uno specchio con velocità v ortogonale alla superficie stessa. Inviamo un impulso elettromagnetico di frequenza $\nu = 10^9\ Hz$ verso lo specchio, nella direzione del moto. Riceviamo dopo 2 secondi un impulso riflesso di frequenza $\nu' = 1.32\ 10^9\ Hz$. Fra quanti secondi ci schianteremo sullo specchio?

Soluzione: La velocità relativa allo specchio dedotta dall'effetto Doppler è βc con $\frac{1+\beta}{1-\beta} = 1.32$ e quindi $\beta = 0.138$.

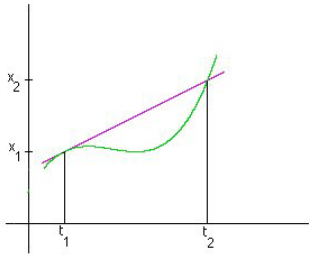
1 secondo dopo l'istante iniziale lo specchio si trova a un secondo/luce da noi. Per raggiungerci impiega $\Delta T = \frac{1}{0.138} = 7.25$ secondi . Dall'istante iniziale $8.25s$.

2.0.2 La cinematica relativistica

La meccanica classica è governata dal principio di *minima azione*. A ogni sistema meccanico è associata una Lagrangiana $\mathcal{L}(t, q_i, \dot{q}_i)$, con le dimensioni di un'energia, funzione, oltre che del tempo, delle coordinate q_i e dell velocità $\dot{q}_i$. $\mathcal{L}$ è definita a meno di una funzione del tipo: $\Delta\mathcal{L}(t, q_i, \dot{q}_i) = \sum_i \partial F(t, q_i)/\partial q_i + \partial F(t, q_i)/\partial t$. Data una legge oraria, cioè una ben precisa legge di evoluzione delle coordinate $q_i(t)$ nell intervallo di tempo $t_1 \leq t \leq t_2$, si definisce l'azione:

$$A = \int_{t_1}^{t_2} dt\ \mathcal{L}(t, q_i(t), \dot{q}_i(t))\ . \tag{2.10}$$

Il principio di minima azione stabilisce che le equazioni del moto equivalgono a condizioni di minimo per l'azione nell'intervallo di tempo considerato assumendo fisse le configurazioni iniziale $q_i(t_1)$ e finale $q_i(t_2)$ del sistema. Per una particella libera non relativistica in una dimensione una possibile scelta della Lagrangiana è: $\mathcal{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \text{Cost}$ ed è evidente che fra tutti i grafici orari quello rettilineo minimizza l'azione.



Per un sistema di particelle di posizione $\vec{r}_i\ ,\ i = 1, ..n$, e velocità $\vec{v}_i$, una deformazione della legge oraria: $\vec{r}_i \to \vec{r}_i + \delta\vec{r}_i$ con $\delta\vec{r}_i(t_1) = \delta\vec{r}_i(t_2) = 0$ corrisponde alla variazione dell'azione:

$$\delta A = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i}\delta\vec{r}_i(t) + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}_i}\delta\vec{v}_i(t) \right] = \int_{t_1}^{t_2} dt \sum_{i=1}^{n} \left[\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}_i} \right] \delta\vec{r}_i(t)\ .$$

Quindi la condizione di stazionarietà di A per $\delta\vec{r}_i(t)$ arbitrario equivale al sistema dell equazioni Lagrangiane:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r}_i} - \frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v}_i} = 0\ . \tag{2.11}$$

In generale è possibile scegliere la Lagrangiana in modo che l'azione sia invariante, cioè condivida le proprietà di invarianza delle leggi del moto del sistema. In particolare nel caso di una particella libera relativistica l'azione invariante deve dipendere dal grafico orario in modo tale da non cambiare col sistema di riferimento.

Dato un generico grafico orario di una particella puntiforme è possibile definire *tempo proprio* del grafico come quello segnato da un orologio che si muove (senza guastarsi) mantenendosi solidale alla particella. Dato che un intervallo di tempo infinitesimo di durata dt_0 misurato dall'orologio solidale corrisponde a una durata $dt = dt_0/\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$ per un osservatore fisso se la particella si muove con velocità v. L'intervallo di tempo $t_{02} - t_{01}$ misurato dall'orologio solidale corrispondente all'intervallo $t_2 - t_1$ per un osservatore fisso e vale:

$$\int_{t_1}^{t_2} dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \int_{t_{01}}^{t_{02}} dt_0 = t_{02} - t_{01}\ .$$

t_0 viene detto *tempo proprio* del sistema in moto. Ovviamente l'integrale al primo membro non dipende dal particolare sistema di riferimento scelto, dato che il risultato, $t_{02} - t_{01}$, è in ogni caso il tempo misurato dall'orologio solidale.

L'azione di una particella libera deve essere scrivibile come integrale sulla curva oraria di equazione parametrica $\vec{r} = \vec{r}(t)$ che viene anche chiamata *linea d'universo*. Dovendo essere invariante per trasformazioni di Lorentz, essa è necessariamente proporzionale al tempo proprio:

$$A = k \int_{t_1}^{t_2} dt \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} \tag{2.12}$$

e quindi; $\mathcal{L}_{lib} = k\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}$. Per velocità molto piccole rispetto a c si ha lo sviluppo in serie

$$\mathcal{L}_{lib} = k \left(1 - \frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2} - \frac{1}{8}\frac{v^4}{c^4} + \dots \right) \tag{2.13}$$

confrontando con la formula classica possiamo concludere che $k = -mc^2$.

Consideriamo ora un processo d'urto fra particelle. La lagrangiana del sistema all'inizio e alla fine del processo deve tendere alla somma delle Lagrangiane delle singole particelle coinvolte nell'urto, cioè

$$\mathcal{L}(t)|_{|t|\to\infty} \to \mathcal{L}^{(as)} = \sum_{i=1}^{n_I} \mathcal{L}_{lib,i} = -\sum_{i=1}^{n_I} m_i c^2 \sqrt{1 - \frac{v_i^2}{c^2}} \tag{2.14}$$

Dove $\mathcal{L}(t)$ fornisce la descrizione completa del processo d'urto, $\mathcal{L}_{lib,i}$ è la lagrangiana della particella libera i-esima e l'ultima identità si riferisce al caso di particelle relativistiche.

Se le particelle non sono soggette a forze esterne $\mathcal{L}$ è invariante per traslazioni, cioè non cambia se tutte le posizioni delle particelle sono traslate dello stesso vettore $\vec{a}$: $\vec{r_i} \to \vec{r_i} + \vec{a}$.

La **condizione d'invarianza** si scrive:

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{a}} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r_i}} = 0 \ .$$

Combinando questa equazione con le equazioni di Lagrange (2.11) si ottiene **l'equazione di conservazione**:

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v_i}} = 0$$

Questo significa che la somma delle grandezze vettoriali $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v_i}}$ non cambia nel tempo

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}_{lib,i}}{\partial \vec{v_i}}|_{t\to-\infty} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \mathcal{L}_{lib,i}}{\partial \vec{v_i}}|_{t\to\infty} \ .$$

Considerando in modo specifico particelle relativistiche si ha:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{v}}\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}} = -\frac{\vec{v}}{c^2\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}$$

e , ponendo: $\vec{v_i}|_{t\to-\infty} = v_{i,I}$ e $\vec{v_i}|_{t\to\infty} = v_{i,F}$, si ottiene:

$$\sum_{i=1}^{n} \frac{m_i \vec{v}_{i,I}}{\sqrt{1-\frac{v_{i,I}^2}{c^2}}} = \sum_{i=1}^{n} \frac{m_i \vec{v}_{i,F}}{\sqrt{1-\frac{v_{i,F}^2}{c^2}}} \ . \tag{2.15}$$

Si vede chiaramente andando al limite di piccoli $\frac{v}{c}$ che questa equazione è la generalizzazione della legge di conservazione dell'impulso totale del sistema e che la quantità $m\vec{v}/\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}$ è **l'impulso** di una particella relativistica.

Il caso finora considerato è quello in cui le particelle non cambiano natura nell'urto, peraltro nel caso relativistico le particelle possono fondersi o disintegrarsi perdendo o acquistando massa. Questo significa che, in generale, le particelle finali non coincidono con quelle iniziali; per esempio è possibile che nell'urto fra due particelle si producano altre particelle o che una particella si disintegri spontaneamente. In ogni caso l'invarianza della Lagrangiana per traslazioni nello spazio (2.0.2) resta valida insieme alla conservazione dell'impulso totale del sistema che ne consegue. Riferendoci in particolare agli stati iniziale e finale in cui il sistema appare come composto da particelle non interagenti, la legge conservazione implica l'eguaglianza fra la somma degli impulsi delle particelle iniziali e quella delle particelle finali e quindi la (2.15) si generalizza in:

$$\sum_{i=1}^{n_I} \frac{m_i^{(I)} \vec{v}_{i,I}}{\sqrt{1-\frac{v_{i,I}^2}{c^2}}} = \sum_{j=1}^{n_F} \frac{m_j^{(F)} \vec{v}_{j,F}}{\sqrt{1-\frac{v_{j,F}^2}{c^2}}} \ , \tag{2.16}$$

dove $m^{(I)}$ e $m^{(F)}$ sono rispettivamente le masse delle particelle iniziali e finali del processo.

Similmente, se la lagrangiana non dipende esplicitamente dal tempo, si ha, sempre facendo uso delle equazioni di Lagrange,

$$\frac{d}{dt}\mathcal{L} = \sum_i \left(\dot{\vec{v_i}}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v_i}} + \vec{v_i}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r_i}}\right) = \sum_i \left(\dot{\vec{v_i}}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v_i}} + \vec{v_i}\frac{d}{dt}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{r_i}}\right) = \frac{d}{dt}\sum_i \vec{v_i}\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \vec{v_i}}$$

che equivale alla conservazione:

$$\frac{d}{dt}\left[\sum_i \vec{v_i}\cdot\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial\vec{v_i}}-\mathcal{L}\right]=0\ , \tag{2.17}$$

Nel caso di particelle relativistiche libere la quantità conservata in (2.17) diventa

$$\sum_i\left(\vec{v_i}\cdot\frac{m_i\vec{v_i}}{\sqrt{1-\frac{v_i^2}{c^2}}}+m_ic^2\sqrt{1-\frac{v_i^2}{c^2}}\right)=\sum_i\frac{m_ic^2}{\sqrt{1-\frac{v_i^2}{c^2}}}\ . \tag{2.18}$$

Nel limite non relativistico $mc^2/\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\simeq mc^2+\frac{1}{2}mv^2$ a meno di termini proporzionali a v^4. La condizione di conservazione diventa allora quella della somma delle energie cinetiche non relativistiche delle particelle perché l'invarianza Galileiana impone la conservazione della massa.

È interessante considerare come si trasformano le componenti dell'impulso e l'energia sotto trasformazioni di Lorentz. Per questo ci limitiamo al caso unidimensionale in cui sia la velocità V della particella, sia quella v del sistema in moto sono parallele all'asse x. Passando dal sistema O a O' si ha

$$V'=\frac{V-v}{1-vV/c^2}$$

$$1-\frac{V'^2}{c^2}=1-\frac{(V-v)^2}{c^2(1-vV/c^2)^2}=\frac{(1-vV/c^2)^2-(V-v)^2/c^2}{(1-vV/c^2)^2}=$$

$$=\frac{1+v^2V^2/c^4-2vV/c^2-V^2/c^2-v^2/c^2+2vV/c^2}{(1-vV/c^2)^2}=\frac{(1-v^2/c^2)(1-V^2/c^2)}{(1-vV/c^2)^2}\ .$$

Possiamo quindi scrivere

$$P'=\frac{mV'}{\sqrt{1-\frac{V'^2}{c^2}}}=\frac{m(V-v)(1-vV/c^2)}{(1-vV/c^2)\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\sqrt{1-\frac{V^2}{c^2}}}=\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(P-\frac{v}{c}\frac{E}{c}) \tag{2.19}$$

$$E'=\frac{mc^2}{\sqrt{1-\frac{V'^2}{c^2}}}=\frac{mc^2-mvV}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}\sqrt{1-\frac{V^2}{c^2}}}=\frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}(E-\frac{v}{c}cP)\ . \tag{2.20}$$

Quest equazioni mostrano che P ed E/c trasformano fra di loro in modo omogeneo a x e ct, cioè come le componenti di un quadrivettore, e quindi anche che

$P^2 - E^2/c^2$ è invariante per trasformazioni di Lorentz, cioè il suo valore non cambia cambiando sistema di riferimento (in particolare per una particella di massa m si ha $P^2 - E^2/c^2 = -m^2c^2$).

Inoltre, date due particelle, sono invarianti la quantità $P_1P_2 - E_1E_2/c^2$, e ovviamente la sua generalizzazione al caso di un moto nelle tre dimensioni spaziali: $\vec{P_1} \cdot \vec{P_2} - E_1E_2/c^2$.

Sulla base di quanto ricavato circa le proprietà di trasformazione dell'energia e della quantità di moto di una particella è importante osservare che si può parlare di un quadrivettore solo se l'energia è identificata col primo membro della (2.20) e che questo fissa la costante arbitraria che normalmente appare nella definizione dell'energia. Possiamo qunidi asserire che l'energia di riposo di una particella si vale mc^2. Dato che in generale la massa non si conserva è possibile che parte dell'energia di riposo di una particella instabile si trasformi nell'energia cinetica dei prodotti della disintegrazione o che parte dell'energia cinetica delle particelle prima dell'urto venga trasformata nell'energia di riposo delle particelle prodotte. Per esempio l'energia liberata in una reazione di fissione nucleare ha origine da un eccesso di massa di riposo nel nucleo fissile.

Le considerazioni sulla conservazione e sulle proprietà di trasformazione dell'energia e dell'impulso permettono di stabilire in modo relativamente semplice i vincoli cinematici connessi a processi di urto. Illustriamo questo punto con un esempio.

Per esempio in processi di urto relativistici è possibile produrre nuove particelle da urti fra particelle disponibili in natura. L'urto di due nuclei di idrogeno (protoni), la cui massa è $m = 1.6\ 10^{-27}\ Kg$ può produrre la particella π la cui massa μ vale circa $2.4\ 10^{-28}\, Kg$. Tecnicamente si accelerano protoni nel sistema di riferimento del *laboratorio* fino a ottenere un un fascio con un certo impulso p che viene convogliato su idrogeno a riposo. Questo provoca urti protone-protone da cui possono emergere, oltre ai protoni esistenti prima dell'urto, le particelle π prodotte (Schematicamente si ha la reazione $p + p \to p + p + \pi$). È naturale chiedersi quale sia l'energia minima delle particelle del fascio necessaria per produrre la reazione. Per rispondere a questa domanda conviene pensare di porsi nel sistema del *centro di massa* delle due particelle (protoni) iniziali, cioè nel sistema in cui i due protoni sono visti con impulsi opposti che immaginiamo paralleli, o antiparalleli, all'asse x: $P_1 = -P_2$ ed energie eguali $E_1 = \sqrt{c^2P_1^2 + m^2c^4} = E_2$. In questo sistema di riferimento l'impulso totale P è nullo e l'energia totale $E = 2E_1$. Il vincolo della conservazione dell'energia e dell'impulso chiede che anche la somma degli impulsi delle tre particelle finali

si annulli e che la somma delle loro energie sia eguale a E. Naturalmente la condizione in cui ci vogliamo porre è quella in cui E è minima. Dato che l'energia di una particella è minima quando la particella è a riposo (essa vale Mc^2 se M è la massa della particella) e che il vincolo cinematico sull'impulso totale nel sistema $p + p + \pi$ del centro di massa è perfettamente compatibile con lo stato di riposo delle tre particelle, possiamo concludere che il valore minimo di E nel centro di massa è $E_{min} = (2m + \mu)c^2$. Tuttavia questa non è la risposta al nostro quesito che piuttosto riguarda il valore l'impulso del protone del fascio nel laboratorio quando l'energia totale nel centro di massa è E_{min}. Un modo naturale per rispondere è osservare che il protone del fascio nel centro di massa ha energia $\frac{E_{min}}{2}$ esattamente come l'altro protone che nel laboratorio era a riposo; questo ci permette di calcolare la velocità relativa βc centro di massa-laboratorio identificandola con quella corrispondente alla trasformazione di Lorentz che fa passare da un protone con energia $\frac{E_{min}}{2}$ in uno a riposo, cioè risolvendo:

$$\frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{E_{min}}{2mc^2} = \frac{2m+\mu}{2m} \ .$$

L'impulso totale del sistema nel centro di massa è, come abbiamo detto, nullo e l'energia totale E_{min}. Invece nel laboratorio l'impulso totale è ottenuto con la trasformazione di Lorentz appena considerata e vale:

$$P_L = \frac{\beta}{\sqrt{1-\beta^2}}\frac{E_{min}}{c} = \sqrt{\frac{1}{1-\beta^2} - 1}\,\frac{E_{min}}{c} = (2m+\mu)c\sqrt{\frac{(2m+\mu)^2}{4m^2} - 1}$$
$$= \frac{2m+\mu}{2m}c\sqrt{4m\mu + \mu^2} \ .$$

Questa è anche la risposta al nostro quesito dato che, nel laboratorio tutto l'impulso è portato dal protone del fascio.

Un modo alternativo di ottenere lo stesso risultato senza far uso esplicito delle trasformazioni di Lorentz consiste nell'osservare che, se E_L è l'energia totale nel laboratorio, $P_L^2 - \frac{E_L^2}{c^2}$ è invariante ed è quindi eguale alla stessa espressione calcolata nel centro di massa. Sostituendo P_L con zero e E_L con E_{min} si ha:

$$P_L^2 - \frac{E_L^2}{c^2} = -(2m+\mu)^2c^2 \ .$$

Scrivendo E_L come la somma dell'energia protone del fascio che ha impulso P_L: $\sqrt{P_L^2c^2 + m^2c^4}$ e di quella del protone a riposo mc^2, si ha l'equazione per P_L:

$$P_L^2 - \frac{1}{c^2}\left[\sqrt{P_L^2c^2 + m^2c^4} + mc^2\right]^2 = -(2m+\mu)^2c^2 \ .$$

che porta allo stesso risultato ottenuto prima.

Esercizi e problemi

1. Una particella materiale ha energia totale pari a 2.5 $10^{-12} Joule$ e impulso pari a 7.9 $10^{-21} Newton \times sec$; calcolarne la massa a riposo e la velocità v.

   Soluzione: $m = \frac{\sqrt{E^2 - c^2 p^2}}{c^2} \simeq 9\ 10^{-30}\ kg$, $v = \frac{pc^2}{E} \simeq 2.85\ 10^8$m/sec.

2. Un'astronave della massa iniziale di 3 10^4 kg e spinta da un motore della potenza costante di circa 10^{13} $Watt$ è soggetta a un'accelerazione nel proprio sistema di riferimento diretta secondo l'asse x e che dipende dal tempo proprio secondo la legge: $a(\tau) = \frac{1}{(1-3\ 10^{-9}\tau)}\ m/s^2$.

   Se l'astronave parte dalla base quando $\tau = 0$, calcolare, in funzione del tempo proprio τ la velocità dell'astronave rispetto al sistema di riferimento della base, considerato inerziale.

   Soluzione: Tenendo presenti le due equazioni del moto

   $$\frac{du}{d\tau} = a(\tau)\sqrt{1 + \frac{u^2}{c^2}}$$

   $$v = \frac{u}{\sqrt{1 + \frac{u^2}{c^2}}}$$

   e posto $\alpha = 3\ 10^{-9}\ s{-}1$ e $a_0 = 1\ m/s^2$, possiamo integrare la prima equazione

   $$\frac{du}{\sqrt{1 + \frac{u^2}{c^2}}} = \frac{a_0 d\tau}{1 - \alpha\tau}$$

   ottenendo

   $$\frac{u}{c} = \sinh\left(-\frac{a_0}{\alpha c}\ln(1 - \alpha\tau)\right)$$

   e esprimendo v/c in funzione di u/c si ottiene infine

   $$\frac{v}{c} = \tanh\left(-\frac{a_0}{\alpha c}\ln(1 - \alpha\tau)\right) = \frac{1 - (1 - \alpha\tau)^{\frac{a_0}{\alpha c}}}{1 + (1 - \alpha\tau)^{\frac{a_0}{\alpha c}}}\,.$$

3. Un elettrone urtando un protone può dare vita a un processo di fusione in cui tutta l'energia disponibile viene acquisita dal neutrone risultante. L'energia di riposo del protone vale 0.938 10^9 eV, quelle del neutrone e dell'elettrone valgono rispettivamente 0.940 10^9 eV e 5 10^5 eV . Qual è la velocità di un elettrone che produce il processo considerato urtando un protone a riposo.

   Soluzione: L'energia necessaria è pari a $(0.940 - 0.938)$ 10^9 eV a cui bisogna aggiungere l'energia cinetica del neutrone finale che è dell'ordine di $\frac{(m_n - m_p)^2 c^2}{m_n}$ e quindi trascurabile rispetto a $(0.940 - 0.938)$ 10^9 eV; questo è dunque, con buona approssimazione il valore dell'energia totale $E_e \simeq 2\ 10^6\ eV$ dell'elettrone. La sua velocità è quindi $v_e = c\sqrt{1 - m_e^2/E_e^2} \simeq 2.9\ 10^8\ m/sec$. Il risultato esatto si ottiene ponendo $E_e = \frac{m_n^2 - m_p^2 - m_e^2}{2m_p} c^2$.

4. Il sistema costituito da un elettrone e un positrone, la copia dell'elettrone con massa eguale e carica opposta, si annichila a riposo in due fotoni. Ricordando che la massa dell'elettrone è 9 $10^{-31} kg$, calcolare la lunghezza d'onda di ciascun fotone. Spiegare perché lo stesso sistema non si annichila in un solo fotone.

   Soluzione: $\lambda = h/mc \simeq 4.2\ 10^{-13}\ m$. Nel sistema di riposo l'eventuale unico fotone prodotto del decadimento dovrebbe portare energia ma non impulso.

5. Un'astronave fotonica la cui massa di riposo iniziale è $M = 10^3\ kg$ riceve la spinta meccanica da un fascio di luce (fotoni) emesso nella direzione opposta al moto la cui potenza, nel sistema dell'astronave, è pari a $W = 10^{15}\ Watt$; qual è la derivata della massa a riposo rispetto al tempo proprio? E quale l'accelerazione dell'astronave nel sistema in cui il moto è incipiente?

   Soluzione: $\frac{dM}{dt} = W/c^2 \simeq 1.1\ 10^{-2}\ kg/sec$, $a = W/Mc \simeq 3.3\ 10^3\ m/sec^2$.

6. Come cambia la massa di 1 g di rame se viene scaldato da $0^o\ C$ a $100^o\ C$ sapendo che il calore specifico del rame è pari a 0.4 $Joule/g^oC$.

   Soluzione: $\Delta M = C\Delta T/c^2 \simeq 4.4\ 10^{-16}\ kg$.

7. Un fotone di energia E colpisce un elettrone a riposo e produce una coppia elettrone-positrone in modo tale che, dopo l'urto, i due elettroni e il positrone si muovono con lo stesso impulso. Sapendo che la massa delle particelle è pari a $m = 9\ 10^{-31}\ kg$ calcolare l'energia del fotone in eV e l'impulso comune alle tre particelle finali.

   Soluzione: $E = 4mc^2 \simeq 3.2\ 10^{-13}\ Joule$, $p = \frac{E}{3c} = \frac{4}{3}mc \simeq 3.6\ 10^{-22}\ N/m$

8. Un particella di massa $M = 10^{-27}\ kg$ decade, a riposo, in una particella di massa $m = 4\ 10^{-28}\ kg$ e un fotone. Quanto vale l'energia del fotone prodotto dal decadimento. Fornire il risultato in $Joule$ e in MeV (milioni di elettroni-volt).

   Soluzione: Nel sistema di riposo il fotone e la particella di massa m devono avere impulsi opposti e uguali in modulo. La conservazione dell'energia allora si scrive $Mc^2 = \sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} + pc$, dove p è il comune modulo dell'impulso finale. Risolvendo per pc, energia del fotone, si ottiene

$$pc = \frac{M^2 - m^2}{2M}c^2 = 0.42\ Mc^2 \simeq 3.78 \cdot 10^{-11}\ \text{Joule} \simeq 2.36 \cdot 10^8\ \text{MeV}\ .$$

9. Una particella di massa $M = 1\,GeV/c^2$ ed energia $E = 10\,GeV$ decade in due particelle di ugual massa $m = 490\,MeV$. Tenendo nel dovuto conto che m è appena più piccolo di $M/2$, valutare l'angolo massimo che ciascuna delle due particelle può formare nel sistema del laboratorio con la linea di volo della particella iniziale.

   Soluzione: Sia la x la direzione di volo della particella iniziale e x–y il piano del decadimento. Nel sistema del centro di massa una qualsiasi delle due particelle ottenute dopo il decadimento ha energia $\epsilon = Mc^2/2 = 0.5\ GeV$ e impulso $p_x = p\cos\theta$,

$p_y = p \sin\theta$, dove θ è l'angolo di decadimento nel sistema del centro di massa e

$$p = c\sqrt{\frac{M^2}{4} - m^2} \simeq \frac{0.1\ GeV}{c}\ .$$

Nel sistema del laboratorio, le componenti dell'impulso risultano, effettuando la trasformazione di Lorentz con parametri $\gamma = E/Mc^2 = 10$ e $\beta = \sqrt{1 - 1/\gamma^2} \simeq 0.995$,

$$p'_y = p_y = p\cos\theta$$

$$p'_x = \gamma(p\cos\theta + \beta\epsilon)\ .$$

Detto θ' l'angolo formato dalla particella con la direzione di volo nel laboratorio e posto $\alpha = \beta\epsilon/p \simeq 5$ is ottiene

$$\tan\theta' = \frac{p'_y}{p'_x} = \frac{1}{\gamma}\frac{\sin\theta}{\cos\theta + \alpha}\ .$$

Per $\alpha > 1$ (come nel presente caso) il denominatore non si annulla mai e quindi la tangente resta limitata per cui $|\theta'| < \pi/2$, cioè la particella viene emessa sempre in avanti ed esisterà di conseguenza un angolo massimo di emissione. Per calcolare tale angolo si cerca il massimo di $\tan\theta'$: imponendo $d\tan\theta'/d\theta = 0$ si trova la soluzione $\cos\theta = -1/\alpha$ e quindi infine

$$\theta'_{max} = \tan^{-1}\frac{1}{\gamma}\frac{1}{\sqrt{\alpha^2 - 1}} \simeq 0.02\ rad$$

10. Una particella di massa $M = 10^{-27}\ kg$ decade in due particelle di egual massa $m = 3\ 10^{-28}\ kg$. Se, prima del decadimento, la particella si muove con velocità $v = 0.99c$ rispetto al laboratorio e si misurano, ovviamente nel laboratorio, le energie delle particelle prodotte dal decadimento, entro quale intervallo varia l'energia osservata di una qualunque delle due particelle al variare dell'angolo di decadimento?

Soluzione: Nel sistema del centro di massa entrambe le particelle hanno energia $E = Mc^2/2$ e impulso $P = \sqrt{M^2/4 - m^2}c$. Sia θ l'angolo formato dalla direzione di volo di una delle due particelle nel centro di massa e la direzione di volo della particella iniziale nel sistema del laboratorio. Dalle leggi di trasformazione di impulso ed energia ricaviamo, per l'energia di una della particelle nel sistema del laboratorio, $E' = \gamma(E + \frac{v}{c}\cos\theta Pc)$. Dobbiamo trovare il minimo e il massimo di E' al variare di θ, per cui $E'_{\rm max/min} = (1 - v^2/c^2)^{-1}(Mc^2/2 \pm \frac{v}{c}\sqrt{M^2/4 - m^2}c^2) = (1 - v^2/c^2)^{-1}(1 \pm \frac{v}{c}0.4)Mc^2$. $E'_{\rm max} \simeq 5.562$ GeV, $E'_{\rm min} \simeq 2.406$ GeV.

11. Una particella con energia di riposo $Mc^2 = 10^9\ eV$ e impulso $p = 5\ 10^{-18}$ $Newton \times\ s$ decade in due particelle di massa $m = 2\ 10^{-28}\ kg$. Se la direzione del decadimento nel sistema di riposo della particella è perpendicolare a quella del moto della particella stessa nel laboratorio, calcolare l'angolo fra le linee di volo delle due particelle prodotte nel laboratorio.

Soluzione: Il decadimento ortogonale alla direzione di volo nel sistema di riposo implica che le particelle formano lo stesso angolo θ con la direzione di volo nel sistema del laboratorio. Sia x la direzione di volo e y la direzione ortogonale a x nel piano di decadimento. Gli impulsi delle due particelle finali possono allora essere scritti, usando la conservazione dell'impulso lungo l'asse y, come (p_x, p_y) e $(p_x, -p_y)$. La conservazione dell'impulso lungo l'asse x implica $p_x = p/2$. Inserendo questo risultato nella conservazione dell'energia si ottiene: $p_y = c\sqrt{M^2/4 - m^2}$. Si ottiene infine che l'angolo fra le due particelle è pari a $2\theta = 2\ \mathrm{atan}(p_y/p_x) \simeq 0.206$ rad.

12. Un fotone, particella con massa nulla, con energia $E = 10^4\ eV$ urta un elettrone a riposo con massa $m = 10^{-30}\ kg$ e viene riflesso all'indietro. Calcolate la velocità dell'elettrone e l'energia del fotone dopo l'urto.

Soluzione: Dalla conservazione dell'impulso deduciamo che il moto avviene tutto lungo lo stesso asse. Detto p l'impulso dell'elettrone e E' l'energia del fotone dopo l'urto, ricaviamo dalla conservazione dell'impulso $pc = E + E'$, che inserito nella equazione di conservazione dell'energia porta infine a $E' = mc^2E/(2E + mc^2) = 0.96\,10^4/eV$. Per la velocità dell'elettrone ricaviamo invece

$$v = \frac{pc^2}{\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}} = \frac{E + E'}{E + mc^2 - E'}c \simeq 0.039c$$

13. Una trottola di massa a riposo $M = 10^{-1}\ kg$ assimilabile a un disco di densità uniforme e raggio $R = 5\ 10^{-2}\ m$ ruota con velocità angolare pari a $\Omega = 10^3\ radianti/sec$.

Qual è la variazione dovuta alla rotazione dell'energia della trottola nel sistema in moto relativo con velocità $v = 0,9c$.

Soluzione: Nel sistema di riposo del centro di massa della trottola, l'energia totale può xsicuramente essere determinata secondo l'approssimazione non relativistica. Infatti la velocità massima raggiunta dai punti materiali costituenti la trottola è quella che si ha sul bordo, cioè $\Omega R = 50\ m/sec\ \simeq 1.67\ 10^{-7}\ c$. L'energia è quindi la somma

delle energie di riposo e di quelle cinetiche delle singole particelle: $E_{tot} = Mc^2 + \frac{1}{2} I\Omega^2$ con il momento di inerzia $I = \frac{1}{2} MR^2$. Dalle trasformazioni di Lorentz ricaviamo come l'energia totale trasforma da un sistema all'altro: essendo nullo l'impulso totale nel sistema del c.m. della trottola, la trasformazione è semplicemente

$$E'_{tot} = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} E_{tot} = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \left(Mc^2 + \frac{1}{2} I\Omega^2 \right) \ .$$

D'altra parte se la trottola non fosse stata in rotazione, nel sistema in moto l'energia totale sarebbe stata pari a $\frac{Mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}}$: ne deduciamo che nel sistema in moto l'energia della trottola dovuta alla rotazione è pari a $\frac{1}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \frac{1}{2} I\Omega^2 \simeq 143$ Joule.

14. Un fotone, particella con massa nulla, con energia 10^4 eV si muove lungo l'asse x; un altro fotone si muove lungo l'asse y con energia doppia del primo. Calcolare le componenti della velocità del baricentro del sistema, cioè del sistema di riferimento in cui l'impulso totale è nullo.

Soluzione: Il problema si risolve ricordando che, detti $\vec{P}$ ed E rispettivamente l'impulso totale e l'energia totale (relativistica) di un qualsiasi sistema di particelle in un qualsiasi sistema di riferimento, la velocità del centro di massa in quel sistema di riferimento è data da $\vec{v}_{cm} = c^2 \ \vec{P}/E$. Nel nostro caso, ricordando che l'impulso di una particella di massa nulla è pari alla sua energia diviso c, si ricava $v^x_{cm} = 1/3 \ c$ e $v^y_{cm} = 2/3 \ c$; noltre $|\vec{v}_{cm}| = \sqrt{5}/3 \ c$.

15. Una particella a riposo di massa $M = 10^{-27}$ kg decade in 3 particelle di ugual massa $m = 10^{-30}$ kg , quali sono la massima e la minima energia che ciascuna delle 3 particelle può assumere?

Soluzione: Siano $E_1, \ E_2, \ E_3$ le energie e $\vec{p}_1, \ \vec{p}_2, \ \vec{p}_3$ gli impulsi delle 3 particelle prodotte nel decadimento. Bisogna trovare i valori minimi e massimi ad esempio di E_1 compatibili con i vincoli cinematici dati dalla conservazione dell'impulso $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 + \vec{p}_3 = 0$ e dell'energia $E_1 + E_2 + E_3 = M \ c^2$. Il valore minimo possibile si ottiene quando la particella è prodotta a riposo, $E_1 = m \ c^2$: tale situazione è infatti compatibile con i vincoli cinematici e implica che le altre due particelle si muovano con impulsi uguali e opposti. Per trovare il valore massimo bisogna lavorare un po' di più. Riscriviamo l'identità

$$E_1^2 = m^2 \ c^4 + p_1^2 \ c^2$$

tenendo conto della conservazione dell'impulso

$$E_1^2 = m^2 \ c^4 + |\vec{p}_2 + \vec{p}_3|^2 \ c^2 = m^2 \ c^4 + (E_2 + E_3)^2 - \mu^2 \ c^4$$

dove abbiamo introdotto la massa invariante μ del sistema formato dalle particelle 2 e 3, $\mu^2\ c^4 = (E_2 + E_3)^2 - |\vec{p}_2 + \vec{p}_3|^2\ c^2$. Usando la conservazione dell'energia riscriviamo

$$E_1^2 = m^2\ c^4 + (M\ c^2 - E_1)^2 - \mu^2\ c^4$$

da cui si arriva a

$$E_1 = \frac{1}{2M\ c^2}\left(m^2\ c^4 + M^2\ c^4 - \mu^2\ c^4\right).$$

Abbiamo quindi riscritto E_1 come funzione della massa invariante del sistema delle altre due particelle, e ne deduciamo che trovare il massimo di E_1 equivale a trovare il minimo di μ^2. Dalla definizione di μ si arriva facilmente a scrivere

$$\mu^2\ c^2 = 2m^2c^2 + 2E_2E_3/c^2 - 2p_2p_3\cos\phi = 2m^2c^2 + 2\sqrt{m^2c^2 + p_2^2}\sqrt{m^2c^2 + p_3^2} - 2p_2p_3\cos\phi$$

dove ϕ è l'angolo formato dagli impulsi delle particelle 2 e 3. Per ogni p_2 e p_3 fissati si ha un minimo a $\phi = 0$, per cui possiamo sicuramente fissare tale valore di ϕ. Fatto questo si verifica poi che per ogni valore di p_2 fissato, si ha un minimo per $p_3 = p_2$ e che il valore di tale minimo è pari a $4m^2c^2$, quindi indipendente da p_2 stesso: questo sarà il minimo valore possibile per μ^2c^2. Il massimo valore di E_1 si otterrà quindi quando le altre due particelle avranno impulsi uguali $\vec{p}_2 = \vec{p}_3$ (e quindi la loro massa invariante è semplicemente la somma delle singole masse $\mu = 2m$): $E_1^{max} = \frac{1}{2M}(M^2\ - 3m^2)\ c^2$.

16. Un fascio di protoni è convogliato contro un fascio laser di direzione opposta e lunghezza d'onda pari a $0,5\ 10^{-6}\ m$.

    Si vuole regolare l'energia dei protoni in modo tale che dall'urto frontale fotone-protone possa essere prodotta una particella π la cui massa è circa $0,15$ masse protoniche.

    Determinare il valore minimo dell'energia cinetica dei protoni per cui questa reazione (protone + fotone $\rightarrow$ protone + π) può avvenire.

    Soluzione: Siano p e k i moduli degli impulsi di protone e fotone, siano M ed m le masse di protone e pione. Affinché la reazione avvenga, l'energia disponibile nel centro di massa deve essere almeno uguale alla somma delle energie a riposo di protone e pione. L'energia nel centro di massa si calcola facilmente in termini della massa invariante del sistema protone+fotone. L'energia minima E del protone è quindi data dall'equazione

    $$(E + kc)^2 - (p - k)^2c^2 = (M + m)^2c^4$$

    da cui si arriva infine a

    $$E + pc = \frac{mc^2}{kc}(M + m/2)c^2.$$

Tenendo conto che $mc^2 \simeq 0.15$ GeV e che, dai dati del problema l'energia del fotone risulta essere $kc \simeq 2.37$ eV, si deduce che $E + pc$ è circa 10^8 volte l'energia di riposo del protone, siamo quindi in ottima approssimazione ultrarelativistica per cui $E \simeq pc$, e quindi $pc \simeq \frac{mc^2}{2kc}(M + m/2)c^2 \simeq 0.34\ 10^8$ GeV, che in approssimazione ultrarelativistica praticamente coincide con l'energia cinetica del protone.

17. Una particella decade in volo in due particelle. Mediante un rivelatore vengono misurati gli impulsi e le energie delle due particelle prodotte nel decadimento, che risultano essere, prendendo un sistema di coordinate xy nel piano del decadimento: $E_1 = 2.5$ GeV, $E_2 = 8$ GeV, $p_{1x} = 1$ Gev/c, $p_{1y} = 2.25$ Gev/c, $p_{2x} = 7.42$ Gev/c, $p_{2y} = 2.82$ Gev/c. Determinare la massa a riposo e le componenti della velocità della particella iniziale, nonché le masse a riposo delle due particelle prodotte nel decadimento.

Soluzione: Dalla conservazione di energia ed impulso si ricavano energia ed impulso della particella iniziale. La velocità si ricava da $\vec{v} = \vec{p}c^2/E$, da cui deriva $v_x = 0.802c$ e $v_y = 0.483c$. Le masse a riposo si ricavano da $M^2 = E^2/c^4 - p^2/c^2$.

18. Una particella di massa $\mu = 0,14\ GeV/c^2$ con impulso parallelo all'asse z incide su una particella a riposo di massa M . Lo stato finale risultante dall'urto è formato da due particelle di masse rispettive $m_1 = 0,5\ GeV/c^2$ e $m_2 = 1,1\ GeV/c^2$. Gli impulsi delle due particelle formano lo stesso angolo $\theta = 0,01$ *radianti* con l'asse z e hanno lo stesso modulo pari a $p = 10^4\ GeV/c$. Calcolare il valore di M in GeV/c^2.

Soluzione: Dalla conservazione dell'impulso si ricava l'impulso della particella iniziale $k = 2p\cos\theta$, e quindi l'energia iniziale $E_{in} = \sqrt{\mu^2c^4 + k^2c^2} + M\ c^2$. Questa d'altra parte deve essere uguale all'energia finale pari a $\sqrt{m_1^2c^4 + p^2c^2} + \sqrt{m_2^2c^4 + p^2c^2}$, per cui si ricava

$$Mc^2 = \sqrt{m_1^2c^4 + p^2c^2} + \sqrt{m_2^2c^4 + p^2c^2} - \sqrt{\mu^2c^4 + 4p^2\cos\theta^2c^2}\ .$$

Dal valore elevato di p notiamo che possiamo applicare l'espansione ultrarelativistica al primo ordine (l'ordine zero non fornisce un buon risultato per via delle grosse cancellazioni e d'altra parte eseguire il calcolo numerico diretto non è consigliabile perché le grosse cancellazioni potrebbero indurre errori di arrotondamento rilevanti), per cui

$$Mc^2 \simeq pc\left(1 + m_1^2c^2/(2p^2)\right) + pc\left(1 + m_2^2c^2/(2p^2)\right) - 2pc\cos\theta\left(1 + \mu^2c^2/(8p^2\cos\theta^2\right) \simeq$$
$$\simeq pc\left(\theta^2 + (2m_1^2 + 2m_2^2 - \mu^2)c^2/(4p^2)\right) \simeq pc\ \theta^2 = 1\ \text{GeV}$$

Testi Consigliati

- C.Kittel, V.D.Knight, M.A.Ruderman,
  La Fisica del Berkeley - Vol. 1 cap. 6.
  Zanichelli - Bologna.
- Per un approfondimanto: L. Landau, E. Lifchitz
  La teoria del campo
  Edizioni Mir - Mosca

Capitolo 3

MECCANICA ONDULATORIA

3.0.3 La crisi dei modelli classici

La fine dell'ottocento ha visto l'affermazione della teoria elettromagnetica di Maxwell e la conseguente identificazione della luce con un segnale elettromagnetico. Questo ha però posto una serie di problemi riguardanti l'interazione della radiazione con la materia e in particolare: la radiazione emessa dai corpi caldi, il corpo nero, e quella emessa dagli atomi nonché l'assorbimento della radiazione da parte della materia.

Estremamente importante in questa luce fu la scoperta dell'elettrone, dovuta a Thomson, nel 1895, infatti fu subito chiaro che l'elettrone, la cui massa è circa 10^{-30} kg e la cui carica è circa 1.6 10^{-19} $Coulomb$, è i costituente più leggero della materia, e quindi quello che subisce maggiori accelerazioni da parte dei campi elettrici presenti nella materia stessa. In base all'espressione della potenza irradiata da una carica e con accelerazione a: $I = \mu_0 e^2 a^2/6\pi c$, l'elettrone è la particella responsabile della emissione luminosa da parte dei mezzi materiali.

Tenendo poi conto degli spettri a righe della luce emessa dai gas, cioè del fatto che la luce emessa è caratterizzata da frequenze caratteristiche del gas luminescente, si impose l'ipotesi che gli elettroni fossero legati agli atomi da forze armoniche e quindi la carica positiva negli atomi fosse uniformemente distribuita in tutto il volume atomico.

In questo contesto assunsero naturalmente un ruolo determinante gli esperimenti condotti da Hertz circa l'emissione di particelle cariche, presto identificate con elettroni, da parte di solidi investiti da un fascio di luce, l'effetto fotoelet-

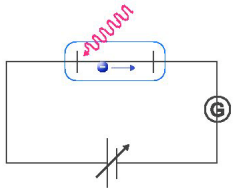
trico. Infatti il processo scoperto appare come l'inverso dell'emissione della luce da parte degli elettroni.

Nel prossimo paragrafo discuteremo in dettaglio le difficoltà di interpretazione dell'effetto fotoelettrico alla luce della fisica classica e la teoria quantistica di Einstein senza trattare la teoria di Planck del corpo nero, che verrà accennata alla fine del corso.

Anche se la teoria di Einstein vanificava l'analisi dell'interazione luce-materia nell'ambito della meccanica classica, il modello armonico degli atomi non risultò necessariamente errato fino al 1911, quando Rutherford, studiando la diffusione di particelle α da parte di lamine d'oro, riuscì a dimostrare che la carica positiva nell'atomo è concentrata in un *nucleo* di dimensioni inferiori al decimillesimo del raggio atomico. Più o meno nello stesso periodo la caccia alle righe di emissione da parte degli atomi, in particolare di quello d'idrogeno, portò alla scoperta di intere serie di righe non interpretabili tramite il modello armonico. Nei paragrafi successivi all'analisi dell'effetto fotoelettrico discuteremo il problema degli spettri atomici e dal modello di Bohr passeremo all'interpretazione ondulatoria della meccanica che resta ancora oggi quella più usata.

3.0.4 L'effetto fotoelettrico

Hertz nel 1887 scoprì l'effetto fotoelettrico. In una cella sotto vuoto sono posti due elettrodi uno dei quali (C) è colpito da luce monocromatica a frequenza variabile, l'altro elettrodo (A) viene posto a un potenziale negativo rispetto al primo determinato dal generatore G e controllato dal voltmetro V.



Misurando la corrente che fluisce nell'amperometro I si osserva che, se la frequenza della luce supera un certo valore dipendente dalla differenza di potenziale fra i due elettrodi , ν_V, l'amperometro registra un flusso di corrente i da A ad C che è proporzionale al flusso di energia luminosa incidente su C e ν_V è una funzione lineare della differenza di potenziale fra gli elettrodi:

$$\nu_V = a + bV \ . \tag{3.1}$$

Si osserva infine che il tempo di risposta dell'apparecchio all'illuminazione è sostanzialmente determinato dalla costante tempo (RC) del circuito e può essere ridotto a valori dell'ordine di $10^{-8} sec$.

L'interpretazione teorica del fenomeno rimase per circa 14 anni un problema aperto per le seguenti ragioni: Il senso del flusso di corrente e la possibilità di interromperlo aumentando la differenza di potenziale attraverso la cella mostrano che si tratta di elettroni strappati dagli atomi di C dal flusso di energia luminosa.

Un modello ragionevole per questo processo, ispirato al modello atomico di Thompson, assumeva che gli elettroni, particelle di massa $m = 9\ 10^{-31} Kg$ e carica $e = 1.6\ 10^{-19} Coulomb$ fossero legati elasticamente ad atomi di dimensioni dell'ordine di $R_A \sim 3\ 10^{-10} m$ e soggetti a una forza viscosa di costante η. Il valore di η è determinato in funzione del tempo di rilassamento atomico $\tau = \frac{2m}{\eta}$, cioè del tempo impiegato dall'atomo a disperdere la sua energia tramite irraggiamento o urti, che è circa $\tau = 10^{-8} sec$.

Per quel che riguarda l'irraggiamento una valutazione di τ può partire dalla già citata formula delle potenza irradiata: $I = \mu_0 e^2 a^2 / 6\pi c$. Infatti, nel caso di un oscillatore, il valor medio del quadrato dell'accelerazione è dato da $(\bar{a})^2 = k^2 (\bar{x})^2 / m^2 = 2\omega^2 \bar{U}/m$ dove $U \equiv kx^2/2$ è l'energia potenziale il cui valor medio $\bar{U}$ vale la metà dell'energia totale E. Si ha dunque:

$$I \equiv -\dot{E} = \frac{\mu_0 e^2 \omega^2}{6\pi m c} E \equiv 2E/\tau \tag{3.2}$$

che da per τ valori dell'ordine di $10^{-7}\ s$.

Limitandoci a considerare il problema uni-dimensionale scriviamo l'equazione del moto per un elettrone:

$$m\ddot{x} = -kx - \eta\dot{x} - eE\ , \tag{3.3}$$

dove k è determinato in funzione delle frequenze atomiche. A questo proposito ipotizziamo l'esistenza di molti atomi con frequenze diverse e distribuite in qualche modo continuo intorno a:

$$\sqrt{\frac{k}{m}} = \omega_0 = 2\pi\nu_0 \sim 10^{15} sec^{-1}\ .$$

Assumiamo un campo elettrico E oscillante: $E = E_0 \cos(\omega t)$ con $\omega \sim 10^{15} sec^{-1}$. Con questa scelta la (3.3) ammette la soluzione generale:

$$x = x_0 \cos(\omega t + \phi) + A_1 e^{-\alpha_1 t} + A_2 e^{-\alpha_2 t}$$

dove il secondo e terzo termine soddisfano l'equazione omogenea associata alla (3.3) e quindi $\alpha_{1/2}$ sono le radici dell'equazione:

$$m\alpha^2 - \eta\alpha + k = 0$$

$$\alpha = \frac{\eta \pm \sqrt{\eta^2 - 4km}}{2m} = \frac{1}{\tau} \pm \sqrt{\frac{1}{\tau^2} - \omega_0^2} \simeq \frac{1}{\tau} \pm i\omega_0 \ . \tag{3.4}$$

Nell'ultima relazione abbiamo tenuto conto degli ordini di grandezza sopra indicati.

D'altra parte, per quel che riguarda la soluzione particolare $x_0 \cos(\omega t + \phi)$, si ha sostituendo:

$$-m\omega^2 x_0 \cos(\omega t + \phi) = -kx_0 \cos(\omega t + \phi) + \eta\omega x_0 \sin(\omega t + \phi) - eE_0 \cos(\omega t)$$

cioè:

$$\begin{aligned}&(k - m\omega^2)x_0 \left(\cos(\omega t)cos\phi - \sin(\omega t)\sin\phi\right) \\ &= \eta\omega x_0 \left(\sin(\omega t)cos\phi + \cos(\omega t)\sin\phi\right) - eE_0 \cos(\omega t)\end{aligned}$$

da cui si ha il sistema:

$$\left(m\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)\cos\phi - \eta\omega\sin\phi\right)x_0 = -eE_0$$

$$m\left(\omega^2 - \omega_0^2\right)x_0 \sin\phi = \eta\omega \ x_0 \cos\phi$$

e quindi:

$$\tan\phi = \frac{2\omega}{\tau\left(\omega^2 - \omega_0^2\right)}$$

da cui, con un po' di trigonometria, si ottiene:

$$\cos\phi = \frac{\omega^2 - \omega_0^2}{\sqrt{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}}} \quad , \quad \sin\phi = \frac{\frac{2\omega}{\tau}}{\sqrt{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}}} \ .$$

Infine, per x_0, si ha la ben nota forma risonante:

$$x_0 = \frac{-\frac{eE_0}{m}}{\sqrt{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + \frac{4\omega^2}{\tau^2}}} \ . \tag{3.5}$$

Per completare il calcolo della soluzione dobbiamo determinare A_1 e A_2; peraltro, tenendo conto della realtà di x e della (3.4) possiamo riscrivere la soluzione generale nella forma equivalente:

$$x = x_0 \cos(\omega t + \phi) + Ae^{-\frac{t}{\tau}} \cos(\omega_0 t + \phi_0) \tag{3.6}$$

Se assumiamo che l'elettrone sia inizialmente in quiete, possiamo determinare A e ϕ_0 ponendo, per $t = 0$, $x = \dot{x} = 0$ cioè:

$$x_0 \cos\phi + A\cos\phi_0 = 0 \tag{3.7}$$

$$x_0\ \omega \sin\phi = A\left(\frac{\cos\phi_0}{\tau} - \omega_0 \sin\phi_0\right)$$

da cui in particolare

$$\tan\phi_0 = \frac{\omega}{\omega_0}\tan\phi - \frac{1}{\omega_0\tau} \tag{3.8}$$

Queste equazioni ci forniscono informazioni sufficienti per discutere l'effetto fotoelettrico senza che sia necessario sostituire in modo esplicito l'espressione di A nella (3.6).

Infatti nel nostro schema semplificato l'effetto avviene, con la liberazione dell'elettrone dal legame atomico, quando l'ampiezza dello spostamento x dell'elettrone supera il raggio atomico. In (3.6) lo spostamento appare la somma di due contributi, il primo corrisponde all'oscillazioni a regime, il secondo al transiente con costante tempo τ. In linea di principio le massime ampiezze potrebbero apparire nel transiente o a regime. Per decidere in merito si tratta di confrontare il valore di A con quello di x_0. Dalla (3.7) risulta chiaramente che il modulo di A è dello stesso ordine di grandezza di quello di x_0 a meno che $\cos\phi_0$ non sia molto piccolo rispetto a $\cos\phi$. D'altra parte la (3.8) ci dice che se $\tan\phi_0$ è grande, lo è anche $\tan\phi$, dato che $\frac{1}{\omega_0\tau} \sim 10^{-7}$ e che $\frac{\omega}{\omega_0} \sim 1$. Dunque, l'ordine di grandezza dello spostamento massimo è quello di x_0 e può essere sensibile al valore della frequenza del campo elettrico. Questo accade nel regime di risonanza in cui lo scostamento di ω da ω_0 è inferiore a $2\sqrt{\frac{\omega}{\tau}}$. Consideriamo dunque separatamente il caso generico e quello in risonanza.

Nel primo caso l'ordine di grandezza dello spostamento è $\frac{eE_0}{\omega^2 m}$, perche' la radice al denominatore di (3.5) ha l'ordine di grandezza di ω^2. Per avere effetto fotoelettrico è dunque necessario che:

$$\frac{eE_0}{\omega^2 m} \sim R_A$$

Questo ci permette di calcolare la densità di potenza del fascio luminoso incidente sull'elettrodo C:

$$P = c\epsilon_0 E_0^2 \sim c\epsilon_0 \left(\frac{R_A\omega^2 m}{e}\right)^2$$

dove c è ovviamente la velocità della luce e ϵ_0 la costante dielettrica del vuoto. Si vede subito che l'ordine di grandezza di P è di circa $10^{15}\ Watt/m^2$, potenza difficile da realizzare e comunque sufficiente a vaporizzare istantaneamente qualunque elettrodo. Dobbiamo concludere che il nostro modello non può rendere conto dell'effetto fotoelettrico fuori dalla risonanza. Passiamo dunque a considerare quasto caso ponendo $\omega = \omega_0$.

Questo implica, alla luce delle (3.7), (3.8) e (3.5) :

$$\phi = \phi_0 = -\frac{\pi}{2} \quad , \quad A = -x_0$$

e quindi:

$$x = \frac{eE_0\tau}{2m\omega_0}\left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}}\right)\sin(\omega_0 t)\ . \tag{3.9}$$

Quindi la condizione per avere l'effetto fotoelettrico, cioè che l'ampiezza di oscillazione superi il raggio atomico:

$$\frac{eE_0\tau}{2m\omega_0}\left(1 - e^{-\frac{t}{\tau}}\right) \geq R_A$$

pone il campo di soglia a $\frac{2m\omega_0 R_A}{e\tau}$ e la densità di potenza del fascio a:

$$P_0 = c\epsilon_0\left(\frac{4\omega_0 m R_A}{\tau e}\right)^2 \sim 100\ Watt/m^2$$

ed evidentemente i tempi necessari per raggiungere l'ampiezza di fuga sono dell'ordine di grandezza di τ.

In conclusione il nostro modello stabilisce una soglia sulla potenza del fascio e non sulla frequenza. La condizione che riguarda la frequenza è quella di risonanza per cui l'effetto cesserebbe sia sotto, sia sopra le frequenze risonanti presenti negli atomi dell'elettrodo. Inoltre ci si aspetta che, una volta raggiunto il raggio atomico l'elettrone si allontani e non scambi più in modo apprezzabile energia col campo elettrico; si avrebbe dunque un emissione eventualmente intensa, ma di elettroni con energia dell'ordine di quella acquisita dall'elettrone nell'ultima oscillazione. La (3.9) indica che nel transiente ($t << \tau$) l'ampiezza di oscillazione cresce di circa $\frac{eE_0}{m\omega_0^2}$ per ogni ascillazione e quindi l'energia che resterebbe all'elettrone avrebbe l'ordine di grandezza di $kR_A\frac{eE_0}{m\omega_0^2} = eE_0R_A$ che è l'energia acquistata dall'elettrone soggetto al campo E_0 attraversando l'atomo. Si calcola subito che per densità di potenza dell'ordine di $10 - 100\ Watt/m^2$ il campo elettrico E_0 vale circa $100\ V/m$ e l'energia acquistata dall'elettrone

$10^{-8}eV \sim 10^{-27}Joule$; un valore molto più piccolo di quello termico ($\frac{3}{2}kT \sim 10^{-1}eV$).

È evidente che il risultato proposto dal modello contrasta con i risultati sperimentali descritti all'inizio. In particolare data l'esiguità dell'energia degli elettroni usciti dall'elettrodo la corrente I dovrebbe annullarsi anche per piccole differenze di potenziale negative applicate a A.

Einstein propose una descrizione dell'effetto basata sull'ipotesi che l'energia non venga trasferita gradualmente dalla radiazione alla particella, ma in un processo *elementare*, cioè non scindibile. Propose inoltre che l'energia ceduta alla particella sia pari a $h\nu = \frac{h}{2\pi}\omega \equiv \hbar\omega$, quantità Einstein chiamò QUANTO. h è una costante che Planck aveva introdotto alcuni anni prima per descrivere la radiazione emessa da un forno e vale 6.6 $10^{-34}Joule\,\mathrm{x}\,s$.

Se l'energia del quanto è sufficiente per liberare l'elettrone dall'atomo, cioè nel nostro modello supera $E_S \equiv \frac{kR_A^2}{2} = \frac{\omega_0^2 R_A^2 m}{2} \sim 10^{-19}Joule \sim 1eV$ e quindi la frequenza supera 1.6 $10^{14}Hertz$ (corrispondenti al ω del nostro modello) l'elettrone viene emesso e conserva sotto forma di energia cinetica l'energia ricevuta in eccesso rispetto alla soglia. Il processo avviene con un intensità proporzionale al flusso di energia luminosa cioè al flusso di quanti incidenti sull'elettrodo.

Essendo $E = h\nu$ l'energia trasferita all'elettrone che ne ha speso una quantità E_S per liberarsi dall'atomo, l'elettrone esce dall'elettrodo con energia cinetica $T = h\nu - E_S$ e il flusso di corrente viene interrotto palarizzando l'altro elettrodo a una tensione negativa pari a

$$V = \frac{h\nu - E_S}{e}$$

che riproduce la (3.1).

Nella sua proposta Einstein aveva colto il punto importante già notato da Planck; un sistema con frequenza propria ν scambia energia per quanti $h\nu$. L'ordine di grandezza nel caso atomico è $\omega \sim 10^{15}sec^{-1}$, $\hbar\omega \sim 1eV$.

3.0.5 La teoria dei quanti di Bohr

Dopo l'introduzione del concetto di quanto, la *teoria dei quanti* fu sviluppata da N.Bohr e perfezionata da A. Sommerfeld che fornirono una proposta precisa per i sistemi multi-periodici, il cui moto si decompone in componenti periodiche.

Scopo principale di queste ricerche era rendere conto, nell'ambito del modello atomico di Rutherford, degli spettri della luce emessa dai gas (in partico-

lare monoatomici) eccitati da scariche elettriche. Il caso più semplice e noto è quello di un gas di idrogeno atomico (difficile da produrre perché normalmente l'idrogeno si aggrega in molecole biatomiche). Si tratta di uno spettro a righe, cioè in cui le frequenze assumono solo certi valori discreti, per la precisione i valori:

$$\nu_{n,m} = R\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \tag{3.10}$$

per tutte le coppie di interi positivi con $m > n$. Si ha inoltre che fra le righe osservate quelle più intense corrispondono a $m = n + 1$.

Rutherford aveva dimostrato che nell'atomo la carica positiva è concentrata in un nucleo praticamente puntiforme e che contiene la quasi totalità della massa. L'atomo di idrogeno in particolare si presenta come un sistema di due corpi, uno positivo e pesante che oggi chiamiamo protone, e uno leggero e negativo, l'elettrone, legati da forze Coulombiane.

Limitandoci a considerare orbite circolari di raggio r e percorse con velocità angolare ω e considerando la massa del protone infinita rispetto a quella dell'elettrone (il rapporto delle masse è circa 2000), si ha:

$$m\omega^2 r = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

dunque le frequenze orbitali, che in fisica classica coincidono con quelle della luce emessa, variano con continuità in funzione del raggio:

$$\nu = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{e}{\sqrt{16\pi^3\epsilon_0 m r^3}} \ , \tag{3.11}$$

in evidente contrasto con (3.10).

Alla luce della teoria di Einstein dell'effetto foto-elettrico Bohr propose di interpretare la (3.10) in base all'ipotesi dei quanti ipotizzando che l'atomo ammetta solo certe orbite, *livelli*, e che la frequenza $\nu_{n,m}$ corrisponda alla transizione fra il livello m-esimo e quello n-esimo. Si avrebbe allora:

$$h\nu_{n,m} = E_m - E_n \tag{3.12}$$

dove le energie atomiche (negative perche' l'elettrone è legato all'atomo) sarebbero date da:

$$E_n = -\frac{hR}{n^2} \ . \tag{3.13}$$

Dato che, secondo la fisica classica e nel caso di orbite circolari, l'energia atomica vale:

$$E_C = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \ ,$$

l'ipotesi di Bohr equivale ad assumere che i raggi delle orbite atomiche permesse siano dati da:

$$r_n = \frac{e^2 n^2}{8\pi\epsilon_0 hR} \ . \tag{3.14}$$

Evidentemente quanto ipotizzato da Bohr appare semplicemente finalizzato a riprodurre i dati osservati e non permette particolari sviluppi a meno che non si introducano ulteriori condizioni. La più naturale fra queste è che per grandi r e quindi n la (3.10) riproduca la legge classica (3.11) almeno per le righe più intense, cioè quelle con $m = n + 1$ per cui si ha:

$$\nu_{n,n+1} = R\frac{2n+1}{n^2(n+1)^2} \to \frac{2R}{n^3} \ , \tag{3.15}$$

queste frequenze andrebbero identificate nel limite con quanto dato dalla (3.11) combinata con (3.14) cioè:

$$\frac{e}{\sqrt{16\pi^3\epsilon_0 m r_n^3}} = \frac{2^{\frac{5}{2}}\epsilon_0 (hR)^{\frac{3}{2}}}{e^2\sqrt{m}n^3} \ . \tag{3.16}$$

Dal confronto fra le ultime due equazioni di ha il valore del coefficiente R in (3.10) che è detto *costante di Rydberg*:

$$R = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3}$$

in ottimo accordo con i valori sperimentali. Quindi per le energie atomiche si hanno i valori *quantizzati*:

$$E_n = -\frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^2 n^2} \quad , \quad n = 1, 2, ...$$

mentre i raggi orbitali valgono:

$$r_n = \frac{\epsilon_0 h^2 n^2}{\pi m e^2} \ . \tag{3.17}$$

Per valutare numericamente i nostri risultati è opportuno introdurre il rapporto $\frac{e^2}{2\epsilon_0 hc} \equiv \alpha \simeq \frac{1}{137}$ che è adimensionato ed è detto *costante di struttura fina*. L'energia dello stato con $n = 1$ detto *fondamentale* risulta essere:

$$-E_1 = hR = \frac{mc^2}{2}\alpha^4$$

notando che l'energia totale dell'elettrone mc^2 vale circa $0.5\,MeV$, si ha per E_1 circa $13eV$. Il raggio atomico $R_A = r_1$ vale circa $0.5\ 10^{-10}\,m$. Nonostante l'ottimo accordo con i dati sperimentali l'ipotesi di partenza che va identificata con la (3.13) appare ancora molto condizionata dalla particolare legge di Balmer delle frequenze (3.10). Per questo Bohr cercò di identificare una grandezza fisica quantizzata secondo una legge più semplice da considerarsi fondamentale. La sua idea fu che questa grandezza dovesse avere le dimensioni della costante di Planck, cioè di un'azione, o ciò che è lo stesso, di un momento angolare. Nel nostro caso si ha:

$$L = pr = m\omega r^2 = \frac{e}{4\pi\epsilon_0}\sqrt{mr_n} = \frac{h}{2\pi}n \equiv n\hbar \quad , \quad n = 1, 2, ... \tag{3.18}$$

3.0.6 L'interpretazione di de Broglie

In questo quadro di risultati parziali, ma assai convincenti dal punto di vista del riscontro fenomenologico, il vero progresso nella comprensione della fisica dei quanti si ebbe dopo che L. de Broglie suggerì l'esistenza di un *comportamento ondulatorio universale delle particelle materiali e dei quanti di energia associati ai campi di forza*. Come abbiamo visto nel caso delle onde elettromagnetiche, un processo ondulatorio è associato a una fase variabile nello spazio e nel tempo (data da $2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)$ nel caso di onda in moto parallelamente all'asse x). Assumendo un'esistenza reale dei quanti, interpretati come particelle, e validità universale per la legge di Einstein $E = h\nu$, corrisponderebbe a identificare la fase dell'onda con $2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{E}{h}t\right)$. Se ora si assume l'invarianza relativistica della fase, essa deve essere esprimibile nella forma $\frac{2\pi}{h}(px - Et)$ dove, nel caso si una particelle materiale, si identificano E e p con l'energia e l'impulso relativistici:

$$E = \frac{mc^2}{\sqrt{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}} \quad , \quad p = \frac{mv}{\sqrt{\left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)}}$$

Per semplificare al massimo la trattazione qui e in gran parte del seguito assumiamo moto unidimensionale (lungo l'asse x).

In conclusione, confrontando le ultime due espressioni della fase si ottiene l'equazione di de Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

che è complementare a quella di Einstein.

Queste formule danno subito un'idea degli ordini di grandezza a cui appaiono gli effetti quantistici. Per l'elettrone, per esempio, con energia cinetica E_C di $10^2 eV = 1.6\ 10^{-17} Joule$ gli effetti quantistici appaiono a distanze dell'ordine di $\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_C}} \sim 10^{-10} m$, che è quello delle dimensioni atomiche, o appena subatomiche; questo ci conferma l'importanza degli effetti quantistici per gli elettroni in materia condensata e in particolare nei solidi in cui intervengono energie dell'ordine del elettrone-Volt (eV). Per un gas di atomi leggeri a temperatura T l'energia cinetica prevista dal teorema di ripartizione dell'energia è $\frac{3}{2}kT$ dove k è la costante di Boltzmann. A $300K^\circ$ l'energia cinetica vale circa $2.5\ 10^{-2} eV$ e con masse dell'ordine di $10^{-26} Kg$ si hanno lunghezze d'onda dell'ordine della frazione di Angstrom, $10^{-10} m$. Però a queste distanze intervengono forze fortemente repulsive e quindi l'immagine del gas poco interagente non si applica. Per guadagnare un fattore dieci sulle distanze bisogna ridurre di un fattore 100 le temperature scendendo a pochi gradi assoluti. Pensando a un'oggetto macroscopico di massa $1Kg$ ed energia $1Joule$ si avrebbero effetti quantistici a distanze pari a $3\ 10^{-34} m$ del tutto trascurabili rispetto alle ampiezze delle oscillazioni termiche degli atomi che sono proporzionali alla radice della temperatura assoluta e raggiungo l'ordine del nanometro a circa mille gradi, quando il solido fonde.

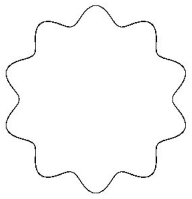
D'altra parte la formula di Einstein ci da informazioni sugli ordini di grandezza dei tempi coinvolti nei processi quantistici $\sim \frac{h}{\Delta E}$, dove ΔE corrisponde all'energia scambiata nel processo. Per energie dell'ordine del eV si hanno tempi di circa $4\ 10^{-15} sec$, mentre al livello degli scambi termici a temperatura ambiente i tempi si allungano di un fattore circa 40.

In conclusione, alla luce della formula di de Broglie non esistono effetti quantistici per i corpi macroscopici alle energie macroscopiche, per gli atomi nella materia si hanno effetti quantistici dopo la condensazione o comunque a temperature molto basse, invece gli elettroni nei solidi o negli atomi sono in pieno regime quantistico.

Se consideriamo in particolare l'elettrone in moto circolare intorno al protone nel modello atomico di Rutherford illustrato sopra, dobbiamo pensare a un'onda chiusa circolarmente sull'orbita. Si tratta dunque di un fenomeno ondulatorio

analogo alle oscillazioni di una corda elastica chiusa ad anello o dell'aria in una canna d'organo toroidale.

Se facciamo riferimento agli strumenti musicali, che non sono chiusi ad anello per ovvie ragioni pratiche, ma hanno lunghezze ben determinate, vediamo che essi funzionano a frequenze caratteristiche ben accordate.



Questo si capisce facilmente osservando che, per esempio nella canna d'organo chiusa ad anello, un giro completo intorno all'anello deve riprodurre la fase iniziale e quindi la lunghezza dell'anello deve essere pari a un numero intero di lunghezze d'onda.

Tenendo conto delle formule precedenti riguardanti le orbite atomiche circolari abbiamo per l'elettrone la lunghezza d'onda:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{e}\sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}}$$

e quindi la condizione per l'accordo delle lunghezze d'onda:

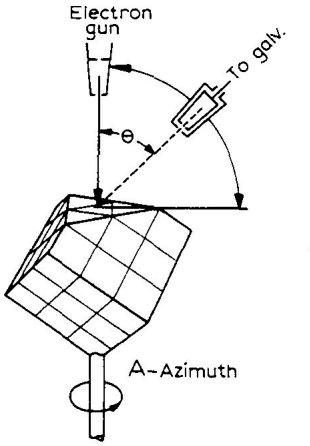
$$2\pi r = n\lambda = \frac{nh}{e}\sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m}}$$

da:

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi e^2 m}$$

che evidentemente fornisce una conferma della (3.14) e un'interpretazione dello schema di Bohr e Sommerfeld.

L'ipotesi di de Broglie, formulata nel 1924, fu confermata nel 1926 da Davisson e Gerner con una misura dell'intensità di un fascio di elettroni riflesso dalla superficie di un monocristallo di Nickel. La distribuzione angolare riflessa in condizioni di incidenza normale e in funzione del potenziale di accelerazione del fascio elettronico mostra un andamento fortemente anisotropo.
In particolare con un potenziale di accelerazione di 48 V si osserva un picco molto pronunciato a $\phi = 55,3^o$.



Un esperimento analogo condotto con raggi X mostra una figura di tipo diffrattivo che ben corrisponde all'interpretazione del cristallo come un reticolo atomico con passo $0.215\ 10^{-9}\ m$.

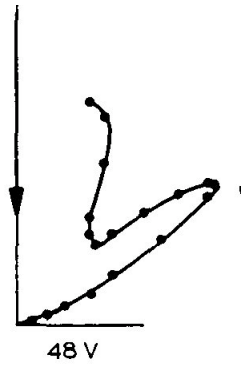
La formula che da l'angolo corrispondente al massimo di ordine n della figura diffrattiva è: $d \sin \phi_n = n\lambda$. Per il picco corrispondente a un massimo primario a $55,3^o$ si ha:

$$d\ \sin \phi = \lambda \simeq 0.175\ 10^{-9}\ m\ .$$

D'altra parte gli elettroni del fascio hanno energia cinetica

$$E_C \simeq 7,68\ 10^{-18}\ Joule$$

e quindi un impulso $p \simeq 3.7\ 10^{-24}\ Newton \times s$.



Si vede subito che il risultato è in ottimo accordo con la formula di de Broglie.
Negli anni successivi esperimenti analoghi sono stati ripetuti con altre particelle materiali, in particolare con neutroni.

Stabilito il carattere ondulatorio della propagazione delle particelle materiali dobbiamo definire a quale grandezza fisica si riferisce il fenomeno, cioè quale sia il significato fisico della grandezza, o delle grandezze, oscillanti che chiamiamo *funzione d'onda*, e per cui ipotizziamo un'equazione *lineare* in analogia con le onde meccaniche e quelle elettromagnetiche.

Normalmente, quando ci si trova davanti a una propagazione ondulatoria si pone il problema di quale sia il mezzo che porta l'onda e quale la grandezza che ne misura l'ampiezza (nel caso del mare l'acqua e l'altezza dell'onda stessa). Abbiamo già visto il caso delle onde elettromagnetiche in cui la prima domanda non ha risposta, altro che il *vuoto*, mentre le grandezze che misurano l'ampiezza sono campo elettrico e magnetico. Stiamo appunto chiedendoci chi sostituisce questi campi nel caso delle onde di de Broglie. L'esperimento di Davisson e Gerner fornisce una risposta a questo quesito. Infatti il rivelatore in figura indica la presenza di uno o più elettroni riflessi all'angolo indicato; pensando di ripetere tante volte la misura, ogni volta con un solo elettrone nel fascio, e misurando con quale frequenza gli elettroni vengono rivelati ai vari angoli, alla fine avremo misurato una *probabilità* di presenza dell'elettrone nei siti coperti dal rivelatore.

Nel caso di una misura in ottica si osserva l'effetto interferenziale nell'ener-

gia depositata dalla radiazione su una lastra fotografica; questa è proporzionale al quadrato del campo elettrico sulla lastra. Si noti che la linearità dell'equazione delle onde e la relazione quadratica fra la grandezza misurata e l'ampiezza dell'onda sono condizioni cruciali per l'esistenza di effeti d'inteferenza e di diffrazione. Dobbiamo quindi concludere che una *forma quadratica positiva* della funzione d'onda di de Broglie da la probabilità di presenza dell'elettrone nel punto considerato.

Abbiamo parlato in modo generico di forma quadratica perché non è chiaro al momento se la funzione d'onda abbia una o più componenti, se corrisponda cioè a una sola o più funzioni reali. Con forma quadratica intendiamo un polinomio omogeneo di secondo grado nelle componenti e positivo per valori reali e non nulli delle stesse. Nel caso di una sola componente si può dire senza perdere in generalità che la densità di probabilità ne è il quadrato, nel caso di due o più componenti, tramite opportune combinazioni lineari delle stesse si può ridurre la nostra forma quadratica alla somma dei quadrati.

Mostriamo ora che l'ipotesi di una sola componente è da scartare. Indichiamo con $\rho(\vec{r},t)d^3r$ la probabilità che la particella di trovi in d^3r intorno al punto $\vec{r}$ al tempo t e con $\psi(\vec{r},t)$ la funzione d'onda che, per il momento, assumiamo funzione a valori reali; poniamo

$$\rho(\vec{r},t) = \psi^2(\vec{r},t) \ . \tag{3.19}$$

Naturalmente, se Ω è lo spazio accessibile alla nostra particella, diciamo il laboratorio, la densità di probabilità è vincolata dalla condizione:

$$\int_\Omega d^3r \rho\left(\vec{r},t\right) = 1 \ , \tag{3.20}$$

che implica la condizione:

$$\int_\Omega d^3r \, \dot{\rho}(\vec{r},t) \equiv \int_\Omega d^3r \frac{\partial \rho(\vec{r},t)}{\partial t} = 0 \ . \tag{3.21}$$

Questo esprime matematicamente il fatto che, se la particella non può uscire da Ω, la probabilità di trovarla all'interno deve corrispondere permanentemene alla certezza. Questa condizione può essere riformulata in termini matematici analoghi a quelli usati per esprimere la conservazione della carica elettrica: la carica contenuta in un certo volume, cioè l'integrale della densità di carica, può variare solo se la carica fluisce attraverso le pareti. Il flusso della carica attraverso le pareti è espresso come flusso della densità di corrente e, tramite il teorema

di Gauss-Green ($\int_\Omega \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = \Phi_{\partial\Omega}(J) = -\int_\Omega \dot{\rho}$), riportato all'integrale della divergenza della stessa densità di corrente. Finalmente, riducendo l'equazione dalla forma integrale a quella differenziale, si ha l'identificazione della derivata temporale della densità di carica con la divergenza della densità di corrente.

In base a questa analogia introduciamo $\vec{J}$, densità di *corrente di probabilità* e scriviamo:

$$\dot{\rho}(\vec{r},t) = -\frac{\partial J_x(\vec{r},t)}{\partial x} - \frac{\partial J_y(\vec{r},t)}{\partial y} - \frac{\partial J_z(\vec{r},t)}{\partial z} \equiv -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t)\ . \tag{3.22}$$

L'equazione di conservazione deve essere soddisfatta come conseguenza automatica dell'equazione delle onde di de Broglie che scriviamo nella forma generica:

$$\dot{\psi} = L\left(\psi, \vec{\nabla}\psi, \nabla^2\psi, ..\right)\ , \tag{3.23}$$

dove il simbolo L sta a indicare una dipendenza lineare da ψ o le sue derivate, per esempio:

$$L\left(\psi, \vec{\nabla}\psi, \nabla^2\psi, ..\right) = \alpha\psi + \beta\nabla^2\psi\ . \tag{3.24}$$

Si noti che stiamo assumendo l'invarianza della fisica per riflessione delle coordinate e quindi escludendo termini nelle derivate prime in (3.24).

Usando la (3.19) abbiamo $\dot{\rho} = 2\psi\dot{\psi}$ che per la (3.23) si scrive nella forma:

$$\dot{\rho} = 2\psi L\left(\psi, \vec{\nabla}\psi, \nabla^2\psi, ..\right) \tag{3.25}$$

il cui secondo membro va identificato con: $-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t)$. Inoltre $\vec{J}$ deve necessariamente essere bilineare in ψ e nelle sue derivate, dato che tale è $\dot{\rho}$. Quindi si deve avere una relazione del tipo:

$$\vec{J} = c\ \psi\vec{\nabla}\psi + d\ \vec{\nabla}\psi\nabla^2\psi + ...$$

da cui ben si vede che $\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t)$ deve necessariamente contenere termini bilineari in cui entrambe le funzioni d'onda sono derivate, come $\vec{\nabla}\psi\cdot\vec{\nabla}\psi$, ma tali termini non possono apparire nella (3.25).

Si deve concludere che la descrizione delle onde di de Broglie richiede almeno 2 funzioni d'onda ψ_1 e ψ_2 per cui si può sempre porre $\rho = \psi_1^2 + \psi_2^2$. In modo del tutto equivalente si può introdurre la funzione a valori complessi:

$$\psi = \psi_1 + i\psi_2\ , \tag{3.26}$$

ponendo:

$$\rho = |\psi|^2\ . \tag{3.27}$$

Questa scelta implica evidentemente:

$$\dot{\rho} = \psi^* \dot{\psi} + \psi \dot{\psi}^* \ .$$

Se, a titolo di esempio, assumiamo l'equazione d'onda corrispondente alla scelta (3.24), cioè:

$$\dot{\psi} = \alpha\psi + \beta\nabla^2\psi \ , \tag{3.28}$$

otteniamo subito:

$$\dot{\rho} = \psi^* \left(\alpha\psi + \beta\nabla^2\psi\right) + \psi \left(\alpha^*\psi + \beta^*\nabla^2\psi^*\right) \ ,$$

se inoltre assumiamo la densità di corrente di probabilità:

$$\vec{J} = ik \left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) \ , \tag{3.29}$$

scegliendo k reale in modo che anche $\vec{J}$ lo sia, si vede facilmente che

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J} = ik \left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) \ .$$

È quindi immediato constatare che l'equazione di continuità (3.22) è soddisfatta se:

$$\alpha + \alpha^* = 0 \qquad \beta = -ik \ . \tag{3.30}$$

È di grande interesse fisico anche il caso in cui la funzione d'onda ha più di due componenti reali. In particolare la funzione d'onda degli elettroni ha quattro componenti, cioè due componenti complesse. La molteplicità delle componenti complesse è in generale legata all'esistenza di un momento angolare interno, detto *spin*. Le varie componenti complesse sono associate ai diverse orientazioni possibili dello spin. Nel caso di particelle di massa non nulla il numero di componenti complesse della funzione d'onda vale $2S + 1$ dove S è lo spin della particella. Nel caso dell'elettrone $S = \frac{1}{2}$.

Per molte particelle, come per l'elettrone, lo spin è associato a un momento magnetico proprio della particella. Essa si comporta con un magnetino microscopico di cui è possibile selezionare le diverse orientazioni, collegate a quelle dello spin, immergendo la particella in un campo magnetico non uniforme e misurando la forza risultante.

3.0.7 L'equazione di Schrödinger

Il caso più semplice a cui applicare le nostre considerazioni è quello di una particella libera di massa m in moto non relativistico. Per semplicità di notazione e di calcolo d'ora in poi ci limiteremo a considerare il caso di moto unidimensionale, cioè il caso in cui il moto avviene parallelamente all'asse x, nel caso non libero anche le forze saranno parallele allo stesso asse. La generalizzazione dei risultati al caso tridimensionale sarà facilitata dal formalismo vettoriale. In pratica sostituiremo sistematicamente all'operatore differenziale $\vec{\nabla}$ a sua componente $\nabla_x = \frac{\partial}{\partial x} \equiv \partial_x$ e quindi il Laplaciano $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ verrà sostituito con $\frac{\partial^2}{\partial x^2} \equiv \partial_x^2$ e nello stesso modo $\vec{J}$ sarà sostituito da J_x (J). Per generalizzare i risultati ottenuti al caso tridimensionale basterà procedere alla sostituzione inversa.

L'energia della particella libera non relativistica è

$$E = c\sqrt{m^2c^2 + p^2} \simeq mc^2 + \frac{p^2}{2m} + O(p^4)$$

dove abbiamo dichiarato l'intenzione di trascurare termini di ordine $\left(\frac{p}{mc}\right)^4$. Assumendo l'interpretazione di de Broglie scriviamo la funzione d'onda:

$$\psi_P(x,t) \sim e^{2\pi i\left(\frac{x}{\lambda} - \nu t\right)} = e^{\frac{2\pi i}{\hbar}(px - Et)} \tag{3.31}$$

(stiamo rappresentando il moto nella direzione positiva dell'asse x). La nostra scelta implica l'equazione d'onda

$$\dot{\psi}_P = -\frac{iE}{\hbar}\psi_P = -\frac{i}{\hbar}\left(mc^2 + \frac{1}{2m}p^2\right)\psi_P \ . \tag{3.32}$$

Abbiamo inoltre

$$\partial_x \psi_P = \frac{i}{\hbar} p \psi_P \ , \tag{3.33}$$

da cui deduciamo subito

$$i\hbar \ \dot{\psi}_P = mc^2\psi_P - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_P \ . \tag{3.34}$$

Si può semplificare la nostra costruzione moltiplicando la funzione d'onda di partenza per il fattore di fase $e^{\frac{-imc^2t}{\hbar}}$ cioè scrivendo

$$\psi \equiv e^{\frac{imc^2t}{\hbar}}\psi_P \sim e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)} \tag{3.35}$$

che evidentemente, non cambiando la dipendenza da x, mantiene la validità della (3.33) e l'interpretazione probabilistica della funzione d'onda. Infatti ρ e J non sono alterate. L'equazione d'onda diventa invece:

$$i\hbar\ \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi \equiv T\psi\ . \tag{3.36}$$

Questa è *l'equazione di Schrödinger* della particella libera in cui il secondo membro ha un'interpretazione naturale in termini di energia della particella che nel caso libero è del tipo cinetico.

Nel caso di particelle soggette a forze corrispondenti all'energia potenziale $V(x)$ l'equazione si generalizza in modo naturale aggiungendo all'energia cinetica quella potenziale:

$$i\hbar\ \dot{\psi} = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi + V(x)\psi\ . \tag{3.37}$$

Questa è l'equazione di Schrödinger unidimensionale che noi applicheremo a vari casi d'interesse fisico.

La (3.29) e la (3.30) mostrano che la densità di corrente di probabilità non dipende da V ed è data da:

$$J = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*\right)\ . \tag{3.38}$$

Tornando al caso libero, e considerando la funzione d'onda *piana* (3.31) è necessario osservare che la densità di probabilità corrispondente $\rho = |\psi|^2$ è costante. Questo è un risultato paradossale perché, riducendo la (3.20) a una dimensione e precisamente all'asse x, si ottiene

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ \rho(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ |\psi(x,t)|^2 = 1\ , \tag{3.39}$$

che non può essere soddisfatta nel caso in esame perché l'integrale di una costante diverge. Dobbiamo concludere che la nostra intepretazione esclude la possibilità che una particella abbia impulso perfettamente definito.

Resta la speranza che la difficoltà sia superabile ammettendo una (piccola) incertezza nella conoscenza dall'impulso. Questa possibilità è facilmente analizzabile grazie alla linearità dell'equazione di Schrödinger. Infatti la (3.36) ammette, accanto all'onda piana, anche la soluzione *pacchetto d'onde*, costruita come sovrapposizione di molte onde tramite l'integrale:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp\ \tilde{\psi}(p)e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)}\ .$$

Da quest'equazione sorge naturale l'interpretazione di $|\tilde{\psi}(p)|^2$ come proporzionale, tramite l'opportuna costante di normalizzazione, alla densità di probabilità nell'impulso esattamente come $\rho(x)$ è densità di probabilità nella posizione.

Scegliamo in particolare una distribuzione Gaussiana:

$$\tilde{\psi}(p) \sim e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\Delta^2}} \ , \tag{3.40}$$

a cui corrisponde:

$$\psi_\Delta(x,t) = k \int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\frac{(p-p_0)^2}{4\Delta^2}} \ e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)} \ . \tag{3.41}$$

Qui k va determinato in modo che $\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi_\Delta(x,t)|^2 = 1$.

L'integrale in (3.41) può essere calcolato ricordando che, se α è un numero complesso con parte reale positiva ($Re\ \alpha > 0$) si ha,

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\alpha p^2} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}$$

e che la misura integrale di Riemann dp è invariante per traslazioni nel piano complesso. Cioè

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\alpha p^2} \equiv \int_{-\infty}^{\infty} d(p+\gamma) \ e^{-\alpha(p+\gamma)^2} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\alpha(p+\gamma)^2} = e^{-\alpha\gamma^2} \int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\alpha p^2} e^{-2\alpha\gamma p} \ , \end{aligned}$$

per qualunque numero complesso γ. Quindi si ha

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\alpha p^2} e^{\beta p} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{\frac{\beta^2}{4\alpha}} \tag{3.42}$$

Sviluppando la (3.41) e usando la (3.42) si ha

$$\begin{aligned} \psi_\Delta(x,t) &= k e^{-\frac{p_0^2}{4\Delta^2}} \int_{-\infty}^{\infty} dp \ e^{-\left[\frac{1}{4\Delta^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right]p^2} \ e^{\left[\frac{p_0}{2\Delta^2} + \frac{ix}{\hbar}\right]p} \\ &= k \sqrt{\frac{\pi}{\frac{1}{4\Delta^2} + \frac{it}{2m\hbar}}} \ e^{\frac{\left[\frac{p_0}{2\Delta^2} + \frac{ix}{\hbar}\right]^2}{\frac{1}{\Delta^2} + \frac{2it}{m\hbar}} - \frac{p_0^2}{4\Delta^2}} \ . \end{aligned} \tag{3.43}$$

Noi siamo interessati in particolare alla dipendenza da x della densità di probabilità nella posizione $\rho(x)$, per questo ci interessa unicamente la parte reale dell'esponente in (3.43). Sviluppando questo esponente abbiamo

$$\frac{\frac{p_0^2}{4\Delta^4} + \frac{ip_0x}{\Delta^2\hbar} + \frac{x^2}{\hbar^2}^2}{\frac{1}{\Delta^2} + \frac{2it}{m\hbar}} - \frac{p_0^2}{4\Delta^2} = -\frac{p_0^2}{4\Delta^2} \frac{\frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2} + \frac{2it\Delta^2}{m\hbar}}{1 + \frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}} - \left(\frac{\Delta^2 x^2}{\hbar^2} - \frac{ip_0x}{\hbar}\right) \frac{1 - \frac{2it\Delta^2}{m\hbar}}{1 + \frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}}$$

la cui parte reale è

$$-\frac{\frac{\Delta^2}{\hbar^2}\left(x-\frac{p_0 t}{m}\right)^2}{1+\frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}} \equiv -\frac{\frac{\Delta^2}{\hbar^2}\left(x-v_0 t\right)^2}{1+\frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}} \ .$$

Essendo evidentemente p_0 l'impulso medio della particella, abbiamo introdotto la corrispondente velocità media $v_0 = \frac{p_0}{m}$. Tenendo conto della definizione di ρ e della sua normalizzazione, troviamo infine

$$\rho(x,t) = \frac{\Delta}{\hbar}\sqrt{\frac{2}{\pi\left(1+\frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}\right)}}e^{-\frac{2\Delta^2}{\hbar^2}\frac{(x-v_0 t)^2}{1+\frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}}} \ , \tag{3.44}$$

mentre per quel che riguarda l'impulso si ha

$$\tilde{\rho}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\Delta}e^{-\frac{(p-p_0)^2}{2\Delta^2}} \ . \tag{3.45}$$

Data una distribuzione Gaussiana $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma}e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}}$ è ben noto dalla teoria degli errori, ed è comunque facilmente calcolabile usando le formula riportate sopra, che si ha un valor medio $\bar{x}$ pari a x_0 ed uno scarto quadratico medio $\overline{(x-\bar{x})^2}$ pari a σ^2. Dunque, nel caso in esame, per la posizione si ha valor medio $\bar{x} = v_0 t$ e scarto quadratico medio $\left(1+\frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}\right)\frac{\hbar^2}{4\Delta^2}$, mentre per l'impulso si ha il valor medio p_0 e lo scarto quadratico medio Δ^2. Questi valori medi ben rappresentano le variabili cinematiche di una particella libera, mentre gli scarti quadratici medi sono approssimativamente inversamente proporzionali; migliorando la definizione di una variabile si perde in definizione dell'altra.

Le distribuzioni (3.44) e (3.45), pur ricavate in un esempio particolare, permettono di raggiungere conclusioni del tutto generali che, per chiarezza, elen-chiamo qui di seguito in punti distinti.

Il Principio d'Indeterminazione

Mentre lo scarto quadratico medio della distribuzione in impulso

$$\overline{(p-\bar{p})^2} = \Delta^2$$

è stato scelto a priori parametrizzando $\tilde{\psi}(p)$ ed è indipendente dal tempo, a conferma che l'impulso di una particella libera è una costante del moto, quello

relativo alla posizione

$$\overline{(x-\bar{x})^2} = \left(1 + \frac{4t^2\Delta^4}{m^2\hbar^2}\right)\frac{\hbar^2}{4\Delta^2}$$

non contiene ulteriori parametri liberi e dipende dal tempo. Infatti Δ_x cresce in maniera significativa per $\frac{2t\Delta^2}{m\hbar} > 1$ cioè per tempi superiori a $t_s = \frac{m\hbar}{2\Delta^2}$. Si noti che t_s altro non è che il tempo che una particella con impulso Δ impiega per percorrere una distanza $\frac{\hbar}{2\Delta}$, pertanto lo sparpagliamento ha un'interpretazione naturale anche dal punto di vista della fisica classica: un gruppo di particelle indipendenti con una distribuzione in impulso di larghezza Δ_p si sparpaglia con velocità $\frac{\Delta_p}{m} = v_s$; se le particelle sono statisticamente distribuite su un intervallo Δ_x questo aumenta in modo significativo su tempi dell'ordine di $\frac{\Delta_x}{v_s}$.

Quello che è nuovo nei nostri risultati è, prima di tutto, che si riferiscono a una sola particella. Quindi le incertezze in posizione e impulso sono inevitabili. In secondo luogo le incertezze sono interdipendenti. Senza considerare l'effetto di sparpagliamento già discusso, si vede bene che si può diminuire l'incertezza in una delle due variabili solo a spesa dell'altra. Infatti Δ può essere eliminata dalle nostre equazioni scrivendo la disuguaglianza:

$$\Delta_x\Delta_p \equiv \sqrt{\overline{(x-\bar{x})^2}\ \overline{(p-\bar{p})^2}} \geq \frac{\hbar}{2}\ . \tag{3.46}$$

Questa disuguaglianza costituisce il *principio d'indeterminazione di Heisenberg*.

Da un punto di vista fenomenologico l'origine di questo principio sta nell'universalità dei fenomeni diffrattivi. Infatti sono questi fenomeni che rendono impossibile misurare simultaneamente, e con precisione arbitrariamente buone, posizione e impulso.

A titolo di esempio consideriamo il caso in cui la determinazione della posizione è eseguita con strumenti di tipo ottico; per aumentare la risoluzione strumentale bisogna ridurre le lunghezze d'onda della luce usata, aumentando con ciò gli impulsi dei fotoni che urtano l'oggetto misurato e ne alterano in modo incontrollato l'impulso. Se invece la posizione è determinata con strumenti meccanici, come fenditure, sono gli effetti diffrattivi che provocano indeterminazione negli impulsi.

È importante valutare l'ordine di grandezza dell'indeterminazione quantistica in situazioni di interesse pratico. Pensiamo per esempio a un fascio di elettroni emesso per effetto termoionico da un catodo alla temperatura di $T = 1000K^o$ e accelerati da una differenza di potenziale di 10^4V; l'ordine di grandezza dell'indeterminazione in energia cinetica Δ_E è kT dove $k = 1.38\ 10^{-23}\ Joule/K^o$ è

la costante di Boltzmann (in alternativa si può usare invece $k = 8.6\ 10^{-5}\ eV/K^o$). Dunque $\Delta_E = 1.38\ 10^{-20}\ Joule$ mentre $E = 1.6\ 10^{-15}\ Joule$ che corrisponde a una buona definizione in energia del nostro fascio ($\frac{\Delta_E}{E} \sim 10^{-5}$). Possiamo calcolare facilmente l'indeterminazione in impulso usando la legge di propagazione dell'errore relativo ($\frac{\Delta_p}{p} = \frac{1}{2}\frac{\Delta_E}{E}$) e calcolando $p = \sqrt{2mE} = 5.6\ 10^{-23}\ Newton \times s$; otteniamo $\Delta_p = 2.8\ 10^{-28}\ Newton \times s$ e quindi per la (3.46) $\Delta_x \geq 2\ 10^{-7} m$. Evidentemente il principio d'indeterminazione non pone un limite molto significativo nel caso di fasci di particelle.

Un corpo macroscopico $M = 1Kg$ a temperatura ambiente ($300K^o$) ha un impulso termico medio dovuto agli urti con le molecole dell'aria pari a $\Delta_p \sim \sqrt{2m\frac{3}{2}kT} \simeq 9\ 10^{-11}\ Newton \times s$ e quindi la sua indeterminazione quantistica minima della posizione risulta $\Delta_x \sim 10^{-24}\ m$.

Il principio d'indeterminazione è invece assai rilevante al livello atomico, infatti non è difficile constatare che l'indeterminazione è il meccanismo che stabilizza l'atomo impedendo all'elettrone di precipitare sul nucleo. Possiamo rozzamente pensare al raggio orbitale dell'elettrone come ordine di grandezza dell'indeterminazione della sua posizione ($\Delta_x \sim r$) e valutare l'ordine di grandezza dell'energia cinetica indotta dall'indeterminazione sull'impulso; abbiamo $E_C \sim \frac{\Delta_p^2}{2m} \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2}$.

Tenendo conto dell'energia di legame Coulombiana si ha per l'energia totale

$$E_T(r) \sim \frac{\hbar^2}{2mr^2} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}\ .$$

Il sistema è stabile perché la funzione $E_T(r)$ ha un minimo assoluto. Calcolando il valore di r corrispondente r_m si ha

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_m^2} - \frac{\hbar^2}{m r_m^3} = 0$$

da cui

$$r_m \sim \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$$

che riproduce perfettamente il valore del raggio atomico dedotto dalla (3.14).

Le velocità delle onde

Studiando le onde elettromagnetiche abbiamo mostrato che esse si muovono senza deformarsi con velocità $c = \sqrt{\epsilon_0\mu_0}$ e che, per un onda armonica, c è il

prodotto della lunghezza d'onda per la frequenza. Nel caso delle onde di de Broglie introdotte in (3.35), si ha $\nu = \frac{p^2}{2mh}$ e $\lambda = \frac{h}{p}$; dunque la velocità delle onde armoniche è data dal prodotto $v_F \equiv \lambda\nu = \frac{p}{2m}$. Se invece consideriamo il pacchetto d'onde (3.43) e la corrispondente densità (3.44) vediamo chiaramente un movimento di traslazione del pacchetto con velocità $v_G \equiv \frac{p_0}{m}$, pari alla velocità classica della particella con impulso p_0. Abbiamo usato simboli diversi per distinguere la velocità delle singole componenti piane v_F, che è chiamata *velocità di fase*, da v_G che è la velocità collettiva del pacchetto e viene chiamata *velocità di gruppo*. Il risultato deducibile dalle nostre equazioni è che, contrariamente al caso delle onde elettromagnetiche nel vuoto, nel caso di de Broglie le due velocità sono diverse, la velocità di gruppo non coincide col valor medio delle velocità di fase delle singole componenti. Inoltre la velocità di fase dipende dalla lunghezza d'onda ($v_F = \frac{h}{2m\lambda}$).

La relazione fra frequenza e lunghezza d'onda nel caso elettromagnetico e data da $\nu = \frac{c}{\lambda}$ mentre nel caso di de Broglie si ha $\nu = \frac{h}{2m\lambda^2}$.

Vi sono numerosissimi esempi di propagazione ondulatoria in fisica, , onde elettromagnetiche in mezzi materiali, onde elastiche, onde di gravità nei liquidi e molti altri. In ciascuno di questi casi si ha una dipendenza caratteristica della frequenza dalla lunghezza d'onda $\nu(\lambda)$. Considerando la propagazione di pacchetti d'onde Gaussiani, nel modo sopra esposto, si definiscono in ogni caso la velocità di fase $v_F = \nu(\lambda)\lambda$ e la velocità di gruppo, che risulta in generale definita dalla relazione:

$$v_G = -\lambda^2 \frac{d\nu(\lambda)}{d\lambda} \ .$$

Nel caso di de Broglie quest'equazione riproduce appunto il risultato da noi trovato.

I mezzi in cui la frequenza è inversamente proporzionale alla lunghezza d'onda sono detti *non dispersivi*, per essi le due velocità coincidono.

Può essere interessante notare che, adottando la forma relativistica dell'onda piana, si ha $\nu(\lambda) = \sqrt{\frac{m^2c^4}{h^2} + \frac{c^2}{\lambda^2}}$ e quindi $v_F = \lambda\sqrt{\frac{m^2c^4}{h^2} + \frac{c^2}{\lambda^2}}$ e $v_G = \frac{\frac{c^2}{\lambda}}{\sqrt{\frac{m^2c^4}{h^2}+\frac{c^2}{\lambda^2}}}$.

L'interpretazione collettiva delle onde di de Broglie

La descrizione delle singole particelle tramite pacchetti d'onde costituisce la formulazione rigorosa della teoria di Schrödinger, esiste però un'interpretazione alternativa della funzione d'onda di uso assai più semplice che è particolarmente utile per descrivere le proprietà medie, come il flusso nel caso libero.

Consideriamo l'onda piana (3.35): $\psi = e^{\frac{i}{\hbar}\left(px - \frac{p^2}{2m}t\right)}$ e calcoliamo la densità di corrente J corrispondente troviamo:

$$J = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*\right) = -\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\frac{ip}{\hbar}\psi - \psi\frac{-ip}{\hbar}\psi^*\right) = \frac{p}{m}\ , \qquad (3.47)$$

mentre $\rho = \psi^*\psi = 1$.

D'altra parte, data una distribuzione di particelle classiche con densità ρ in movimento con velocità v si ha una densità di corrente $J = \rho v$.

Questo suggerisce di superare il problema della normalizzazione della probabilità (3.39) associando la funzione d'onda (3.35), non a una singola particella, come si è fatto finora, ma a un flusso stazionario di particelle indipendenti distribuite uniformemente con densità 1 e in moto con velocità v.

Ovviamente in questo modo abbiamo rinunciato a priori a parlare della localizzazione della particelle, ma otteniamo in modo più semplice le informazioni sulla velocità di gruppo e sul flusso. Nel prossimo capitolo sarà così possibile interpretare in modo semplice e chiaro gli effetti di una barriera di potenziale sul flusso delle particelle.

Esercizi e problemi

1. Una molecola ionica è schematizzata come due punti materiali di massa eguale $m = 10^{-26}\,kg$ posti a distanza $d = 10^{-9}\,m$; usando la regola di Bohr di quantizzazione del momento angolare descrivete i valori possibili dell'energia molecolare e, assumendo transizioni fra il livello $n+1$ e il livello n, calcolate le frequenze dei fotoni emessi.

   Soluzione: $E_{n+1} - E_n = \frac{\hbar^2}{2I}(2n+1) = \frac{\hbar^2}{md^2}(2n+1) \simeq 10^{-24}(2n+1)\ Joule$. Usando la regola di Sommerfeld l'energia del rotatore vale $E_n = \hbar^2 n(n+1)/2I$ e nelle formule precedenti $2n+1$ va sostituito con $2n+2$.

2. Un satellite artificiale di massa $m = 1\,kg$ ruota intorno alla terra su un'orbita circolare di raggio praticamente eguale a quello terrestre, cioè circa 6600 km; se le orbite del satellite sono quantizzate con la regola di Bohr, di quanto cambia il raggio passando da un'orbita alla successiva (da n a $n+1$)?

Soluzione: Indicando con g l'accelerazione di gravità alla superficie terrestre, il raggio dell'orbita n-ma è dato da $r_n = (n^2\hbar^2/m^2R^2g)$, per $r_n = R$ il suo incremento è $\delta r_n \simeq 2\hbar/m\sqrt{Rg} \simeq 2.5\ 10^{-38}\ m$.

3. Un elettrone ($m = 9\ 10^{-31}\ kg$) è accelerato attraverso una differenza di potenziale di $\Delta V = 10^8\ V$, quanto vale la sua lunghezza d'onda di de Broglie?

   Soluzione: L'energia acquisita è molto più grande di mc^2, l'elettrone è dunque ultrarelativistico, il suo impulso vale $p \simeq E/c$. Quindi $\lambda \simeq hc/e\Delta V \simeq 1.9\ 10^{-15}\ m$. La formula esatta è $\lambda = hc/\sqrt{(e\Delta V + mc^2)^2 - m^2c^4}$.

4. Un elettrone ($m = 9\ 10^{-31}\ kg$) rimbalza fra due pareti riflettenti poste a distanza $d = 10^{-9}\ m$, assumendo che, come nel caso di un'onda elettromagnetica riflessa fra due specchi (cavità unidimensionale), la distanza d sia pari a n mezze lunghezze d'onda di de Broglie, determinare i valori possibili dell'energia dell'elettrone al variare di n.

   Soluzione: $E_n = \hbar^2\pi^2n^2/2md^2 \simeq n^2\ 0.52\ 10^{-19}\ Joule$.

5. Un elettrone di energia cinetica di 1 eV si muove verso l'alto soggetto alla sua forza peso. Ci si chiede se può salire a un'altezza di 1 km e, nel caso che ciò sia possibile, di quanto cambia la sua lunghezza d'onda di De Broglie.

   Soluzione: L'altezza massima raggiungibile dall'elettrone in un campo gravitazionale costante sarebbe $h = T/mg \simeq 1.610^{10}\ m$. Dopo un chilometro di salita l'energia cinetica è cambiata di $\delta T/T \simeq 6\ 10^{-8}$ e quindi $\delta\lambda/\lambda \simeq 310^{-8}$ dato che la lunghezza d'onda iniziale vale $\lambda = \frac{h}{\sqrt{2mT}} \simeq 10^{-9}\ m$ si ha una variazione $\delta\lambda \simeq 3\ 10^{-17}\ m$.

6. Una molecola triatomica di Ozono (O^3) è costituita da tre atomi di massa $m = 2.66\ 10^{-26}\ kg$ posti ai vertici di un triangolo equilatero di lato $l = 10^{-10}\ m$. La molecola può ruotare su se stessa intorno a un asse P passante per il baricentro e perpendicolare al piano del triangolo, oppure intorno a un altro asse L, sempre passante per il baricentro, ma perpendicolare al primo. Usando la regola di Bohr confrontare i possibili valori dell'energia di rotazione nel caso in cui la molecola sia vincolata a ruotare intorno all'uno o all'altro asse.

   Soluzione: I momenti d'inerzia sono: $I_P = m\ l^2 = 2.66\ 10^{-46}\ kg\, m^2$ e $I_L = ml^2/2 = 1.33\ 10^{-46}\ kg\, m^2$ Le energie di rotazione sono allora: $E_{L,n} = 2E_{P,n} = \hbar^2 n^2/2I_L \simeq n^2\ 3.7\ 10^{-23}\ Joule$.

7. Un cristallo di sale da cucina è irradiato da un fascio di raggi X (fotoni) la cui lunghezza d'onda è pari a $2.5\ 10^{-10}\ m$, il primo picco di diffrazione ($d \sin\theta = \lambda$) è osservato a un angolo di 26.3 gradi; qual'è la distanza interatomica nel sale?

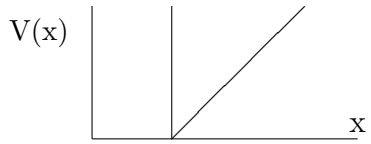
   Soluzione: $d = \lambda / \sin\theta \simeq 5.6\ 10^{-10}\ m$.

8. Nel decadimento β un nucleo il cui raggio è dell'ordine di $R = 10^{-14}\ m$ emette un elettrone ($m = 9\ 10^{-31}\ kg$) la cui energia cinetica è dell'ordine di $1MeV = 10^6 eV$. Confrontare questo valore dell'energia con l'ordine di grandezza dell'energia cinetica attribuibile, in base al principio d'indeterminazione, a un elettrone inizialmente localizzato nel nucleo (cioè con impulso $p \sim \frac{\hbar}{R}$).

   Soluzione: $E_c \simeq \frac{\hbar^2}{2mR^2} \simeq 5.58\ 10^{-10}\ Joule \simeq 3.4\ 10^9\ eV >> 1MeV$.

9. Un elettrone è soggetto a un campo elettrico costante $E = 1000\ V/m$ diretto secondo l'asse x uscente da una superficie piana perpendicolare allo stesso asse. La superficie agisce sull'elettrone come un piano riflettente su

cui l'energia potenziale dell'elettrone $V(x)$ va all'infinito. L'andamento di $V(x)$ è rappresentato in figura.



Tenendo in conto che la massa dell'elettrone vale circa $m = 9\ 10^{-31}\ kg$ e la carica $1,6\ 10^{-19}\ Coulomb$, valutare, usando il Principio d'Indeterminazione di Heisenberg, l'ordine di grandezza dell'energia minima dell'elettrone.

Soluzione: L'energia totale è data da $\epsilon = p^2/2m + V(x) = p^2/2m + eEx$, con il vincolo $x > 0$. Classicamente l'energia minima si avrebbe per la particella ferma ($p = 0$) nel minimo di $V(x)$. Tenendo invece conto del principio di indeterminazione di Heisenberg, $\delta p\ \delta x \sim \hbar$, una stima dell'energia dello stato fondamentale è data dal minimo della funzione di δx $E(\delta x) \equiv \hbar^2/(2m\delta x^2) + eE\delta x$ ($\delta x > 0$). Si ottiene

$$\epsilon_{\min} \sim \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2 e^2 E^2}{m}\right)^{1/3} \sim 0.6 \cdot 10^{-4} eV\ .$$

10. Una molecola di NaCl può essere rozzamente schematizzata come un sistema di due particelle di carica opposta e di massa: $M_{Na} = 4\ 10^{-26}\ kg$ e $M_{Cl} = 8\ 10^{-26}\ kg$, tenute alla distanza fissa $d = 10^{-9}\ m$ dalle forze interatomiche. Applicando la condizione di quantizzazione di Bohr al momento angolare del sistema rispetto al suo baricentro calcolare lo spettro delle frequenze emesse dalla molecola in transizioni da un livello (n) a quello immediatamente successivo $(n-1)$ al variare di n.

Soluzione: I livelli energetici rotazionali sono $E_n = \frac{n^2\hbar^2}{2I}$, con $I = \frac{M_{Na}M_{Cl}}{M_{Na}+M_{Cl}}d^2$. I fotoni emessi per le transizioni indicate hanno energia $h\nu_{n\to n-1} = E_n - E_{n-1} = (2n-1)\hbar^2/2I$, da cui $\nu_{n\to n-1} \simeq (2n-1)3 \cdot 10^8$ Hz.

11. Un atomo di massa $M = 10^{-26}\ kg$ è attratto verso un punto fisso, da una forza elastica di costante $k = 1\ Newton/m$; l'atomo si muove su un'orbita circolare posta in un piano perpendicolare all'asse z. Applicando la condizione di quantizzazione di Bohr al momento angolare dell'atomo rispetto al punto fisso determinare i livelli energetici del sistema.

Soluzione: Sia ω la velocità angolare di rotazione e r il raggio. Uguagliando la forza centripeta a quella di richiamo elastica si ricava la nota relazione classica $\omega = \sqrt{k/M}$. L'energia totale è $E = 1/2M\omega^2 r^2 + 1/2kr^2 = M\omega^2 r^2 = L\omega$, dove abbiamo messo in evidenza il momento angolare $L = M\omega r^2$. Essendo quest'ultimo quantizzato, $L = n\hbar$, ricaviamo infine $E_n = n\hbar\omega = n \cdot 10^{-21}\text{J} \simeq n \cdot 0.62 \cdot 10^{-2} eV$.

12. Calcolare il numero dei fotoni emessi per secondo da una lampadina che emette una potenza di $10 Watt$ alla lunghezza d'onda di $0,510^{-6}\ m$.

Soluzione: L'energia di un singolo fotone è $E = h\nu$ con $h \simeq 6.62\ 10^{-34} J \cdot s$ e $\nu = c/\lambda = 6\ 10^{14}$ Hertz, dunque $E = 4\ 10^{-19}\ J$, per cui in un secondo vengono emessi $2.5\ 10^{19}$ fotoni.

13. Una particella di massa pari a $m = 10^{-28}\ kg$ che si muove lungo l'asse x è soggetta a un'energia potenziale data da $V(x) = v\sqrt{|x|}$ con $v = 10^{-15}\ Joule/m^{\frac{1}{2}}$ valutare, usando il Principio d'Indeterminazione di Heisenberg, l'ordine di grandezza dell'energia minima dell'elettrone.

Soluzione: L'energia totale della particella è

$$E = \frac{p^2}{2m} + v\sqrt{|x|}\ .$$

Nel caso classico il minimo dell'energia totale si avrebbe ovviamente quando la particella fosse posta ferma ($p = 0$) in $x = 0$, per cui $E = 0$, ma tale configurazione non è quantisticamente permessa in quanto viola il principio di indeterminazione: se la particella è posta in un intorno di grandezza δx dell'origine, essa possiede un impulso dell'ordine di $\delta p = \hbar/\delta x$. Bisogna allora minimizzare la quantità

$$E = \frac{\hbar^2}{2m\delta x^2} + v\sqrt{\delta x}$$

rispetto a δx, trovando infine

$$E_{min} \simeq \left(\frac{\hbar^2 v^4}{m}\right)^{1/5} \left(2^{1/5} + 2^{-9/5}\right) \simeq 0.22 \text{ eV}.$$

È molto importante notare come il risultato, a parte un fattore numerico, potesse essere previsto in base a semplici considerazioni dimensionali: l'unica quantità con le

dimensioni di una energia che può essere costruita a partire da m, v ed $\hbar$ (che sono le uniche grandezze fisiche in gioco) è proprio $(\hbar^2 v^4/m)^{1/5}$, come lo studente è invitato a verificare. Nell'analogo problema classico manca la grandezza $\hbar$, e con v ed m da soli non è possibile formare alcuna grandezza con le dimensioni di una energia, per cui nel caso classico manca una energia caratteristica del problema, che invece è presente nel caso quantistico.

14. Un fascio di elettroni la cui energia cinetica iniziale è 10 eV viene separato in due fasci paralleli orizzontali posti ad altezze diverse nel campo della gravità terrestre. Se la differenza di quota è $d = 10\ cm$ e se i fasci si ricombinano dopo un percorso orizzontale di lunghezza L, quanto deve valere L perché i due fasci si ricombinino in opposizione di fase?

    Si assuma che il fascio superiore conservi l'energia cinetica iniziale, che si conservi l'energia totale e non si tenga conto, nel calcolo della differenza di fase, dei tratti di percorso iniziali e finali che portano alla separazione dei fasci alle diverse quote e alla loro ricombinazione.

    Soluzione: L'onda di De Broglie che descrive il fascio di elettroni iniziale è $\propto \exp(ipx/\hbar - iEt/\hbar)$ dove $p = \sqrt{2mE_k}$ è l'impulso corrispondente alla energia cinetica E_k e $E = E_k + mgh$ è l'energia totale. Il fascio è separato in un fascio che viaggia alla stessa quota, quindi è descritto dalla stessa onda, e in uno che viaggia parallelo 10 cm più in basso, per cui è descritto dall'onda $\propto \exp(ip'x/\hbar - iEt/\hbar)$ dove $p' = \sqrt{2mE'_k} = \sqrt{2m(E_k + mgd)}$ (ovviamente l'energia totale E è invariata). I valori di L per cui i due fasci si ricombinano in opposizione di fase sono dati da $(p' - p)L/\hbar = (2n + 1)\pi$ con n intero. Il valore più piccolo di L è allora $L = \pi\hbar/(p' - p)$. Notiamo che $mgd \simeq 10^{-30}\ J \ll 10\ eV \simeq 1.6\ 10^{-18}\ J$, per cui $p' - p \simeq \sqrt{2mE_k}(mgd/2E_k)$ e quindi $L \simeq 2\pi\hbar E_k/(mgd\sqrt{2mE_k}) \simeq 590$ metri.

15. Un elettrone si muove sul piano $x-y$ in presenza di un campo d'induzione magnetica parallelo all'asse z usando le regole di quantizzazione di Bohr valutare i possibili valori dell'energia dell'elettrone.

    Soluzione: L'elettrone è soggetto alla forza $\frac{e\vec{v}}{c} \wedge \vec{B}$ dove $\vec{v}$ è la sua velocità. Classicamente ne derivano, per una particella che si muove nel piano ortogonale a $\vec{B}$, moti circolari uniformi con velocità angolare $\omega = eB/(mc)$, energia $E = 1/2\ m\omega^2 r^2$ e rag-

gio r qualsiasi. La regola di Bohr limita i possibili valori del raggio quantizzando il momento angolare $m\omega\ r^2 = n\hbar$, da cui si arriva a $E = 1/2\ n\hbar\omega = n\hbar eB/(2mc)$. Livelli energetici simili si ritroveranno anche nella soluzione del problema quantistico completo di un elettrone in campo magnetico (livelli di Landau).

16. Esiste una particella, detta positrone, identica all'elettrone, ma con carica opposta. Questa particella si lega elettrostaticamente all'elettrone formando una specie di atomo di idrogeno in cui il positrone sostituisce il nucleo. Il sistema risultante legato elettrone-prositrone è detto positronio; calcolatene i possibili livelli energetici secondo la regola di Bohr.

Soluzione: Il livelli energetici si calcolano esattamente nello stesso modo che nel caso del sistema protone-elettrone, con l'unica accortezza di usare la massa ridotta $\mu = m^2/(m+m) = m/2$ al posto della massa dell'elettrone. I livelli sono quindi

$$E_n = -\frac{me^4}{4\hbar^2 n^2}\ .$$

17. Una particella di massa $M = 10^{-29}\ kg$ si muove in due dimensioni soggetta al potenziale centrale:

$$V = \sigma r\ ,$$

con σ pari a $10^5\ Newton$.

Considerando solo orbite circolari valutare le energie ammesse dalla regola di Bohr.

Soluzione: La forza centripeta del moto circolare è $m\omega^2 r = \sigma$. La condizione di quantizzazione del momento angolare impone $m\omega r^2 = n\hbar$. Combinando le due equazioni si ottengono, per l'energia totale $E = 1/2\ m\omega^2 r^2 + \sigma r$, i seguenti valori permessi

$$E_n = \frac{3}{2}\left(\frac{\hbar^2\sigma^2}{m}\right)^{1/3} n^{2/3} \simeq 2n^{2/3}\ \text{GeV}\ .$$

Notare come la costante $(\hbar^2\sigma^2/m)^{1/3}$, che fissa la scala di energia, non avrebbe potuto essere altrimenti, essendo l'unica combinazione dei parametri fisici in gioco $\hbar$, σ ed m con le dimensioni di una energia. Il potenziale posto nel problema è dello stesso tipo e della stessa intensità di quello confinante che si pensa agire fra i costituenti elementari dei nucleoni (protone, neutrone, etc..): i quark. Anche la massa della particella nel problema è simile per ordine di grandezza a quella dei quark leggeri costituenti i

nucleoni. Non a caso il risultato porta ad energie comparabili, anche se solo in ordine di grandezza, con le masse a riposo dei nucleoni (~ 1 GeV).

18. Tenendo conto del fatto che la densità di probabilità nell'impulso per uno stato con funzione d'onda $\psi(x)$ è data da: $|\int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{1}{\sqrt{h}} e^{i\frac{px}{\hbar}} \psi(x)|^2 \equiv |\tilde{\psi}(p)|^2$, calcolare tale densità di probabilità per lo stato con funzione d'onda: $\psi(x) = e^{\frac{-a|x|}{2}} \sqrt{\frac{a}{2}}$,dove a è reale e positivo. Verificare la validità del principio d'indeterminazione in questo caso.

Soluzione: $\tilde{\psi}(p) = \frac{(\hbar a)^{\frac{3}{2}}}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{p^2 + \frac{\hbar bar^2 a^2}{4}}$ si ha quindi $\Delta_x^2 = \frac{a}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 e^{-a|x|} = \frac{2}{a^2}$ $\Delta_p^2 = \frac{(\hbar a)^3}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dp \frac{p^2}{(p^2 + \frac{a^2\hbar^2}{4})^2} = \frac{a^2\hbar^2}{4}$ e $\Delta_x^2 \Delta_p^2 = \frac{\hbar^2}{2} > \frac{\hbar^2}{2}$

3.0.8 La barriera di potenziale

La situazione di maggiore interesse fisico è quella in cui le particelle non sono libere, ma soggette a forze corrispondenti all'energia potenziale $V(x)$. In queste condizioni possiamo ricorrere all'equazione di Schrödinger nella forma (3.37). Data la linearità dell'equazione, per uno studio generale della stessa è sufficiente limitarsi a considerare soluzioni periodiche nel tempo del tipo:

$$\psi(x,t) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi_E(x) \ . \tag{3.48}$$

Infatti la soluzione generale dipendente dal tempo può essere decomposta in componenti periodiche del tipo (3.48) tramite uno sviluppo di Fourier e quindi la conoscenza della soluzione può essere riportata a quella delle $\psi_E(x)$, oltre che dei coefficienti dello sviluppo.

Le $\psi_E(x)$ sono calcolabili risolvendo l'equazione ottenuta sostituendo la forma (3.48) nella (3.37), cioè:

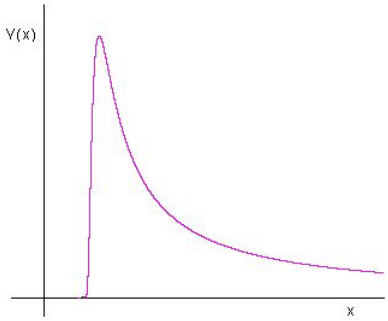
$$i\hbar \ \partial_t \left(e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi_E(x) \right) = E e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \psi_E(x) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_E + V(x) \psi_E \right] \ , \tag{3.49}$$

dunque:

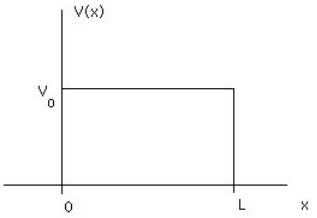
$$E\psi_E(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \partial_x^2 \psi_E(x) + V(x) \psi_E(x) \ , \tag{3.50}$$

che viene chiamata *equazione di Schrödinger indipendente dal tempo* o *stazionaria*.

Il primo caso che consideriamo è quello della *barriera di potenziale* in cui $V(x)$ è nullo per $x < 0$ e per $x > L$ ed è positivo sul segmento $[0, L]$ come nella firgura qui accanto. Un flusso di particelle classiche incidenti sulla barriera nel senso delle x crescenti viene assoggettato, superata l'origine, a forze che tendono a rallentarlo. Se l'energia cinetica iniziale, che corrisponde ovviamente a E in (3.50), supera l'altezza della barriera V_0 le particelle rallentate raggiungono il punto in cui V è massimo, entrano quindi in un campo di forze acceleranti fino a raggiungere il punto $x = L$ proseguendo poi con moto libero. Il flusso è stato completamente trasmesso e la barriera ha unicamente aumentato il tempo di attraversamento del segmento $[0, L]$. Se invece l'energia cinetica è inferiore a V_0 le particelle si fermano e invertono il loro moto prima di raggiungere il punto di V massimo e il flusso viene completamente riflesso.



Del tutto diverso è il risultato secondo la meccanica quantistica. Per analizzare le differenze sul piano qualitativo conviene scegliere una barriera di forma tale da facilitare la soluzione della (3.50). Questo è il caso di potenziale costante a tratti, cioè in particolare la barriera quadrata qui accanto.



La scelta del potenziale costante a tratti è giustificata dal fatto che, con V costante la (3.50) si scrive nella forma:

$$\partial_x^2 \psi_E(x) + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi_E(x) = 0, \tag{3.51}$$

e ammette la soluzione generale:

$$\psi_E(x) = a_+ e^{i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}x} + a_- e^{-i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}x} \ , \tag{3.52}$$

se $E > V$ e :

$$\psi_E(x) = a_+ e^{\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}x} + a_- e^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}x} \ , \tag{3.53}$$

nel caso opposto. Il problema è stabilire come si raccorda la soluzione relativa a un tratto con potenziale costante a quella dei tratti contigui. Per risolverlo dob-

biamo metterci in condizione di controllare le equazioni differenziali in presenza di discontinuità dei coefficienti, questo richiede un breve *interludio matematico*

Interludio matematico, le equazioni differenziali con coefficienti discontinui

Le equazioni differenziali con coefficienti discontinui possono essere trattate smussando le discontinuità, risolvendo le equazioni in termini di funzioni più volte derivabili e riproducendo le soluzioni in presenza di discontinuità con un processo di limite. Introduciamo per questo la funzione $\varphi_\epsilon(x)$ definita da:

$$\varphi_\epsilon(x) = 0 \quad se \quad |x| > \epsilon$$

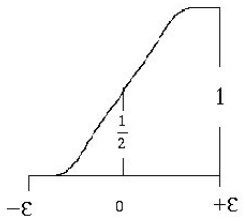
$$\varphi_\epsilon(x) = \frac{\epsilon^2 + x^2}{\sqrt{\pi}\left(\epsilon^2 - x^2\right)^2} e^{-\frac{x^2}{(\epsilon^2 - x^2)^2}} \quad se \quad |x| < \epsilon$$

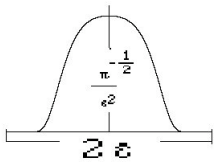
.

Questa funzione è continua con tutte le sue derivate ed è facile vedere che $\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_\epsilon(x)dx = 1$. In base a queste proprietà si conclude che se $f(x)$ è localmente integrabile, cioè ammette al più singolarità isolate in cui la funzione può divergere con grado inferiore a 1, cioè come $\frac{1}{|x|^{1-\delta}}$ per $\delta > 0$, l'integrale:

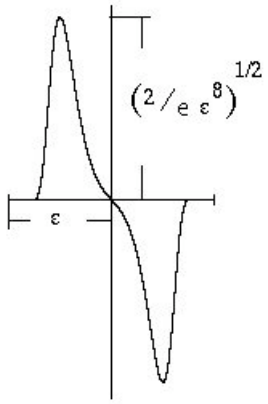
$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_\epsilon(x - y) f(y) dy \equiv f_\epsilon(x) \ ,$$

definisce una funzione infinite volte derivabile in x e le derivate di f_ϵ tendono a quelle di f nel limite $\epsilon \to 0$ e in tutti i punti in cui quest'ultime sono definite.





Chiameremo f_ϵ *funzione regolarizzata*. Se, per esempio, consideriamo il caso in cui f è la funzione a gradino nell'origine, cioè $f(x) = 0$ per $x < 0$ e $f(x) = 1$ per $x > 0$ si hanno per $f_\epsilon(x)$, $\partial_x f_\epsilon(x)$ e $\partial_x^2 f_\epsilon(x)$ gli andamenti mostrati nell'ordine qui accanto. In particolare si osservi che essendo $f_\epsilon(x) = \int_0^\infty \varphi_\epsilon(x-y)dy = \int_{-\infty}^x \varphi_\epsilon(z)dz$ si ha $\partial_x f_\epsilon(x) = \varphi_\epsilon(x)$.



Considerando le tre figure si vede bene come $f_\epsilon(x)$ interpola con continuità fra il valore 0 della funzione a sinistra e 1 a destra restando inferiore a 1 per qualunque valore di ϵ. Il fatto importante da osservare è che invece la seconda figura che mostra $\partial_x f_\epsilon(x)$ presenta un massimo di altezza proporzionale a $\frac{1}{\epsilon^2}$, che quindi diverge all'annullarsi di ϵ. La terza figura mostra che la derivata seconda $\partial_x^2 f_\epsilon(x)$ presenta un'oscillazione di ampiezza proporzionale a $\frac{1}{\epsilon^4}$ intorno al punto di discontinuità. Dato che, per ϵ piccolo, la funzione regolarizzata nelle vicinanze dalla discontinuità dipende dai valori della funzione originale nelle vicinanze della stessa, è chiaro che gli andamenti qualitativi mostrati nelle figure si presentano per qualunque funzione nelle vicinanze di discontinuità di prima specie, cioè gradini. Andamenti più singolari si hanno per discontinuità del potenziale peggiori.

Consideriamo dunque la (3.51) nelle vicinanze di un punto di discontinuità di prima specie (gradino) di V e immaginiamo di regolarizzare entrambi gli addendi, se la funzione d'onda non presenta discontinuità peggiori della prima specie, il secondo termine dell'equazione presenta solo gradini e, regolarizzato, resta limitato in modo indipendente da ϵ. Invece, se la funzione d'onda ψ_E o la sua derivata prima $\partial_x \psi_E$ presentassero discontinuità di prima specie o peggiori, regolarizzando il primo termine, si otterrebbero contributi proporzionali a $\frac{1}{\epsilon^4}$ o, rispettivamente, a $\frac{1}{\epsilon^2}$, o ancore più singolari, e la (3.51) sarebbe necessariamente violata.

Quindi abbiamo mostrato che in presenza di una discontinuità di prima specie di V la ψ_E deve restare continua con la sua derivata prima.

Per trattare in modo semplificato il caso di barriere di lunghezza L molto piccola rispetto alle lunghezze d'onda di interesse è utile introdurre barriere infinitamente sottili; questo può essere fatto scegliendo un'energia potenziale

che, regolarizzata, sia eguale a: $V_\epsilon(x) = \mathcal{V}\ \varphi_\epsilon(x)$ cioè tale che

$$V(x) = \mathcal{V}\ \lim_{\epsilon \to 0}\ \varphi_\epsilon(x) \equiv \mathcal{V}\delta(x)\ . \tag{3.54}$$

La (3.54) definisce la funzione delta di Dirac come limite della φ_ϵ.

Lo stesso argomento presentato sopra mostra che, in presenza di una barriera proporzionale alla delta di Dirac la derivata della funzione d'onda presenta una discontinuità di prima specie di ampiezza $\frac{2m}{\hbar^2}\mathcal{V}\psi_E(0)$.

Si noti che una barriera proporzionale alla delta di Dirac può egualmente essere rappresentata come una barriera quadrata di altezza $\frac{\mathcal{V}}{L}$ e di larghezza L al limite in cui $L \to 0$ in modo che $\int_{-\infty}^{\infty} dx V(x) = \mathcal{V}$.

La barriera quadrata

Consideriamo l'equazione di Schrödinger stazionaria (3.50) con un potenziale corrispondente alla barriera quadrata sopra descritta, cioè $V(x) = V$ per $0 < x < L$ e nullo altrove. Come nel caso classico vanno distinti due regimi:

a) il caso in cui $E > V$ e in cui classicamente l'intero flusso è trasmesso

b) quello in cui $E < V$ e in cui classicamente l'intero flusso è riflesso.

Iniziamo dal caso (a): vanno distinte tre regioni:

1) quella con $x < 0$ in cui la soluzione generale è:

$$\psi_E(x) = a_+ e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + a_- e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}\ . \tag{3.55}$$

A questa funzione d'onda corrispondono due flussi opposti, uno verso destra pari a $|a_+|^2\sqrt{2E/m}$ e uno opposto pari a $-|a_-|^2\sqrt{2E/m}$. Volendo studiare un processo analogo a quello descritto al livello classico sceglieremo in modo arbitrario $a_+ = 1$, dunque

$$\psi_E(x) = e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + a\ e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}\ , \tag{3.56}$$

fissando il flusso incidente a $\sqrt{2E/m}$; a rende conto dell'eventuale flusso riflesso.

2) la regione $0 < x < L$ in cui la soluzione generale è

$$\psi_E(x) = b\ e^{i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}x} + c\ e^{-i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}x}\ , \tag{3.57}$$

3) la regione in cui $x > L$ e in cui la soluzione generale è nuovamente data dalla (3.55). Tuttavia noi escludiamo in questa regione un flusso verso sinistra,

cioè proveniente da $x = \infty$ assumendo che le uniche particelle presenti siano quelle che hanno superato la barriera e che pertanto procedono verso destra. Poniamo dunque in questa regione

$$\psi_E(x) = de^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} \ . \tag{3.58}$$

Si hanno due punti di discontinuità del potenziale: $x = 0$ e $x = L$, e quindi si hanno le seguenti condizioni di continuità delle funzioni d'onda e derivate prime:

$$\begin{aligned}
&1 + a = b + c \\
&1 - a = \sqrt{\frac{E-V}{E}}\,(b - c) \\
&be^{i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L} + ce^{-i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L} = de^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L} \\
&\sqrt{\frac{E-V}{E}}\left[be^{i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L} - ce^{-i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L}\right] = de^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L} \ .
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Abbiamo un sistema lineare di 4 equazioni in 4 incognite che, per una scelta generica dei parametri dovrebbe identificare unicamente la soluzione. Il nostro interesse principale è la determinazione di $|a|^2$. Questa quantità rende conto della frazione del flusso incidente che viene riflesso per un effetto quantistico. Pertanto chiamiamo $R = |a|^2$ coefficiente di riflessione della barriera.

Dividendo membro a membro prime due equazione e le seconde due si ottiene dopo facili passaggi:

$$\begin{aligned}
&\frac{\frac{b}{c} - e^{-2i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L}}{\frac{b}{c} + e^{-2i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L}} = \sqrt{\frac{E-V}{E}} \\
&\frac{1-a}{1+a} = \sqrt{\frac{E-V}{E}}\,\frac{\frac{b}{c} - 1}{\frac{b}{c} + 1}
\end{aligned} \tag{3.60}$$

risolvendo la prima equazione in $\frac{b}{c}$ e la seconda in a si ha:

$$\begin{aligned}
\frac{b}{c} &= e^{-2i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L}\,\frac{\sqrt{\frac{E-V}{E}} + 1}{\sqrt{\frac{E-V}{E}} - 1} \\
a &= \frac{1 + \sqrt{\frac{E-V}{E}} + \frac{b}{c}\left(1 - \sqrt{\frac{E-V}{E}}\right)}{1 - \sqrt{\frac{E-V}{E}} + \frac{b}{c}\left(1 + \sqrt{\frac{E-V}{E}}\right)}
\end{aligned} \tag{3.61}$$

e quindi, sostituendo:

$$a = \frac{\left(1-\frac{E-V}{E}\right)\left(e^{i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L} - e^{-i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L}\right)}{\left(1+\sqrt{\frac{E-V}{E}}\right)\left(\left(1-\sqrt{\frac{E-V}{E}}\right)^2 e^{i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L} - \left(1+\sqrt{\frac{E-V}{E}}\right)^2 e^{-i\frac{\sqrt{2m(E-V)}}{\hbar}L}\right)} ,$$

cioè

$$a = \frac{V}{E}\frac{\sin\left(\frac{\sqrt{(2m(E-V)}}{\hbar}L\right)}{\frac{2E-V}{E}\sin\left(\frac{\sqrt{(2m(E-V)}}{\hbar}L\right) + 2i\sqrt{\frac{E-V}{E}}\cos\left(\frac{\sqrt{(2m(E-V)}}{\hbar}L\right)} , \qquad (3.62)$$

da cui si vede chiaramente che $0 \leq |a| < 1$ e che per V positivo a si annulla solo quando $\frac{\sqrt{(2m(E-V)}}{\hbar}L = n\pi$.

Questo è chiaramente un effetto interferenziale e il fenomeno della riflessione ha carattere ondulatorio. Chi conoscesse la fisica dei cavi coassiali potrebbe constatare l'analogia del fenomeno con la riflessione dei segnali alla giunzione di cavi con impedenza diversa senza adattamento della medesima. I tecnici degli impianti televisivi conoscono bene questa causa di malfunzionamento.

Più interessante e importante per le applicazioni alla fisica microscopica è il comportamento quantistico della barriera nel caso (b) in cui $E < V$; in questo caso le funzioni d'onda nelle regioni 1 e 3 non cambiano, mentre per $0 < x < L$ si ha la soluzione generale:

$$\psi_E(x) = be^{\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}x} + ce^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}x} , \qquad (3.63)$$

e quindi le condizioni di continuità diventano:

$$\begin{aligned}
&1 + a = b + c \\
&1 - a = -i\sqrt{\frac{V-E}{E}}\,(b-c) \\
&be^{\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} + ce^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} = de^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L} \\
&-i\sqrt{\frac{V-E}{E}}\left[be^{\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} - ce^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}\right] = de^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L} .
\end{aligned} \qquad (3.64)$$

Nuovamente, dividendo membro a membro, si ha:

$$\frac{\frac{b}{c} - e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}}{\frac{b}{c} + e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}} = i\sqrt{\frac{E}{V-E}}$$

$$\frac{1-a}{1+a} = i\sqrt{\frac{V-E}{E}}\ \frac{1-\frac{b}{c}}{1+\frac{b}{c}} \tag{3.65}$$

e risolvendo:

$$\begin{aligned} a &= -\frac{1-\frac{b}{c}+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}\left(1+\frac{b}{c}\right)}{1-\frac{b}{c}-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}\left(1+\frac{b}{c}\right)} \\ \frac{b}{c} &= e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\ . \end{aligned} \tag{3.66}$$

Sostituendo $\frac{b}{c}$ si ha l'espressione per a e quindi il coefficiente di riflessione $R \equiv |a|^2$. Il fatto del tutto nuovo è che R non è eguale a 1 dato che, come si vede nelle (3.66), $\frac{b}{c}$ è un numero complesso. Quindi una frazione del flusso incidente, pari a $1-R \equiv T$ è trasmessa dalla barriera a dispetto del fatto che le particelle non hanno energia sufficiente per raggiungerne il colmo. Questo è *l'effetto tunnel* che ha un ruolo molto importante in molti settori della fisica moderna, dalla radioattività all'elettronica.

Per evitare formule eccessivamente complesse e difficili da leggere noi ci limitiamo a considerare due casi limite, che peraltro sono quelli di maggior interesse fenomenologico. Consideriamo in particolare:

a) Il caso in cui $e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} \ll 1$, con $\frac{E}{V-E}$ generico, cioè in cui $L \gg \frac{\hbar}{\sqrt{2m(V-E)}}$, dunque la barriera è spessa.

b) Quello in cui invece la barriera è sottile, che può essere ottenuto andando al limite $L \to 0$ con $VL \equiv \mathcal{V}$ costante.

La barriera spessa. Nel caso (a) $|\frac{b}{c}|$ è piccolo, e in prima approssimazione sarebbe trascurabile, tuttavia si vede subito da (3.66) che se $\frac{b}{c} = 0$, $|a| = 1$ e quindi non c'è effetto tunnel. Dobbiamo dunque calcolare lo sviluppo di Taylor dell'espressione per a in (3.66) fino al primo ordine in $\frac{b}{c}$ scrivendo:

$$a = -\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\frac{1-\frac{b}{c}\frac{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}}{1-\frac{b}{c}\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}}$$

$$
\begin{aligned}
&\sim -\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\left[1-\frac{b}{c}\left(\frac{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}-\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\right)\right] \\
&= -\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\left[1+4i\frac{b}{c}\frac{\sqrt{E(V-E)}}{V}\right] \\
&= -\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\left[1+4i\frac{\sqrt{E(V-E)}}{V}e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}\frac{1+i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}{1-i\sqrt{\frac{E}{V-E}}}\right] \quad .(3.67)
\end{aligned}
$$

Nell'ultimo passaggio abbiamo sostituito $\frac{b}{c}$ con la corrispondente espressione in (3.66).

Limitandoci a considerare il coefficiente di riflessione e trascurando termini in $e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}$ otteniamo:

$$
|a|^2 = R = 1 - 16\frac{E(V-E)}{V^2}e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} \ . \tag{3.68}
$$

Quindi il coefficiente di trasmissione, che misura quale probabilità ha una particella, che urta la barriera, di superarla, è dato da:

$$
T \equiv 1 - R = 16\frac{E(V-E)}{V^2}e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} \ . \tag{3.69}
$$

Si noti che l'annullarsi del risultato a $V = E$ è illusorio, dato che se $V = E$ si è fuori dai limiti dell'approssimazione scelta.

La tipica applicazione alla fisica nucleare, cioè al decadimento α, coinvolge masse di circa $0.7\ 10^{-26}\ Kg$, particelle di energia $E \simeq 6MeV \simeq\ 10^{-12} Joule$ e spessori di barriera dell'ordine di $4\ 10^{-14}\ m$, $V - E$ dell'ordine di $20\ MeV = 2\ 10^7\ eV \simeq 3.2\ 10^{-12} Joule$.

In queste condizioni si ha $2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L \simeq 60$; quindi $T \sim e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} \sim 10^{-36}$. Tenendo conto che i componenti nucleari si muovono a velocità dell'ordine di $10^7\ m/sec$ e che il raggio R_0 dei nuclei pesanti che sono instabili per emissione α è circa $10^{-14} m$, si ha una frequenza d'urto dell'ordine di $\nu_u \sim 10^{21} Hertz$. Questo indica che, in queste condizioni e in media, il tempo impiegato da una particella α per uscire dal nucleo è dell'ordine di $\frac{\nu_u}{T}$ cioè circa $10^{15} s$ pari a circa 100 milioni di anni. Peraltro, se lo spessore della barriera è solo quattro volte più piccolo il tempo si riduce a 100 anni; questo mostra una grande sensibilità del risultato rispetto ai parametri e giustifica il fatto che non si è tenuto conto del coefficiente numerico davanti all'esponenziale nella (3.69).

Per un confronto serio con le vite medie reali è necessaria un'analisi accurata dei parametri, ma bisogna tener presente in primo luogo che la barriera non è quadrata, dato che la repulsione fra nucleo e particella α è determinata da forze Coulombiane, cioè $V(x) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x}$. In queste condizioni l'ordine di grandezza della trasparenza della barriera data in (3.69), cioè :

$$T \simeq e^{-2\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L} \tag{3.70}$$

va sostituita con:

$$T \simeq e^{-2\int_{R_0}^{R_1} dx \frac{\sqrt{2m(V(x)-E)}}{\hbar}} \equiv e^{-G} \tag{3.71}$$

dove R_0 è il già menzionato raggio nucleare e $R_1 = \frac{2Ze^2}{4\pi E\epsilon_0}$ risolve l'equazione $V(R_1) = E$.

Si ha allora:

$$\begin{aligned} G &= 2\frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\int_{R_0}^{R_1} dx\sqrt{\frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x} - E} = 2\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\int_{R_0}^{R_1} dx\sqrt{\frac{R_1}{x} - 1} \\ &= 2\frac{\sqrt{2mE}R_1}{\hbar}\int_{\frac{R_0}{R_1}}^{1} dy\sqrt{\frac{1}{y} - 1} = 2\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0\hbar}\int_{\sqrt{\frac{R_0}{R_1}}}^{1} dz\sqrt{1-z^2} \\ &= \sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{Ze^2}{\pi\epsilon_0\hbar}\left[\cos^{-1}\sqrt{\frac{R_0}{R_1}} - \sqrt{\frac{R_0}{R_1} - (\frac{R_0}{R_1})^2}\right] \ . \end{aligned} \tag{3.72}$$

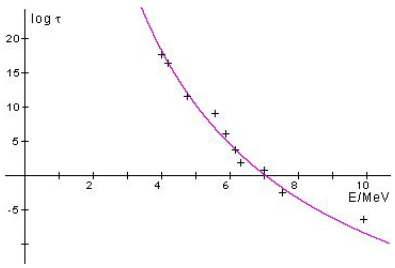
Nell'approssimazione in cui $\frac{R_0}{R_1} << 1$ si ha:

$$G = \frac{Ze^2}{\epsilon_0\hbar v} \ , \tag{3.73}$$

dove v è la velocità della particella alfa. Quindi, assumendo come sopra, la frequenza d'urto $\nu_u \sim 10^{21} Hertz$, si ha per la vita media:

$$\tau = 10^{-21} e^{\frac{Ze^2}{\epsilon_0\hbar v}} \ . \tag{3.74}$$

Utilizzando invece l'ultima espressione in (3.72) con $R_0 = 1.1\ 10^{-14} m$ si ha per $\log\tau$ la curva data in figura. Le croci indicano i valori sperimentali per le vite medie degli isotopi: ^{232}Th , ^{238}U , ^{230}Th , ^{241}Am , ^{230}U , ^{210}Rn, ^{220}Rn , ^{222}Ac , ^{215}Po , ^{218}Th. Tenendo conto che la figura copre 23 ordini di grandezza, l'accordo è sicuramente notevole.



Infatti esso fece molta impressione quando Gamow lo presentò nel 1928.

La barriera sottile Nel caso (b) possiamo trascurare E rispetto a V per cui $\sqrt{\frac{E}{V-E}}$ può essere sostituito con $\sqrt{\frac{E}{V}}$ e $e^{-\frac{\sqrt{2m(V-E)}}{\hbar}L}$ con $1-\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}L$. Ricordiamo peraltro che $\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}L$ è infinitesimo e $e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L}$ può essere posto eguale a 1. In queste condizioni la (3.64) diventa

$$\begin{aligned} 1+a &= b+c \\ 1-a &= -i\sqrt{\frac{V}{E}}(b-c) \\ b+c+&\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}L(b-c) = d \\ b-c+&\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}L(b+c) = i\sqrt{\frac{E}{V}}d, \end{aligned} \tag{3.75}$$

eliminando $b \pm c$ si ottiene:

$$\begin{aligned} 1+a+&i\sqrt{\frac{E}{V}}\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}L(1-a) = d \simeq 1+a \\ &i\sqrt{\frac{E}{V}}(1-a)+\frac{\sqrt{2mV}}{\hbar}L(1+a) = i\sqrt{\frac{E}{V}}d\ , \end{aligned} \tag{3.76}$$

nella forma più semplice. Tenendo ulteriormente conto della nostra approssimazione, il sistema può essere riscritto:

$$\begin{aligned} 1+a &= d \\ 1-a &= \left(i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{VL}{\hbar}+1\right)d \equiv \left(1+i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)d\ . \end{aligned} \tag{3.77}$$

Finalmente , eliminando a, si ha

$$d = \frac{1}{1+i\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}}\ , \tag{3.78}$$

e quindi:

$$T = \frac{1}{1+\frac{m}{2E}\frac{\mathcal{V}^2}{\hbar^2}}\ , \tag{3.79}$$

e:

$$R = \frac{1}{1+\frac{2E}{m}\frac{\hbar^2}{\mathcal{V}^2}}\ . \tag{3.80}$$

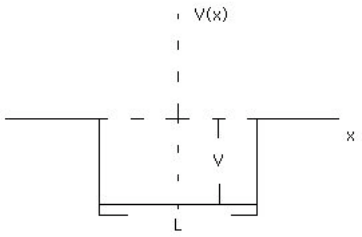
Si osservi che il sistema (3.77) conferma quanto annunciato circa le condizioni di raccordo delle funzioni d'onda in presenza di un'energia potenziale pari a $\mathcal{V}\delta(x)$ e cioè che la funzione d'onda è continua $(1 + a = d)$ mentre la discontinuità della derivata prima $(i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}(1-a-d))$ è eguale a $\frac{2m}{\hbar^2}\mathcal{V}$ il valore d della funzione d'onda.

3.0.9 Le buche di potenziale e i livelli energetici

Avendo esplorato in qualche dettaglio l'effetto tunnel, passiamo ora a discutere le soluzioni dell'equazione di Schrödinger nel caso di potenziali leganti. Il risultato atteso è che emerga dai calcoli il fenomeno della quantizzazione dell'energia nel senso dell'individuazione di *livelli energetici* discreti. Nuovamente iniziamo la nostra analisi da una buca quadrata cioè assumiamo:

$$V(x) = -V \quad per \quad |x| < \frac{L}{2} \quad , \quad V(x) = 0 \quad per \quad |x| < \frac{L}{2} \ . \tag{3.81}$$

Si noti che abbiamo scelto l'origine delle coordinate in modo da evidenziare una *simmetria* del nostro sistema, e precisamente l'invarianza dell'equazione di Schrödinger per la riflessione $x \to -x$.



Le proprietà di simmetria del potenziale permettono di trovare nuove soluzioni dell'equazione di Schrödinger partendo da soluzioni note o di semplificare la ricerca delle soluzioni stabilendone alcune caratteristiche a priori. Nel caso in esame si può osservare che se $\psi_E(x)$ è soluzione lo è anche $\psi_E(-x)$ e quindi, per la linearità dell'equazione, sono soluzioni $\psi_E(x) \pm \psi_E(-x)$. Naturalmente una delle due soluzioni può essere nulla, ma è chiaro che possiamo dividere tutte le soluzioni in due insiemi; quello delle funzioni pari e quello delle dispari per riflessione dell'asse x.

Questo è l'esempio più semplice dell'applicazione di un *principio di simmetria* che asserisce che in presenza una proprietà di invarianza dell'equazione di Schrödinger sotto una data trasformazione delle coordinate si possono sempre scegliere le soluzioni in modo tale che sotto l'azione della stessa trasformazione restino invariate a meno di un fattore di fase costante. Nel caso specifico la fase si riduce a ± 1.

Nel seguito ci limiteremo a considerare soluzioni legate, cioè con energia negativa, corrispondenti a stati classici legati. Osserviamo preliminarmente che, nel caso di stati legati, l'interpretazione collettiva della funzione d'onda viene meno; si tratta infatti di stati che coinvolgono una singola particella. Conseguentemente non sono ammissibili funzioni d'onda che non si annullano all'infinito abbastanza rapidamente da permettere la normalizzazione della probabilità (3.39).

Iniziamo lo studio dalle soluzioni pari; evidentemente possiamo limitarci a studiare la soluzione sull'asse x positivo. La scelta di soluzioni pari equivale alla condizione che la derivata della funzione si annulli dell'origine. Infatti se la funzione è pari, la derivata è dispari e, se continua, si annulla nell'origine. L'intero asse positivo va diviso in due regioni in cui il potenziale è costante: a) Quella in cui $x < \frac{L}{2}$ in cui la soluzione generale è:

$$\psi_E(x) = a_+ e^{i\frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}x} + a_- e^{-i\frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}x} \ ,$$

per cui la condizione di parità equivale a $a_+ = a_-$ e quindi

$$\psi_E(x) = a \cos \frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}x \ . \tag{3.82}$$

b) La regione in cui $x > \frac{L}{2}$ e la soluzione generale è:

$$\psi_E(x) = b_+ e^{\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x} + b_- e^{-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x} \ .$$

La condizione che la soluzione non diverga all'infinito impone $b_+ = 0$ per cui si può scrivere:

$$\psi_E(x) = b e^{-\frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}x} \ . \tag{3.83}$$

Si noti che abbiamo escluso implicitamente che $E < -V$. La ragione di questa esclusione è che in questo caso (3.82) diventerebbe

$$\psi_E(x) = a \cosh \frac{\sqrt{2m|E+V|}}{\hbar}x$$

che per $x > 0$ ha derivata logaritmica $(\frac{\partial_x \psi_E(x)}{\psi_E(x)})$ positiva e che non può accordarsi con continuità con la (3.83) la cui derivata logaritmica è negativa.

Dunque la meccanica quantistica è d'accordo con quella classica circa l'impossibilità di stati con energia inferiore al minimo dell'energia potenziale.

Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger su tutto l'asse si ottengono risolvendo il sistema:

$$\begin{aligned} a\cos\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar} &= be^{-\frac{\sqrt{2m|E|}L}{2\hbar}} \\ \frac{\sqrt{2m(E+V)}}{\hbar}a\sin\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar} &= \frac{\sqrt{2m|E|}}{\hbar}be^{-\frac{\sqrt{2m|E|}L}{2\hbar}} \end{aligned} \quad , \tag{3.84}$$

dividendo membro a membro si ha la condizione di continuità della derivata logaritmica:

$$\tan\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar} = \sqrt{\frac{|E|}{E+V}} \; . \tag{3.85}$$

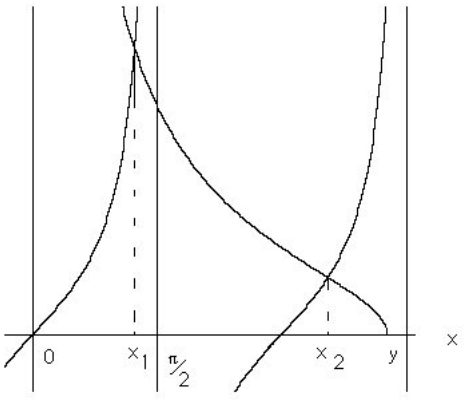
Per discutere questa equazione introduciamo la variabile:

$$x \equiv \frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar} \; , \tag{3.86}$$

e il parametro:

$$y \equiv \frac{\sqrt{2mV}L}{2\hbar} \; , \tag{3.87}$$

e sovrapponiamo i grafici di $\tan x$ e $\sqrt{\frac{y^2-x^2}{x^2}}$. In figura si mostra la sovrapposizione per $y = 20$. Da un punto di vista qualitativo la figura evidenzia la quantizzazione dei livelli energetici, corrispondenti ai punti d'intersezione, confermando nel caso della buca lo spettro di livelli discreti previsto per gli atomi dalle teoria di Bohr. Si vede chiaramente che il grafico presenta due intersezioni, una per $x = x_1 < \frac{\pi}{2}$ e un'altra per $\pi < x = x_2 < \frac{3\pi}{2}$.



Al crescere di y aumenta il numero delle soluzioni che è in ogni caso ($y > 0$) maggiore o eguale a 1. Dunque la buca di potenziale quadrata in una dimensione ammette almeno uno stato legato invariante per riflessione intorno all'origine (pari).

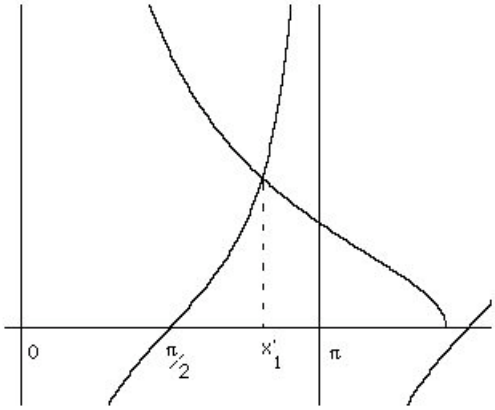
Estendendo la teoria a tre dimensioni si vede che l'esistenza di almeno uno stato legato è una proprietà specifica del caso unidimensionale.

Passando a considerare gli stati che cambiano segno riflettendo le coordinate, dobbiamo scegliere una funzione d'onda nulla nell'origine, questo significa sostituire coseno con seno nella (3.82).

È facile ricostruire con questa variante il calcolo che ha portato alla condizione di quantizzazione dei livelli (3.85). Usando la stessa definizione delle variabili la (3.85) diventa:

$$\cot \frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{2\hbar} = -\sqrt{\frac{|E|}{E+V}} \ . \tag{3.88}$$

Corrispondentemente si ha la figura qui a lato che mostra l'esistenza di intersezioni solo per $y > \frac{\pi}{2}$, cioè per la profondità $V > \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$. Questa è anche la condizione per l'esistenza di stati legati in tre dimensioni. Un limite interessante da applicare alla nostra analisi della buca è quello in cui la profondità diverge, *la buca infinita*. Evidentemente approfondendo la buca conviene anche cambiare la scala delle energie in modo da evitare di parlare di energie tendenti a meno infinito. Pertanto spostiamo l'origine delle energie in modo tale che il fondo della buca corrisponda a energia potenziale nulla e la zona esterna a V; questo equivale a sostituire nelle formule precedenti $E+V$ con E e $|E|$ con $V-E$; osservando che interessano solo energie positive. Eseguendo il limite $V \to \infty$ sulla condizioni di quantizzazione (3.85) e (3.88) si ha rispettivamente: $\tan \frac{\sqrt{2mE}L}{2\hbar} = +\infty$ e: $-\cot \frac{\sqrt{2mE}L}{2\hbar} = +\infty$ cioè: $\frac{\sqrt{2mE}L}{2\hbar} = (2n-1)\frac{\pi}{2}$ e: $\frac{\sqrt{2mE}L}{2\hbar} = n\pi$ con $n = 1, 2, \ldots$.



In ultima analisi combinando stati pari e dispari si ha

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}L = n\pi \qquad : \quad n = 1, 2, \ldots \ ,$$

e quindi si hanno i livelli energetici:

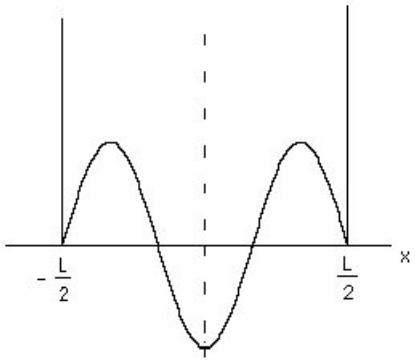
$$E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2} \ . \tag{3.89}$$

corrispondentemente, sul segmento $|x| < \frac{L}{2}$ le funzioni d'onda pari sono: $\sqrt{\frac{2}{L}} \cos \frac{(2n-1)\pi x}{L}$ e quelle dispari: $\sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{2n\pi x}{L}$ dove i coefficienti sono stati fissati in modo da soddisfare la condizione (3.39). Per $|x| > \frac{L}{2}$, tutte le soluzioni hanno limite nullo. Le funzioni d'onda possono dunque scritte in un'unica formula:

$$\psi_{E_n}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi(x + \frac{L}{2})}{L} \quad per \quad |x| < \frac{L}{2}$$
$$\psi_{E_n}(x) = 0 \quad per \quad |x| > \frac{L}{2} \; . \tag{3.90}$$

Come si vede, si mantiene la continuità della funzione a $|x| = \frac{L}{2}$ dove la funzione sinusoidale si annulla, ma si perde la continuità della derivata prima come nel caso della delta di Dirac.

La generica ψ_{E_n} si comporta dunque come nella figura a lato da cui appare in modo chiaro l'analogia con la componente elettrica di un'onda elettromagnetica riflessa da uno specchio; solo che nel caso presente si hanno riflessioni su due specchi affacciati nelle posizioni $x = \pm\frac{L}{2}$.



La buca di altezza infinita va dunque identificata coll'intervallo compreso fra due pareti riflettenti.

Le condizioni che l'ampiezza si annulli sullo specchio si combinano imponendo che la distanza fra i due specchi sia pari a un numero intero di mezze lunghezze d'onda; questo implica la quantizzazione delle lunghezze d'onda e quindi delle energie.

Tornando all'analogia con le onde elettromagnetiche, la situazione presente corrisponde a un *cavità risonante* ovviamente unidimensionale. Nella cavità il campo oscilla unicamente con le frequenze corrispondenti alle lunghezze d'onda permesse. In sintesi si hanno le lunghezze d'onda: $\lambda_n = \frac{2L}{n}$ per $n = 1, 2, \ldots$; nel caso delle cavità si hanno le frequenze $\nu_n = \frac{c}{\lambda_n} = \frac{nc}{2L}$ che evidentemente sono multipli della frequenza *fondamentale* della cavità stessa.

Seppure limitandoci per il momento al caso unidimensionale, constatiamo che il campo elettrico all'interno di una cavità è equivalente dinamicamente a un sistema di oscillatori armonici. Ricordiamo che gli oscillatori armonici sono

i sistemi meccanici a frequenza definita, quelli del campo elettrico sono caratterizzati in una dimensione dalle frequenze $\nu_n = \frac{nc}{2L}$. Nel prossimo capitolo, riferendoci al modello meccanico dell'oscillatore armonico: una particella massiva soggetta a una forza di richiamo elastica da un punto fisso, mostreremo che la sua energia è quantizzata secondo la formula $E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right)$, confermando con ciò il valore del quanto di energia pari a $\hbar\omega = h\nu$ assunto da Einstein. L'osservazione circa la decomposizione in oscillatori del campo elettrico in una cavità permette l'estensione della regola di quantizzazione al campo elettrico e quindi giustifica il concetto di fotone che porta appunto un'energia eguale a $h\nu$.

Al livello quantistico gli stati di un campo elettromagnetico oscillante in una cavità sono visti come quelli di un sistema di fotoni, in numero corrispondente ai quanti di energia presenti, che rimbalzano elasticamente fra le pareti.

Il nostro risultato sulla buca a pareti riflettenti è facilmente generalizzato al caso tridimensionale; ipotizzando una scatola cubica a pareti riflettenti, le condizioni di annullamento della funzione d'onda sulle pareti equivalgono, all'interno della scatola, a:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z} = \sqrt{\frac{8}{L^3}} \sin\frac{n_x\pi(x+\frac{L}{2})}{L} \sin\frac{n_y\pi(y+\frac{L}{2})}{L} \sin\frac{n_z\pi(z+\frac{L}{2})}{L} \ . \tag{3.91}$$

L'energia corrispondente coincide con l'energia cinetica all'interno della scatola ed è ottenibile scrivendo l'equazione di Schrödinger tridimensionale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2\right)\psi_{n_x,n_y,n_z} = E_{n_x,n_y,n_z}\psi_{n_x,n_y,n_z} \ , \tag{3.92}$$

da cui si ottiene facilmente:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left[n_x^2 + n_y^2 + n_z^2\right] \ . \tag{3.93}$$

Questo risultato sarà utile per studiare le proprietà di un gas di particelle non interagenti (gas perfetto) contenute in una scatola a pareti riflettenti.

Come annunciato sopra con lo stesso metodo si studiano i modi di oscillazione del campo elettrico nel caso di una cavità tridimensionale le cui frequenze caratteristiche sono date da: $\nu_{n_x,n_y,n_z} = \frac{c}{2L}\sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$.

3.0.10 L'oscillatore armonico

L'oscillatore armonico unidimensionale si identifica col sistema meccanico formato da una particella di massa m legata a un punto fisso (l'origine) da una

molla ideale di costante elastica k ed elongazione a riposo nulla. Esso corrisponde all'energia potenziale $V(x) = \frac{k}{2}x^2$. Classicamente si ha l'equazione del moto:

$$m\ddot{x} + kx = 0$$

la cui soluzione generale è data da

$$x(t) = X\cos(\omega t + \phi)$$

dove si è posto $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}} = 2\pi\nu$ e ν è la frequenza propria dell'oscillatore.

Al livello quantistico si tratta di risolvere l'equazione di Schrödinger stazionaria:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_E(x) + \frac{k}{2}x^2\psi_E(x) = E\psi_E(x)\ . \tag{3.94}$$

Per risolvere questa equazione si può ricorrere alla seguente identità:

$$\begin{aligned}
&\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right) f(x) \\
&\equiv \frac{k}{2}x^2 f(x) + \frac{\hbar\omega}{2}x\partial_x f(x) - \frac{\hbar\omega}{2}\partial_x(xf(x)) - \frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 f(x) \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 f(x) + \frac{k}{2}x^2 f(x) - \frac{\hbar\omega}{2}f(x) \\
&\equiv \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{k}{2}x^2 - \frac{\hbar\omega}{2}\right) f(x)\ ,
\end{aligned} \tag{3.95}$$

vera per qualunque f due volte derivabile.

È importante osservare la natura *operatoriale* della notazione usata in quest'equazione in cui si sono introdotti simboli specifici ($\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)$ oppure $\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{k}{2}x^2 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)$) per indicare operazioni combinate di derivazione e moltiplicazione per la variabile. Queste sono normalmente chiamate *operatori* intendendo con ciò leggi di corrispondenza fra funzioni appartenenti a una certa classe (per esempio n volte derivabili) e altre funzioni, in generale, di un'altra classe. In questo modo è possibile riscrivere l'identità (3.95) prescindendo dalla funzione f come una relazione esplicitamente operatoriale:

$$\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + \frac{k}{2}x^2 - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\ , \tag{3.96}$$

o introdurre altre equazioni della stessa natura, come ad esempio:

$$\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right) - \left(\sqrt{\frac{k}{2}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right) = \hbar\omega \tag{3.97}$$

Per ridurre la dimensione delle formule è opportuno introdurre due simboli:

$$X_\pm \equiv \left(\sqrt{\frac{k}{2}}x \pm \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right) \ , \tag{3.98}$$

Questo ci permette di riscrivere l'equazione (3.97) nella forma semplice:

$$X_+X_- - X_-X_+ = \hbar\omega \ , \tag{3.99}$$

e l'equazione di Schrödinger come:

$$\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\psi_E(x) = X_-X_+\psi_E(x) = \left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\psi_E(x) \ . \tag{3.100}$$

Questo modo di scrivere l'equazione di Schrödinger permette da arrivare in modo rapido a una serie di risultati:

a) La funzione d'onda soluzione dell'equazione:

$$X_+\psi_0(x) = \sqrt{\frac{k}{2}}x\psi_0(x) + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\psi_0(x) = 0 \ , \tag{3.101}$$

è soluzione della (3.100) con $E = \frac{\hbar\omega}{2}$. Per calcolarla basta riscrivere (3.101) come:

$$\frac{\partial_x\psi_0(x)}{\psi_0(x)} = -\frac{\sqrt{km}}{\hbar}x \ ,$$

da cui integrando ambo i membri:

$$\log\psi_0(x) = c - \frac{\sqrt{km}}{2\hbar}x^2 \ ,$$

e quindi

$$\psi_0(x) = e^{c - \frac{\sqrt{km}}{2\hbar}x^2} \ ,$$

dove la costante c può essere fissata usando la condizione di normalizzazione (3.39) ottenendo:

$$\psi_0(x) = \left(\frac{km}{\pi^2\hbar^2}\right)^{\frac{1}{8}} e^{-\frac{\sqrt{km}}{2\hbar}x^2} \ . \tag{3.102}$$

È opportuno richiamare la necessità di restringere l'analisi a funzioni, cosiddette *a quadrato sommabile* che possano essere normalizzate secondo la (3.39). Questa condizione è sottintesa nelle pagine che seguono.

b) Quella trovata è la soluzione con energia più bassa, detta *stato fondamentale* del sistema, come si può vedere osservando che, per qualunque $\psi_E(x)$ normalizzata, si ha, integrando per parti la derivata in X_-:

$$\begin{aligned}
&\int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_E(x)^* \left(\sqrt{\frac{k}{2}}x - \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\left(\sqrt{\frac{k}{2}}x + \frac{\hbar}{\sqrt{2m}}\partial_x\right)\psi_E(x) \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} dx |X_+\psi_E(x)|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \psi_E(x)^* \left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\right)\psi_E(x) \\
&= E - \frac{\hbar\omega}{2} \geq 0 \ .
\end{aligned} \tag{3.103}$$

L'ultima diseguaglianza segue dal fatto che l'integrale del modulo al quadrato di una funzione non può essere negativo. Inoltre va osservato che, se vale l'eguaglianza in (3.103), cioè $E = \frac{\hbar\omega}{2}$, necessariamente $X_+\psi_E = 0$ e quindi ψ_E è proporzionale a ψ_0.

c) Se ψ_E soddisfa la (3.100) con $E > \frac{\hbar\omega}{2}$, $X_\pm\psi_E$ soddisfa le stessa equazione con E sostituito da $E \mp \hbar\omega$.

Infatti la (3.100) da subito:

$$X_+X_-X_+\psi_E = \left(E - \frac{\hbar\omega}{2}\right)X_+\psi_E(x) \ ,$$

e, usando la (3.99):

$$\begin{aligned}
&X_+X_-X_+\psi_E = (X_+X_- - X_-X_+)\, X_+\psi_E + X_-X_+X_+\psi_E \\
&= \hbar\omega X_+\psi_E + X_-X_+X_+\psi_E \ .
\end{aligned} \tag{3.104}$$

Confrontando i secondi membri delle due equazioni si ottiene:

$$X_- X_+ X_+ \psi_E = \left(E - \frac{3\hbar\omega}{2} \right) X_+ \psi_E(x) \tag{3.105}$$

che dimostra l'asserto nel caso di X_+. Analogamente si ha:

$$\begin{aligned} X_- X_+ X_- \psi_E &= \hbar\omega X_- \psi_E + X_- X_- X_+ \psi_E \\ &= \left(E - \frac{\hbar\omega}{2} \right) X_- \psi_E(x) + \hbar\omega X_- \psi_E \ , \end{aligned} \tag{3.106}$$

che prova l'asserto nel caso X_-.

d) Finalmente combinando le osservazioni (a-c) possiamo mostrare che i soli livelli energetici ammissibili sono:

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \ . \tag{3.107}$$

Poniamo infatti che la (3.100) ammetta il livello $E = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \delta$ con $0 < \delta < \hbar\omega$ e la funzione d'onda ψ_E; applicando ripetutamente X_+ fino a $m+1$ volte a ψ_E si otterrebbero $m+1$ funzioni d'onda non nulle. Se infatti $X_+^k \psi_E$ con $k \leq m+1$ fosse la prima funzione nulla, per la (b) $X_+^{k-1} \psi_E$ sarebbe soluzione non banale (non nulla) della (3.100) con $E = \frac{\hbar\omega}{2}$, mentre dalla (c) sappiamo che è soluzione con $E = \left(m - k + 1 + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \delta$. Questo ragionamento mostra in particolare che $X_+^{m+1} \psi_E$ dovrebbe essere soluzione della (3.100) con $E = \left(-\frac{1}{2} \right) \hbar\omega + \delta$ in contrasto con l'asserto di (b) che esclude livelli inferiori a $\frac{\hbar\omega}{2}$.

Quindi abbiamo mostrato che lo spettro dell'oscillatore armonico è costituito dai livelli $E_n = \left(m + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega$ e le corrispondenti funzioni d'onda sono proporzionali a $X_-^n \psi_E$ se possiamo dimostrare che:

e) Una funzione d'onda corrispondente al livello n-mo è necessariamente proporzionale a $X_-^n \psi_0$:

$$\psi_n \sim X_-^n \psi_0 \ . \tag{3.108}$$

Noi ci limitiamo a mostrare l'asserto nel caso $n = 1$; la prova nel caso generale segue generalizzando banalmente lo stesso argomento.

In base all'unicità di ψ_0, se $\psi_1 = X_- \psi_0$ e ψ_1' corrispondono al primo livello (E_1) deve essere $X_+ \psi_1 = a\psi_0 = \hbar\omega\psi_0$ e $X_+ \psi_1' = a'\psi_0$ con a' non nullo per la (b). Ma allora $X_+ \left(a'\psi_1 - \hbar\omega\psi_1' \right) = 0$. Questo lascia aperte due possibilità: o la funzione d'onda $\left(a'\psi_1 - \hbar\omega\psi_1' \right)$ è nulla e quindi le due funzioni sono proporzionali, o in alternativa $\left(a'\psi_1 - \hbar\omega\psi_1' \right)$ è soluzione della (3.100) corrispondente allo

stato fondamentale $n = 0$; questo però è escluso perché qualunque combinazione lineare di ψ_1 e ψ_1' non può che corrispondere a $E_1 = \frac{3\hbar\omega}{2}$ dato che l'equazione è (3.100) lineare. Resta dunque solo la possibilità che le due funzioni siano tra loro proporzionali.

Così si conclude l'analisi basata sul metodo algebrico dell'oscillatore armonico unidimensionale che ha dimostrato la formula di quantizzazione dei livelli energetici (3.107) e la struttura della funzione d'onda corrispondente (3.108). Il risultato ammette numerose generalizzazioni di grande interesse fisico. Innanzi tutto l'estensione all'oscillatore tridimensionale isotropo che corrisponde all'equazione di Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\partial_x^2 + \partial_y^2 + \partial_z^2\right)\psi_E(x,y,z) + \frac{k}{2}\left(x^2+y^2+z^2\right)\psi_E(x,y,z) = E\,\psi_E(x,y,z)\ . \tag{3.109}$$

Questa equazione può essere vista come la somma termine a termine delle equazioni di tre oscillatori unidimensionali rispettivamente nelle variabili x, y e z. Possiamo di conseguenza concludere che per l'oscillatore tridimensionale isotropo la formula di quantizzazione dei liveli è:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \hbar\omega\left(n_x + n_y + n_z + \frac{3}{2}\right)\ , \tag{3.110}$$

e che la corrispondente funzione d'onda è:

$$\psi_{n_x,n_y,n_z}(x,y,z) = \psi_{n_x}(x)\psi_{n_y}(y)\psi_{n_z}(z)\ . \tag{3.111}$$

Questo è il tipico esempio di equazione di Schrödinger *separabile*.

Una generalizzazione ulteriore riguarda le piccole oscillazioni di un sistema a N gradi di liberta intorno a una posizione di equilibrio stabile la cui energia può sempre essere decomposta nella somma delle energie di N oscillatori unidimensionali con frequenze proprie diverse ($\nu_i\ ,\ i = 1, ..., N$). In questo caso la formula di quantizzazione è:

$$E_{(n_1,\ldots n_N)} = \sum_{i=1}^{N}\hbar\omega_i\left(n_i + \frac{1}{2}\right)\ , \tag{3.112}$$

e la corrispondente funzione d'onda può essere scritta come il prodotto delle funzioni associate ai singoli oscillatori.

Infine dobbiamo ricordare il campo elettrico all'interno di una cavità risonante a cui si è fatto riferimento nel capitolo precedente.

3.0.11 Il caso di un potenziale periodico: lo spettro a bande.

Nei capitoli precedenti abbiamo incontrato e discusso situazioni in cui lo spettro delle energie è continuo, come per le particelle libere di muoversi verso l'infinito con o senza barriere di potenziale, e altri casi in cui lo spettro è costituito da livelli discreti, come in quello delle particelle legate. Mostriamo ora l'esistenza di altre situazioni di rilevante interesse fisico, quelle in cui le particelle sono soggette a potenziali periodici come gli elettroni in un solido, in cui si hanno spettri a bande. Un esempio trattabile in modo relativamente semplice è quello in cui l'energia potenziale si può scrivere come la somma di infinite barriere sottili schematizzate tramite delta di Dirac poste a distanza a l'una dall'altra:

$$V(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathcal{V}\delta(x - na) \ . \tag{3.113}$$

Evidentemente si ha:

$$V(x + a) = V(x) \ , \tag{3.114}$$

cioè un potenziale periodico. Limitando la nostra analisi al caso di barriere, poniamo $\mathcal{V} > 0$.

La (3.114) esprime una proprietà di simmetria dell'equazione di Schrödinger del tutto analoga a quella per riflessione dell'asse x discussa nel caso della buca quadrata e vera anche per l'oscilatore armonico.

Con un argomento analogo a quello illustrato nel caso della buca si mostra che, anche nel caso di potenziali periodici, cioè invarianti per traslazioni di a, ci si può sempre ridurre a funzioni d'onda che sotto l'azione di una trasformazione di simmetria del potenziale cambiano al più per una costante moltiplicativa. Nel caso delle riflessioni la costante al quadrato deve essere eguale a 1 e quindi non può essere che ± 1, perché una doppia riflessione riporta alla configurazione iniziale. Invece nel caso delle traslazioni $x \to x+a$ si ha in generale la possibilità di combinare fra loro le funzioni d'onda in modo tale che valga la relazione:

$$\psi_E(x + a) = \alpha\, \psi_E(x) \ .$$

Evidentemente anche queste funzioni, come le onde piane, non sono normalizzabili, quindi dobbiamo ricorrere all'interpretazione fisica collettiva come nel caso della barriera. In questa interpretazione si accettano densità di probabilità che non diminuiscono all'infinito, ma non possono in alcun modo essere prese in considerazione funzioni d'onda per cui la densità cresce indefinitamente.

Dunque sono d'interesse fisico solo le funzioni d'onda per cui $\alpha = e^{i\phi}$ cioè

$$\psi_E(x+a) = e^{i\phi}\,\psi_E(x)\ . \tag{3.115}$$

Questa è un'altra applicazione del principio di simmetria enunciato nel capitolo 4.6. Oltre che dalla (3.115) $\psi_E(x)$ è vincolata in ogni intervallo $(n-1)a < x < na$ dall'equazione di Schrödinger libera:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi_E(x) = E\,\psi_E(x)$$

la cui soluzione generale è:

$$\psi_E(x) = a_n e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + b_n e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}\ .$$

Infine si hanno in corrispondenza di ogni delta le condizioni di continuità della funzione d'onda e discontinuità della derivata prima pari a $\frac{2m\mathcal{V}}{\hbar^2}\psi_E(na)$. Data la pseudo-periodicità espressa dalla (3.115) è chiaro che, se queste condizioni sono verificate nell'origine, lo sono anche in tutti i punti per cui $x = na$.

Nell'origine si hanno le condizioni sulla funzione e sulla derivata:

$$\begin{aligned} &a_0 + b_0 = a_1 + b_1 \\ &i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\,(a_1 - b_1 - a_0 + b_0) = \frac{2m\mathcal{V}}{\hbar^2}\,(a_0 + b_0)\ . \end{aligned} \tag{3.116}$$

mentre la (3.115), nell'intervallo $-a < x < 0$, equivale a:

$$a_1 e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}(x+a)} + b_1 e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}(x+a)} = e^{i\phi}\left(a_0 e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x} + b_0 e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}x}\right)\ . \tag{3.117}$$

Da quest'ultima equazione abbiamo :

$$a_1 = e^{i\left(\phi - \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}a_0 \quad , \quad b_1 = e^{i\left(\phi + \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}b_0\ .$$

Sostituendo nelle (3.116) troviamo un sistema di due equazioni lineari omogenee in due incognite:

$$\begin{aligned} &\left(1 - e^{i\left(\phi - \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)} - i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)a_0 - \left(1 - e^{i\left(\phi + \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)} + i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)b_0 = 0 \\ &\left(1 - e^{i\left(\phi - \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}\right)a_0 + \left(1 - e^{i\left(\phi + \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}\right)b_0 = 0\ . \end{aligned} \tag{3.118}$$

Perché il sistema ammetta soluzioni non banali ($a_n\,,\,b_n\,\neq\,0$) è necessario e sufficiente che il determinante della matrice dei coefficienti si annulli; questo equivale a un'equazione di secondo grado per $e^{i\phi}$:

$$\begin{aligned}
&\left(1-e^{i\left(\phi-\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}-i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)\left(1-e^{i\left(\phi+\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}\right)\\
&+\left(1-e^{i\left(\phi+\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}+i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)\left(1-e^{i\left(\phi-\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)}\right)\\
&=2e^{2i\phi}-\left(\left(2-i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)e^{i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a}+\left(2+i\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)e^{-i\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a}\right)e^{i\phi}\\
&+2=0\ , \qquad (3.119)
\end{aligned}$$

che può essere riscritta nella forma:

$$\begin{aligned}
&e^{2i\phi}-\left(2\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)+\sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\right)e^{i\phi}+1\\
&\equiv e^{2i\phi}-2Ae^{i\phi}+1=0\ . \qquad (3.120)
\end{aligned}$$

La (3.120) è risolubile con ϕ reale se e solo se $A^2<1$ come è immediato verificare usando la formula risolutiva delle equazioni di secondo grado.

Abbiamo dunque una disuguaglianza, coinvolgente l'energia E e il parametro del potenziale $\mathcal{V}$, che è condizione necessaria e sufficiente per l'esistenza di soluzioni fisicamente accettabili dell'equazione di Schrödinger:

$$\left(\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)+\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\right)^2<1\ , \qquad (3.121)$$

da cui segue:

$$\begin{aligned}
&\cos^2\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)+\frac{m}{2E}\frac{\mathcal{V}^2}{\hbar^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\\
&+2\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)=<1 \qquad (3.122)
\end{aligned}$$

e quindi:

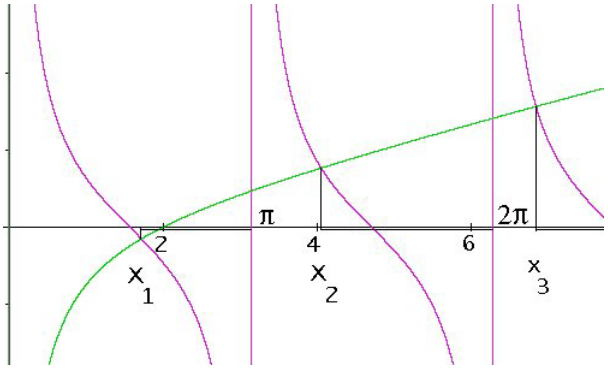
$$1-\cos^2\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)-\frac{m}{2E}\frac{\mathcal{V}^2}{\hbar^2}\sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)$$

$$
\begin{aligned}
&-2\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\\
&=\left(1-\frac{m}{2E}\frac{\mathcal{V}^2}{\hbar^2}\right)\sin^2\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\\
&-2\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\sin\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)\cos\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)<0\ , \qquad (3.123)
\end{aligned}
$$

da cui si ha infine:

$$
\cot\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right)<\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{2E}{m}}\frac{\hbar}{\mathcal{V}}-\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}\right)\ . \qquad (3.124)
$$

La figura qui accanto riporta i diagrammi sovrapposti del primo e secondo membro della (3.124) per una scelta particolare del parametro $\gamma=\frac{\hbar^2}{ma\mathcal{V}}$ e precisamente per $\gamma=\frac{1}{4}$. La variabile è identificata con $x=\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a$. Si mostrano quindi i diagrammi delle due funzioni $f_1=\cot x$ e $f_2=\frac{\gamma x-\frac{1}{\gamma x}}{2}$. I tratti in cui la disuguaglianza



è soddisfatta son quelli compresi tra x_1 e π, tra x_2 e 2π, tra x_3 e 3π eccetera. Infatti in questi tratti la curva crescente verso destra che rappresenta f_2 supera quella rapidamente oscillante che rappresenta f_1. Il risultato mostra dunque che le energie permesse corrispondono a una serie di segmenti $(x_n-n\pi)$, che sono detti *bande*, separati da intervalli vietati, normalmente definiti tramite il termine inglese *gap*.

Come si vedrà nel seguito del corso, gli elettroni presenti in un solido, costretti a occupare stati diversi dal *principio di esclusione di Pauli* possono riempire completamente un certo numero di bande, trovandosi quindi in situazione analoga a particelle legate che non possono ricevere energia in quantità arbitrariamente piccole. Alternativamente gli elettroni possono occupare parzialmente una certa banda, trovandosi in condizioni analoghe a quelle delle particelle libere.

Nel primo caso si dice che il solido è *isolante*, nel secondo è *conduttore*.

Tornando per un momento ad analizzare la matematica del problema osserviamo che nei punti x_n , $n = 1, 2, ..$ il parametro A nella (3.120) vale:

$$\cos x_n + \frac{\sin x_n}{\gamma\ x_n} = \frac{\sin x_n}{2}\left(\gamma\ x_n + \frac{1}{\gamma\ x_n}\right) = (-1)^{n+1}\ , \tag{3.125}$$

da cui si ha: $e^{i\phi}|_{x_n} = (-1)^{n+1}$. Quindi $\phi(x_n) = 0$ per n dispari e $\phi(x_n) = \pm\pi$ per n pari. Invece passando da $x = n\pi$ $A = \cos n\pi = (-1)^n$ e quindi $\phi(n\pi) = 0$ per n pari e $\phi(n\pi) = \pm\pi$ per n dispari.

Per A generico compreso fra ± 1 si hanno due soluzioni: $A \pm i\sqrt{1 - A^2}$ corrispondenti a fasi opposte ($\phi(E) = \pm \arctan \frac{\sqrt{1-A^2}}{A}$) che interpolano fra 0 e $\pm\pi$.

Con la semplice trasformazione della funzione d'onda:

$$\psi_E(x) \equiv e^{i\,\frac{\phi(E)}{a}\,x}\hat{\psi}_E(x) \equiv e^{\pm i\,\frac{p(E)}{\hbar}\,x}\hat{\psi}_E(x)\ , \tag{3.126}$$

è possibile trasformare la (3.115) in una condizione di periodicità:

$$\hat{\psi}_E(x + a) = \hat{\psi}_E(x)\ .$$

Dunque le funzioni d'onda in un potenziale periodico possono essere scritte nella forma (3.126) cioè come onde piane modulate da funzioni periodiche, dette *onde di Bloch*. Va peraltro notato che l'impulso associato alle onde piane: $p(E) = \frac{\hbar}{a}\phi(E)$ varia nell'intervallo $(-\frac{\hbar\pi}{a} \leftrightarrow \frac{\hbar\pi}{a})$, detto *zona di Brillouin*, invece che su tutto l'asse reale come nel caso delle particelle libere; questa può evidentemente essere vista come la ragione matematica della esistenza delle bande.

Un ulteriore commento può riguardare le proprietà di trasporto delle onde di Bloch che sono espresse dalla densità di corrente associata a un'onda in base alla (3.38):

$$\begin{aligned} J = &-\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*\right) = \pm\frac{p(E)}{m}|\hat{\psi}_E(x)|^2 \\ &-\frac{i\hbar}{2m}\left(\hat{\psi}^*_E(x)\partial_x\hat{\psi}_E(x) - \hat{\psi}_E(x)\partial_x\hat{\psi}^*_E(x)\right) \end{aligned} \tag{3.127}$$

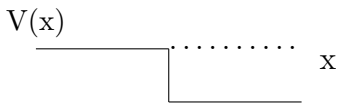
in cui il primo termine mostra un comportamento analogo a quello di un onda piana, mentre il secondo è indotto dalla modulazione del primo dovuta alla $\hat{\psi}$, dato che, in una dimensione, la corrente associata a uno stato stazionario è necessariamente costante. Questa espressione conferma una stretta analogia di comportamento fra le particelle in un potenziale periodico e quelle libere.

Esercizi e problemi

1. La funzione d'onda di una particella libera all'istante $t = 0$ è espressa tramite l'integrale:
$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2Ph}} \int_{-P}^{P} dq e^{\frac{iqx}{\hbar}} \ .$$
Calcolate la densità di probabilità di localizzazione $\rho(x)$ corrispondente. Qual'è la funzione d'onda al generico t (espressa tramite un integrale) se la massa della particelle è m?

Soluzione: $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{\hbar}{\pi P x^2} \sin^2 \frac{Px}{\hbar}$, $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2Ph}} \int_{-P}^{P} dq e^{i\frac{qx - \frac{q^2 t}{2m}}{\hbar}}$.

2. Un fascio di elettroni incide da sinistra sul gradino di potenziale disegnato in figura. L'energia potenziale degli elettroni vale 0 per $x < 0$ e $-\mathcal{V} = -300eV$ per $x > 0$, la loro energia cinetica vale $E = 100\ eV$. Calcolate il coefficiente di riflessione R del gradino.



Soluzione:
$$R = \frac{2E + \mathcal{V} - 2\sqrt{E(E+\mathcal{V})}}{2E + \mathcal{V} + 2\sqrt{E(E+\mathcal{V})}} = \frac{1}{9}$$

3. Un fascio di elettroni incide da destra su un gradino di potenziale analogo a quello dell'esercizio precedente, ma con altezza pari a $-\mathcal{V} = -10\ eV$; la loro energia cinetica vale $E = 9\ eV$. Se la densità di corrente incidente è pari a $J = 10^{-3} Ampere$, calcolate il numero degli elettroni che a un dato istante si trovano sull'asse x negativo, cioè che, penetrando nella barriera a gradino, occupano posizioni classicamente proibite.

Soluzione: La soluzione dell'equazione di Schroedinger si scrive $\psi(x) = ce^{p'x/\hbar}$ per $x < 0$ e $\psi(x) = ae^{ipx/\hbar} + be^{-ipx/\hbar}$ per $x > 0$, con $p = \sqrt{2mE}$ e $p' = \sqrt{2m(\mathcal{V} - E)}$. Imponendo la continuità in $x = 0$ per $\psi(x)$ e la sua derivata otteniamo $c = \frac{2a}{1+ip'/p}$ e $b = a\frac{1-ip'/p}{1+ip'/p}$. Si vede subito che $|b|^2 = |a|^2$, per cui il coefficiente di riflessione è 1.

Infatti a sinistra del gradino la corrente è $J(x) = -\frac{i\hbar}{2m}(\psi^*\partial_x\psi - \psi\partial_x\psi^*)$ è nulla e si ha solo un'onda evanescente (quindi niente trasmissione). Tuttavia la probabilità di trovare un elettrone a sinistra non è nulla e il numero totale di elettroni che si trovano a $x < 0$ è dato da $N = \int_{-\infty}^{0} |\psi(x)|^2 dx = |c|^2\hbar/(2p') = \frac{2|a|^2\hbar p^2}{p'(p^2+p'^2)}$. Il coefficiente a si calcola imponendo che la corrente elettrica incidente sul gradino, $J_{\rm el} = eJ = e|a|^2\frac{p}{m}$ sia pari a $10^{-3} Ampere$. Si ricava infine $N \simeq 1.2$.

4. Un elettrone è confinato in una scatola cubica a pareti riflettenti con lunghezza di spigolo pari a $2\ 10^{-9}\ m$, tenendo conto del grado di libertà di spin che ne raddoppia il numero, quanti sono gli stati con energia inferiore a $1\ eV$?

   Soluzione: I livelli energetici nella scatola a pareti cubiche riflettenti sono $E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2)$ dove $m = 0.911 \cdot 10^{-30}$ kg e k_x, k_y, k_z sono interi positivi. Dal vincolo $E < 1\ eV$ si deduce il vincolo $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 < 11.7$, che è soddisfatto da 10 combinazioni ((1,1,1), (2,1,1) + perm., (3,1,1) + perm., (2,2,1) + perm.). Tenendo conto dello spin si hanno 20 stati.

5. Se un fascio di particelle incide su una barriera di potenziale, dall'altra parte della barriera si ha un'onda piana progressiva che, oltre a essere di ampiezza ridotta rispetto a quella incidente acquista anche un fattore di fase. L'informazione è evidentemente contenuta nel rapporto fra il coefficiente dell'onda trasmessa e quello dell'onda incidente. Assumendo che la barriera sia sottile e quindi approssimabile col potenziale:

   $$V(x) = v\delta(x)\ ,$$

   e che si tratti di elettroni con energia pari a $10\ eV$ calcolate per quale valore di v la differenza di fase fra l'onda incidente e quella trasmessa vale $-\frac{\pi}{4}$.

   Tenendo conto di questo risultato descrivete l'esito di un esperimento d'interferenza in cui un fascio elettronico dell'energia data viene separato in due fasci identici, ciascuno con ampiezza metà di quella originale, uno dei quali attraversa la barriera sottile in questione e si ricombina coll'altro dopo aver compiuto un percorso di eguale lunghezza. Valutate il rapporto fra l'intensità del fascio dopo la ricombinazione e quella originale.

Soluzione: Se l'onda prima della separazione è rappresentata da $e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$,quella che incide sulla barriera è data da $\frac{1}{2}e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$, a cui si deve aggiungere l'ampiezza riflessa. Dunque alla sinistra della barriera si ha $\frac{1}{2}e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}} + \frac{a}{2}e^{-i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$ e alla destra l'onda trasmessa: $\frac{b}{2}e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$. La condizioni di continuità sulla barriera è: $1 + a = b$, quella di discontinuità della derivata: $b - 1 + a = \sqrt{\frac{2m}{E}}\frac{v}{\hbar}b$. Da queste si calcola $b = \frac{1}{1+i\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{v}{\hbar}}$. La condizione che la fase di b sia $-\pi/4$ equivale a $\sqrt{\frac{m}{2E}}\frac{v}{\hbar} = 1$ per cui $v \simeq 1.810^{-28}\ joulexm.$

Se, con questa scelta di v si sommano l'ampiezza trasmessa $\frac{b}{2}e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$ con quella del fascio che non ha incontrato la barriera: $\frac{1}{2}e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$, si ottiene: $\frac{1}{2}[1 + \frac{1}{1+i}]e^{i\sqrt{2mE}\frac{x}{\hbar}}$. Il modulo quadrato dell'ampiezza risultante è $|\frac{1}{2}[1 + \frac{1}{1+i}]|^2 = \frac{5}{8}$ da confrontare con 1 .

6. Se una buca di potenziale è sottile al punto di essere approssimabile con una delta di Dirac:

$$V(x) = -VL\delta(x)$$

dove V è la profondità della buca e L la sua larghezza, si possono calcolarne le energie degli stati legati (dello stato legato) ricordando che per un'energia potenziale del tipo sopra indicato si ha continuità della funzione d'onda, ma discontinuità nell'origine della derivata prima:

$$\lim_{\epsilon\to 0}\left(\partial_x\psi(x+\epsilon) - \partial_x\psi(x-\epsilon)\right) = -\frac{2m}{\hbar^2}VL\psi(0)\ .$$

Calcolare l'energia dello stato legato corrispondente al potenziale sopra indicato.

Soluzione: Nel caso di uno stato legato la funzione d'onda si scrive $a\ e^{-\sqrt{2mE}x/\hbar}$ per $x > 0$ e $a\ e^{\sqrt{2mE}x/\hbar}$ per $x < 0$, dove si è già imposta la condizione di continuità della funzione d'onda e E è il valore assoluto dell'energia totale (che è negativa trattandosi di uno stato legato). Imponendo la condizione di discontinuità sulla derivata prima si ottiene infine $E = \frac{mV^2L^2}{2\hbar^2}$, che indica appunto l'esistenza di un solo possibile valore dell'energia.

7. Una particella di massa m è soggetta al potenziale:

$$V(x) = v(\alpha\delta(x-L) + \alpha\delta(x+L) - \frac{1}{L}\theta(L^2 - x^2))\ ,$$

dove $\theta(y) = 0$ per $y < 0$ e $\theta(y) = 1$ per $y > 0$ e

$$\frac{2mvL}{\hbar^2} = (\frac{\pi}{4})^2$$

Calcolare per quali valori di $\alpha > 0$ si hanno stati legati.

Soluzione: Dato che lo stato legato più basso, se c'è, è pari, chiediamo che ci sia uno stato legato pari. Ci occupiamo quindi solo di $x > 0$ e poniamo $\psi(x) = \cos kx$ per $x < L$ e $\psi(x) = ae^{-\beta x}$ per $X > L$ con $o < k < \sqrt{\frac{2mv}{\hbar^2 L}} = \frac{\pi}{4L}$ e $\beta = \sqrt{\frac{2mv}{\hbar^2 L} - k^2}$. La condizione di stato legato equivale a β reale e quindi $kL < \frac{\pi}{4}$.

Le condizioni di continuità e discontinuitá su $\psi(x)$ e $\psi'(x)$ il L danno: $\tan kL = \frac{\beta + \frac{2mv\alpha}{\hbar^2}}{k}$ che, posto $x \equiv kl$ diventa

$$\tan x = \frac{\sqrt{\frac{\pi^2}{16} - x^2} + \frac{\pi^2}{16}\alpha}{x}$$

. Al primo membro c'è una funzione crescente da 0 a 1 per $0 < x < \frac{\pi}{4}$, a secondo membro c'è una funzione decrescente da ∞ a $\frac{\pi}{4}\alpha$. Perché le due funzioni si intersechino bisogna che $\alpha < \frac{4}{\pi}$.

8. Un elettrone in una dimensione è soggetto a forze corrispondenti a una buca rettangolare di profondità pari a $V = 0.1\ eV$ e di larghezza $L = 3\ 10^{-10}\ m$.

   Si mostri che in queste condizioni si ha un solo stato legato e se ne calcoli l'energia in approssimazione di buca sottile usando il risultato dell'esercizio precedente.

   Si discuta in quale approssimazione il risultato per la buca sottile coincide con quello esatto.

   Soluzione: La condizione per cui esiste un solo stato legato equivale a quella per cui non esiste il primo stato dispari. Questo si verifica quando $y = \frac{\sqrt{2mV}L}{2\hbar} < \frac{\pi}{2}$. Nel nostro caso, usando $m = 0.911 \cdot 10^{-30}$ kg, si ottiene $y \simeq 0.27 < \pi/2$, dunque esiste effettivamente un solo stato legato. Detta $-E$ l'energia dell'unico stato legato, questa è data dalla relazione

$$\tan\left(\frac{L\sqrt{2m(V-E)}}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{E}{V-E}}\ .$$

Il limite di buca sottile corrisponde a $V \to \infty$ e $L \to 0$ con il prodotto VL costante. Trascurando E rispetto a V possiamo riscrivere

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2mVL^2}}{2\hbar}\right) = \sqrt{\frac{E}{V}} \ .$$

Nel limite di buca sottile $VL^2 \to \text{costante} \cdot L \to 0$, quindi l'argomento della tangente va a zero e possiamo sostituire la tangente con il suo argomento, ottenendo infine $E = \frac{mV^2L^2}{2\hbar^2} \simeq 0.75 \cdot 10^{-2}\ eV$, che coincide con la formula ottenuta nell'esercizio precedente. Nel nostro caso l'argomento della tangente diventa proprio la variabile $y \sim 0.27$ e si ha $\tan 0.27 \simeq 0.2768$: il risultato esatto pertanto differisce dall'approssimazione di buca sottile per circa il 5 %.

9. Un elettrone in una dimensione è soggetto a forze corrispondenti al potenziale:

$$V(x) = \mathcal{V}[-\delta(x) + \delta(x - L)]$$

Si discuta sotto quali condizioni si ha uno stato legato e si calcoli l'energia di legame nel caso in cui $L = 10^{-9}\ m$ e $\mathcal{V} = 2\ 10^{-29}\ Joule \times m$.

Soluzione: La soluzione dell'equazione di Schrödinger con energia di legame B si può scrivere $\psi(x) = e^{\sqrt{2mB}x/\hbar}$ per $x < 0$ e $\psi(x) = ae^{\sqrt{2mB}x/\hbar} + be^{-\sqrt{2mB}x/\hbar}$ per $0 < x < L$, e $\psi(x) = ce^{-\sqrt{2mB}x/\hbar}$ per $L < x$. Le condizioni di continuità delle funzioni d'onda e di discontinuità delle derivate in $x = 0$ e $x = L$ danno: $a + b = 1$, $a - b - 1 = -\sqrt{\frac{2m}{B}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}$, $ae^{\sqrt{8mB}L/\hbar} + b = c$, $ae^{\sqrt{8mB}L/\hbar} - b + c = -c\sqrt{\frac{2m}{B}}\frac{\mathcal{V}}{\hbar}$.

La condizione di compatibilità delle quattro equazioni è: $e^{\sqrt{8mB}L/\hbar} = \frac{1}{1-\frac{2B\hbar^2}{m\mathcal{V}^2}}$ che ha una soluzione $B \neq 0$ per qualunque $L > 0$. Se poniamo: $x = \sqrt{\frac{2B}{m}}\frac{\hbar}{\mathcal{V}}$ la condizione di compatibilità diventa $e^{\frac{2m\mathcal{V}Lx}{\hbar^2}} = \frac{1}{1-x^2}$. Per i valori di L e $\mathcal{V}$ sopra indicati $e^{\frac{2m\mathcal{V}L}{\hbar^2}} \geq 1$ e quindi con ottima approssimanzione si ha $\frac{2B\hbar^2}{m\mathcal{V}^2} = 1$.

10. Una particella di massa $M = 10^{-26}\ kg$ si muove lungo l'asse x ed è attratta verso l'origine da una forza elastica con costante $k = 10^{-6}\ Newton/m$. La particella occupa lo stato fondamentale. Se ne calcoli la funzione d'onda e si calcoli il valor medio di x^2 che evidentemente è dato da:

$$\bar{(x^2)} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x^2 |\psi(x)|^2}{\int_{-\infty}^{\infty} dx |\psi(x)|^2} \ .$$

Soluzione:

$$\psi(x) = \left(\frac{kM}{\pi^2\hbar^2}\right)^{1/8} e^{-\frac{\sqrt{kM}}{2\hbar}x^2} \quad ; \quad (\bar{x^2}) = \frac{1}{2}\frac{\hbar}{\sqrt{kM}} \simeq 5 \cdot 10^{-19}\mathrm{m}^2$$

11. Per un oscillatore armonico 3-dimensionale con massa $M = 10^{-25}\ kg$ e costante elastica $k = 10\ Newton/m$ quanti stati hanno energia inferiore a $2 \cdot 10^{-2}\ eV$?

    Soluzione: I livelli energetici sono $E_{n_x.n_y,n_z} = \hbar\sqrt{k/M}(3/2 + n_x + n_y + n_z)$. Con i dati del problema, $E_{n_x.n_y,n_z} < 2 \cdot 10^{-2}\ eV$ si traduce in $n_x + n_y + n_z < 1.7$, per cui gli stati cercati sono 4, (0,0,0), (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1).

12. Una particella di massa $M = 10^{-26}\ kg$ si muove lungo l'asse x, è attratta verso l'origine da una forza elastica con costante $k = 10^{-6}\ Newton/m$ ed è soggetta a una forza costante $F = 10^{-15}\ Newton$ diretta nel verso positivo dell'asse x. La particella occupa lo stato fondamentale. Se ne calcoli la funzione d'onda e si calcoli il valor medio di x che evidentemente è dato da:

$$(\bar{x}) = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} dx x|\psi(x)|^2}{\int_{-\infty}^{\infty} dx|\psi(x)|^2} \ .$$

    Soluzione: Cambiando variabile da x a $y = x - F/K$, il problema si riduce a quello del semplice oscillatore armonico senza forza costante, con stessa costante elastica e stessa massa, analogamento al caso classico. La funzione d'onda dello stato fondamentale è quindi

$$\psi(x) = \left(\frac{kM}{\pi^2\hbar^2}\right)^{1/8} e^{-\frac{\sqrt{kM}}{2\hbar}\left(x - \frac{F}{k}\right)^2}$$

    e $\langle x \rangle = \frac{F}{k} = 10^{-9}m$.

13. Una particella di massa $m = 10^{-30}\ kg$ ed energia cinetica pari a $50\ eV$ incide su una buca di potenziale quadrata di larghezza $L = 2 \cdot 10^{-10}\ m$ e

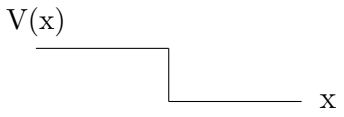
profonda $V = 1\ eV$. Calcolare il coefficiente di riflessione al primo ordine significativo in $\frac{V}{2E}$.

Soluzione: Indicando con ψ_s, ψ_c e ψ_d rispettivamente le funzioni d'onda a sinistra, all'interno e a destra della barriera, si può porre $\psi_s = e^{\frac{i\sqrt{2mE}x}{\hbar}} + ae^{\frac{-i\sqrt{2mE}x}{\hbar}}$, $\psi_c = be^{\frac{i\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar}} + ce^{\frac{-i\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar}}$ e $\psi_d = de^{\frac{i\sqrt{2mE}x}{\hbar}}$ dove a e c sono necessariamente di ordine $\frac{V}{2E}$ mentre b e d valgono 1 a meno di correzioni dello stesso ordine. Infatti se V tende a zero la soluzione tende all'onda piana. Applicando le condizioni di continuità si ottiene: $1 + a = b + c$, $1 - a \simeq b - c + \frac{V}{2E}$, $be^{\frac{i\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}} + ce^{\frac{-i\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}} \simeq (b + \frac{V}{2E})e^{\frac{i\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}} - ce^{\frac{-i\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}}$. Risolvendo si trova subito $a = \frac{V}{4E}(e^{\frac{2i\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}} - 1)$ e $R = \frac{V^2}{4E^2}\sin^2\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar} \simeq 10^{-4}$

14. Una particella di massa $m = 10^{-30}\ kg$ è confinata in una buca a pareti riflettenti di larghezza $L = 10^{-9}\ m$. Al centro della buca la particella è soggetta a una barriera repulsiva sottile (deltiforme) schematizzabile tramite l'energia potenziale $V(x) = W\delta(x)$ con $W = 2\ 10^{-28}\ Joule \times m$. Confrontare l'energia dello stato fondamentale con quella in assenza della barriera.

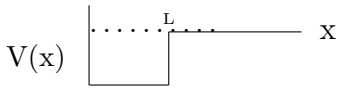
Soluzione: Le soluzioni dispari non sono influenzate dalla delta perché si annullano nel centro della buca. Per discutere quelle pari si sceglie l'origine dell'asse x nell'estremo sinistro della buca: la funzione d'onda sulla parte a sinistra della buca è $\psi_s \sim \sin\frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}$, quella sul lato destro $\psi_d \sim \sin\frac{\sqrt{2mE}(L-x)}{\hbar}$. Ponendo $z \equiv \frac{\sqrt{2mE}L}{2\hbar}$ la condizione di discontinuità della derivata nel centro della buca da: $\tan z = -z\frac{2\hbar^2}{mLW} \simeq -10^{-1}$ e quindi si ha $E \simeq \frac{2\hbar^2}{mL^2}\pi^2(1 - 2\ 10^{-1}/\pi) \simeq 2\ 10^{-19}\ Joule$, appena sotto il primo livello eccitato.

15. Un fascio di elettroni incide da destra sul gradino di potenziale disegnato in figura. L'energia potenziale degli elettroni vale $\mathcal{V} = 30eV$ per $x < 0$ e 0 per $x > 0$, la loro energia cinetica iniziale vale $E = 40\ eV$. Calcolate il coefficiente di trasmissione T del gradino.



Soluzione: Posta $a = (\sqrt{E}-\sqrt{E-V})/(\sqrt{E}+\sqrt{E-V}) = 1/3$ si ha $T = 1-a^2 = 8/9$.

16. Un fascio di elettroni corrispondente alla corrente di 10^{-12} *Ampere* incide da destra sul gradino di potenziale disegnato in figura. L'energia potenziale degli elettroni vale $-V = -10eV$ per $0 < x < L$ e 0 per $x > L$ dove la loro energia cinetica vale $E = 0.01\ eV$. $L = 10^{-11}\ m$. Nel Punto $x = 0$ l'energia potenziale diverge e la funzione d'onda deve annullarsi. Calcolare la densità della carica portata dagli elettroni in funzione di x.



Soluzione: Essendoci riflessione completa la funzione d'onda alla destra del gradino può essere scelta reale, cioè nella forma: $a\sin(\frac{\sqrt{2mE}(x-L)}{\hbar}+\phi)$ sarà allora reale anche la funzione d'onda a sinistra che varrà: $b\sin(\frac{\sqrt{2m(E+V)}x}{\hbar})$. Le condizioni di continuità sono: $b\sin(\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}) = a\sin\phi \simeq b\sin(\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar})$ e: $b\cos(\frac{\sqrt{2m(E+V)}L}{\hbar}) = \sqrt{\frac{E}{E+V}}a\cos\phi \simeq \sqrt{\frac{E}{V}}a\cos\phi \simeq b\cos(\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar})$ dove si è tenuto conto del valore di $\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar} \simeq 0.57\ rad$. e quindi $\cos(\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar}) \simeq 0.85$ Data la corrente si ha che $a^2\sqrt{\frac{2E}{m}} = I = 6.25\ 10^6 sec^{-1}$. Dalle condizioni di continuità si ricava: $\sqrt{\frac{E}{V}}\tan\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar} \simeq \tan\phi \simeq \phi$ e $b = a\frac{\sqrt{\frac{E}{V}}}{\cos(\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar})}$. quindi in prima approssimazione la densità a destra del gradino vale $\rho_D = I\sqrt{\frac{m}{2E}}\sin^2(\frac{\sqrt{2mE}(x-L)}{\hbar}+\phi)$ e quella a sinistra: $\rho_S = I\sqrt{\frac{mE}{2V^2}}\sin^2\frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}$

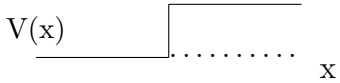
17. Con riferimento al potenziale descritto nell'esercizio precedente calcolare per quali valori di V si ha uno e uno solo stato legato.

Soluzione: Nel caso considerato di una stato legato con energia $-B$ possiamo scegliere la funzione d'onda a destra del gradino come $ae^{-\frac{\sqrt{2mB}x}{\hbar}}$ e a sinistra sin $\frac{\sqrt{2m(V-B)}x}{\hbar}$. Dalle condizioni di continuità si ha: $\tan\frac{\sqrt{2m(V-B)}L}{\hbar} = -\sqrt{\frac{B}{V-B}}$. Perché ci siano soluzioni bisogna che l'argomento della tangente superi $\frac{\pi}{2}$ e quindi: $\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar} > \frac{\pi}{2}$, d'altra parte si ha una sola soluzione se $\frac{\sqrt{2mV}L}{\hbar} < \frac{3\pi}{2}$.

18. Una palla di massa $m = 0,05\ kg$ incide alla velocità di 3 m/sec su una barriera di spessore $D = 10\ cm$ e altezza $H = 1\ m$. La palla non ruota. Ricorrendo alla formula dell'effetto tunnel calcolare l'ordine di grandezza dell'esponente di 10 che fornisce la probabilità che la palla sorpassi la barriera.

Soluzione: In prima approssimazione la trasparenza è data da $e^{-\frac{2D}{\hbar}\sqrt{2m(mgH-\frac{mv^2}{2})}} = 10^{-1.4\ 10^{32}}$.

19. Un fascio di elettroni incide da sinistra sul gradino di potenziale disegnato in figura. L'energia potenziale degli elettroni vale 0 per $x < 0$ e $\mathcal{V} = 10\ eV$ per $x > 0$, la loro energia cinetica vale $E = 16\ eV$. Calcolare il coefficiente di riflessione e confrontarlo con quello che si ha se il fascio incide da destra con energia cinetica $E' = E - V = 4\ eV$.



Soluzione: Nel caso di provenienza da sinistra poniamo la funzione d'onda a sinistra: $\psi_S = e^{i\frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}} + ae^{-i\frac{\sqrt{2mE}x}{\hbar}}$, e a destra: $\psi_D = be^{i\frac{\sqrt{2mE'}x}{\hbar}}$ .Le condizioni di continuità danno: $b = 1 + a$ e $1 - a = \sqrt{\frac{E'}{E}}b$. da cui si calcola $a = \frac{1-\sqrt{\frac{E'}{E}}}{1+\sqrt{\frac{E'}{E}}} = \frac{1}{3}$. Il coefficiente di riflessione e' dunque $R = |a|^2 = \frac{1}{9}$. Nel caso di provenienza da destra i calcoli procedono in modo sostanzialmente identico ma con $E \leftrightarrow E'$, questo vuol dire che a cambia segno, ma R non cambia.

20. Usando la formula di Einstein $\Delta E = h\nu$ calcolare quanto vale un quanto di energia per le piccole oscillazioni di un pendolo semplice di un metro di lunghezza.

Soluzione: L'energia del quanto è $h\nu = \hbar\omega$ e $\omega = \sqrt{\frac{g}{l}}$, dove g è l'accelerazione di gravita e la lunghezza del pendolo è $l = 1\ m$. Sostituendo i valori si ha: $h\nu = 3.1\ 10^{-34}\ Joule$

21. Calcolare il valor medio di x^2 nel primo stato eccitato di un oscillatore armonico con costante elastica k e massa m.

Soluzione: La funzione d'onda del primo stato eccitato è proporzionale a: $x\, e^{-x^2\sqrt{\frac{km}{4\hbar^2}}}$ si tratta allora di calcolare: $\bar{x^2} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x^4 e^{-x^2\sqrt{\frac{km}{\hbar^2}}}\, dx}{\int_{-\infty}^{\infty} x^2 e^{-x^2\sqrt{\frac{km}{\hbar^2}}}\, dx} = \frac{3}{2}\sqrt{\frac{\hbar^2}{km}}$

22. Una particella di massa $M = 10^{-30}\ kg$ si muove in una dimensione fra due pareti riflettenti poste a distanza $L = 10^{-10}\ m$. Supponendo che la particella si trovi nel primo stato eccitato ($n = 2$) si calcoli lo scarto quadratico medio della posizione x della particella definito come $\sqrt{\bar{x^2} - (\bar{x})^2}$, dove la barra sta per il valor medio.

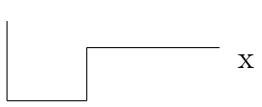
Soluzione: Se si pone l'origine equidistante fra le due pareti, la funzione d'onda del primo stato eccitato è: $\psi(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} sin\frac{2\pi x}{L}$ per $|x| < \frac{L}{2}$ ed è nulla altrimenti. per simmetria si ha subito che $\bar{x} = 0$, mentre $\bar{x^2} = \frac{2}{L}\int_{-\frac{L}{2}}^{\frac{L}{2}} x^2 sin^2\frac{2\pi x}{L} dx = L^2(\frac{1}{3} - \frac{1}{8\pi^2})$ da cui quanto richiesto si ottiene estraendo al radice quadrata.

23. Un fascio di elettroni con energia $E = 1\ eV$ incide da destra sul potenziale $V(x) = \mathcal{V}\delta(x)$ con $\mathcal{V} = \hbar\sqrt{\frac{2E}{m}}$. Confrontare la densità di carica nei punti a sinistra della barriera con quella alla destra.

Soluzione: Scegliendo a destra: $\psi_D = e^{ikx} + ae^{-ikx}$ e a sinistra $\psi_S = be^{ikx}$ con $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, la condizione di discontinuità della derivata prima da: $a = \frac{1}{\frac{ik\hbar^2}{m\mathcal{V}} - 1} = \frac{1}{i-1}$,

$b = \frac{\frac{ik\hbar^2}{m\mathcal{V}}}{\frac{ik\hbar^2}{m\mathcal{V}}-1} = \frac{1}{i+1}$. Sostituendo si ha: $\rho_S \equiv |\psi_S|^2 = \frac{1}{2}$, e $\rho_D \equiv |\psi_D|^2 = \frac{3}{2} - \sqrt{2}\sin(kx - \frac{\pi}{4})$

24. Una particella è soggetta al potenziale indicato in figura, cioè tale che: $V(x) = \infty$ per $x < 0$, $V(x) = -V$ per $0 < x < L$, $V(x) = 0$ per $x > L$.



Assumendo che

$$\sqrt{2mV}\frac{L}{\hbar} = \frac{\pi}{2} + \delta \quad , \quad con \quad \delta \ll 1 \ ,$$

si mostri che al primo ordine significativo in δ , posto eguale a $-B$ l'energia dello stato legato, si ha:

$$B \simeq V\delta^2 \ ,$$

e si calcoli il rapporto fra la probabilità che la particella stia dentro alla buca e quella che stia fuori.

Soluzione: Le condizioni di continuità danno:$\cot\left(\frac{\sqrt{2m(V-B)}L}{\hbar}\right) = -\sqrt{\frac{B}{V-B}}$; la particolare scelta di V implica che B sia piccolo rispetto a V stesso. La condizione diventa allora: $\cot\left(\frac{\sqrt{2m(V-B)}L}{\hbar}\right) \simeq \cot(\frac{\pi}{2}(1 - \frac{B}{2V}) + \delta) \simeq \delta - \frac{\pi B}{4V} \simeq \sqrt{\frac{B}{V}}$ da cui si deduce subito $B \simeq V\delta^2$. Si può allora concludere che la funzione d'onda nella bucaè ben approssimata da $k\sin\frac{\pi x}{2L}$ e fuori da $ke^{-\frac{\sqrt{2mB}x}{\hbar}} \simeq ke^{-\frac{\pi\delta x}{2L}}$. Il rapporto fra le probabilità è allora subito calcolato e vale δ.

Testi Consigliati

- E.H.Wichman,
  La Fisica del Berkeley - Vol. 4.
  Zanichelli - Bologna.
- Per un approfondimanto: E.Persico
  Fundamentals of Quantum Mechanics
  Prentice - Hall Inc.

Capitolo 4

LA TEORIA STATISTICA DELLA MATERIA.

Nei capitoli precedenti abbiamo discusso l'esistenza e l'ordine di grandezza degli effetti quantistici mostrando in particolare la loro importanza in vari settori della fisica microscopica. Abbiamo visto in particolare che nel caso degli elettroni gli effetti quantistici sono rilevanti a energie dell'ordine dell'elettrone-Volt (eV), mentre, per quel che riguarda il movimento degli atomi che hanno masse di tre-quattro ordini di grandezza più grandi, si hanno effetti significativi a energie inferiori di circa tre-quattro ordini di grandezza. Si tratta di sistemi a bassa temperatura. Quindi, per studiare gli effetti considerati, bisogna avere un quadro teorico adatto alla descrizione di sistemi in equilibrio termico e a dedurre le proprietà termodinamiche dei sistemi dalla natura, eventualmente quantistica, dei loro stati.

Boltzmann identificò il contatto termico fra sistemi con interazioni di breve durata e a carattere casuale e comportanti limitati scambi energetici. Queste interazioni sono assimilabili a urti che di regola avvengono alla superficie dei sistemi. I processi d'urto generano transizioni brusche e casuali fra gli stati di moto dei sistemi coinvolti. La sequenza dei processi d'urto è analoga a una serie di lanci di dadi collegati all'estrazione a caso dei successivi stati di moto.

In queste condizioni è chiaro che la legge oraria del sistema, cioè l'elencazione della successione degli stati di moto, non ha alcun senso, perché la successione è casuale. Ha invece senso lo studio della *distribuzione* degli stati fra quelli accessibili da parte di ciascun sistema, cioè del numero delle volte in cui uno stato particolare è estratto nel corso di **N** estrazioni successive. Nel caso di estrazioni del tutto casuali, cioè per cui tutti gli stati sono equivalenti, è chiaro che questo

numero non dipende dallo stato ed è quindi eguale all'inverso nel numero degli stati accessibili moltiplicato per il numero delle estrazioni. Se, invece di parlare di distribuzione dei risultati delle estrazioni, pensiamo alla *distribuzione di probabilità* che il sistema si trovi in un singolo stato, e se manteniamo l'ipotesi di completa casualità, si ha una probabilità di estrazione indipendente dallo stato e uguale all'inverso nel numero degli stati accessibili.

Il problema fisico è però complicato dall'aspetto energetico. Per quanto gli urti comportino singolarmente scambi energetici assai limitati, l'energia totale trasferita globalmente (calore) in numerose interazioni può contribuire in modo rilevante agli scambi energetici fra i sistemi. Rimane peraltro constante la somma delle energie dei sistemi e termostati coinvolti.

Il fisico americano J. Willard Gibbs ha proposto un metodo per valutare le distribuzioni di probabilità dei singoli stati nel caso dell'equilibrio termico basandosi sui punti seguenti:

1) L'equilibrio termico non dipende dalla natura del termostato il quale altro non è che un sistema a capacità termica infinita (questo è un enunciato del cosiddetto *principio zero della termodinamica*). Il termostato scelto da Gibbs si identifica con un grandissimo insieme di $\mathcal{N}$ sistemi identici in contatto termico. Il numero $\mathcal{N}$ è così grande che qualunque scambio di calore (energia) fra sistema e termostato, ripartendosi fra tutti i sistemi costituenti il termostato stesso, non ne cambia il contenuto energetico medio e quindi lo stato termodinamico.

2) Invece di seguire i risultati di una lunga successione di estrazioni casuali di stati e mediarne le distribuzioni risultanti estraendo le probabilità, Gibbs ha proposto di compiere un gran numero di estrazioni simultanee. La proposta corrisponde a lanciare simultaneamente un gran numero di dadi invece di gettare un gran numero di volte lo stesso dado. Questo implica che le probabilità non sono dedotte mediando sul tempo, ma compiendo una *media d'insieme*. Dato che nello schema di Gibbs l'insieme sistema termostato (*Macrosistema*) si identifica con $\mathcal{N}+1$ sistemi identici in contatto termico e in equilibrio, osservando a qualunque istante la distribuzione degli stati occupati dai singoli sistemi, si ha automaticamente una media d'insieme e se ne può dedurre direttamente la probabilità di occupazione dei singoli stati. La valutazione della distribuzione di insieme non comporta la determinazione dello stato associato a ciascun sistema costituente, bensì del numero di sistemi costituenti trovati nello stesso stato.

3) Il Macrosistema è isolato e tutti gli stati ad esso accessibili sono egualmente probabili. Come abbiamo già detto, gli urti interni al Macrosistema, comportano un cambiamento casuale di stato. Evidentemente, se è vero che gli stati del Macrosistema sono equi-probabili, la probabilità associata a una

certa distribuzione è direttamente proporzionale al numero di stati del Macrosistema che realizzano la distribuzione considerata, numero che noi chiamiamo molteplicità $\mathcal{M}$ della distribuzione.

Se l'indice i distingue gli stati dei sistemi costituenti e la distribuzione considerata è individuata dalla successione $\{N_i\}$, dove N_i è il numero dei sistemi costituenti trovati nello stato i, la molteplicità della distribuzione si ottiene dalla ovvia generalizzazione della distribuzione binomiale ed è:

$$\mathcal{M}(\{N_i\}) = \frac{\mathcal{N}!}{\prod_i N_i!} \ . \tag{4.1}$$

Ovviamente si ha:

$$\sum_i N_i = \mathcal{N} \ . \tag{4.2}$$

4) Il criterio di accessibilità degli stati è unicamente collegato alla loro energia che, a causa del limitato scambio energetico nei processi d'urto, si riduce alla somma delle energie dei sistemi costituenti. In altri termini, se E_i è l'energia dello stato i dei sistemi costituenti quella del Macrosistema è data da:

$$E_M \equiv \mathcal{N}U = \sum_i E_i N_i \ . \tag{4.3}$$

U, che si identifica con l'energia media dei sistemi costituenti, caratterizza lo stato termodinamico del termostato ed è quindi collegato alla temperatura dello stesso in un modo che va determinato dallo sviluppo dei calcoli.

5) Gibbs identificò la probabilità che all'equilibrio termico il sistema in studio si trovi nello stato i con:

$$p_i = \frac{\bar{N}_i}{\mathcal{N}} \tag{4.4}$$

dove la distribuzione $\{\bar{N}_i\}$ è quella di massima molteplicità fra le distribuzioni accessibili:

$$\mathcal{M}(\{\bar{N}_i\}) \geq \mathcal{M}(\{N_i\}) \ ,$$

cioè quella che si realizza nel maggior numero di stati del Macrosistema. Noi chiameremo p_i *probabilità di occupazione* dello stato i.

L'identificazione fatta da Gibbs è giustificata dal fatto che la funzione molteplicità ha un unico picco intorno al suo massimo la cui larghezza tende a zero a limite di termostato ideale, cioè quando $\mathcal{N} \to \infty$. Nel seguito presenteremo un esempio molto semplice e non particolarmente significativo dal punto di vista fisico, in cui il sistema in studio ha solo tre stati distinti e quindi la funzione

molteplicità $\mathcal{M}$ dipende da una sola variabile. Questo permette di calcolare direttamente nel modo più semplice la larghezza di questo picco.

6) L'analisi dell'equilibrio termodinamico appena descritta può essere estesa all'*equilibrio chimico*. L'equilibrio chimico si distingue da quello termodinamico perchè riguarda situazioni in cui, oltre agli scambi energetici dovuti agli urti si hanno anche scambi di particelle (atomi o molecole, elettroni, ioni e quant'altro); le pareti del sistema in studio, oltre a essere sede di urti, trasmettono particelle per effetto tunnel. Gli stati dei sistemi considerati, nel caso dell'equilibrio chimico, sono caratterizzati, oltre che dalla loro energia, dal numero di particelle di ciascuna delle specie considerate. Nel caso di una reazione chimica, per esempio, si tratta del numero di atomi dei diversi elementi che intervengono nella reazione. Continuando a indicare con i il generico stato e con E_i la sua energia distingueremo con l'apice (s) le specie di particelle e con $n_i^{(s)}$ il numero delle particelle della specie s nello stato i. La distribuzione $\{N_i\}$ risulta essere vincolata, oltre che dalle (4.2) e (4.3) anche dalla conservazione dei numeri di particelle delle diverse specie:

$$\sum_i n_i^{(s)} N_i = \bar{n}^{(s)} \mathcal{N} \ . \tag{4.5}$$

Si ricorda che esiste una netta differenza a livello della caratterizzazione microscopica fra equilibrio termico e chimico. Nel primo caso i sistemi in equilibrio hanno la stessa temperatura ($T_1 = T_2$) mentre nel secondo hanno anche lo stesso potenziale di Gibbs per mole di ciascuna specie che indichiamo con $g^{(s)}$. In alternativa si considera $\mu^{(s)} \equiv \frac{g^{(s)}}{N_A}$ che è detto anche *potenziale chimico*. $N_A = 6,02\,10^{23}$ è il numero di Avogadro.

Le distribuzioni corrispondenti ai due tipi diversi di equilibrio portano anche un nome diverso. Nel caso di equilibrio puramente termico si tratta della *Distribuzione Canonica*, mentre nel caso chimico si ha la *Distribuzione Gran Canonica*. Noi inizieremo il nostri studio dei sistemi più semplici tramite la Distribuzione Canonica per passare alla Gran Canonica nel caso dei gas perfetti quantistici.

Per quel che riguarda la natura dei sistemi più semplici consideriamo in particolare un oscillatore armonico isotropo tri-dimensionale (*il cristallo di Einstein*) e una particella confinata in una scatola a pareti riflettenti. Ricordiamo brevemente la natura degli stati dei due sistemi.

Il cristallo di Einstein Nel modello gli atomi del cristallo non scambiano forze fra vicini se non sotto forma di rari urti la cui natura non è meglio specifi-

cata e la cui funzione è garantire l'equilibrio termico, ma sono attratti da forze elastiche verso punti fissi disposti ai vertici di un reticolo cristallino. Il centro di attrazione del generico atomo è posto nel punto di coordinate $(m_x a, m_y a, m_z a)$ dove m_x, m_y, m_z sono tutti numeri interi con $|m_i|a < \frac{L}{2}$ e L è il lato del cristallo che assumiamo cubico. In sintesi ogni atomo è individuato da un vettore $\vec{m}$ di componenti m_x, m_y, m_z.

Dunque il cristallo di Einstein corrisponde meccanicamente a un gran numero di oscillatori armonici isotropi (vedi il capitolo Meccanica Ondulatoria a pg. 84)e si identifica col Macrosistema. Uno stato *microscopico* del cristallo è caratterizzato da una terna di numeri interi non negativi $(n_{x,\vec{m}}, n_{y,\vec{m}}, n_{z,\vec{m}})$ per ogni vertice $(\vec{m})$. Il corrispondente livello energetico è dato da:

$$E_{n_{x,\vec{m}},n_{y,\vec{m}},n_{z,\vec{m}}} = \sum_{\vec{m}} \hbar\,\omega\,\left(n_{x,\vec{m}} + n_{y,\vec{m}} + n_{z,\vec{m}} + \frac{3}{2}\right)\ . \tag{4.6}$$

Evidentemente numerosi stati diversi corrispondono allo stesso livello di energia e sono detti *degeneri*.

Abbiamo visto, trattando l'oscillatore armonico, che gli stati indicati qui sopra corrispondono a soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria la cui funzione d'onda dipende dal tempo tramite la fase $e^{\frac{-iEt}{\hbar}}$. Pertanto se gli oscillatori non interagissero fra loro lo stato del Macrosistema resterebbe lo stesso ad ogni istante e non ci sarebbe alcun luogo per una analisi statistica. se invece si ammettono rari urti casuali fra gli oscillatori comportanti piccoli scambi di energia (δ) lo stato si evolve pur restando la somma delle energie degli oscillatori costante a meno di δ. Dunque l'energia del Macrosistema che è isolato rimane costante, ma la somma delle energie dei sistemi costituenti non è fissata meglio di δ.

La particella in una scatola a pareti riflettenti In questo caso si costruisce un termostato assemblando $\mathcal{N}$ scatole a pareti riflettenti ciascuna delle quali contiene una particella, l'energia viene trasmessa da scatola a scatola tramite un, non meglio specificato, meccanismo d'urto attraverso alle pareti. Gli stati della particella nella scatola sono descritti da una terna di numeri interi positivi (k_x, k_y, k_z) corrispondenti alle componenti del numero d'onda della particella, e l'energia della scatola (vedi il capitolo Meccanica Ondulatoria a pg. 79) è data da:

$$E_{\vec{m}} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}[k_x^2 + k_y^2 + k_z^2]\ . \tag{4.7}$$

4.0.12 L'equilibrio termico col metodo di Gibbs

Seguendo la descrizione del metodo di Gibbs data sopra consideriamo un sistema di cui, per il generico stato i è data l'energia E_i. Si vuole individuare la distribuzione che massimizza la molteplicità (4.38) tenendo conto dei vincoli (4.2) e (4.3). Dato che la molteplicità è positiva la distribuzione che ha massima molteplicità ne ha anche massimo il logaritmo. Possiamo quindi studiare la condizione di massimo di:

$$\ln \mathcal{M}(\{N_i\}) = \ln \mathcal{N}! - \sum_i \ln N_i! \ , \tag{4.8}$$

vincolato da (4.2) e (4.3). Se si sceglie $\mathcal{N}$ molto grande, approssimando il *Limite Termodinamico*, escludendo distribuzioni di molteplicità trascurabile, si può dire che anche gli N_i diventano molto grandi. In queste condizioni è lecito approssimare i fattoriali con la formula di Stirling:

$$\log N! \simeq N\,(\log N - 1) \ . \tag{4.9}$$

Se poniamo $N_i \equiv \mathcal{N} x_i$ troviamo che il logaritmo della molteplicità è approssimato da:

$$\ln \mathcal{M}(\{N_i\}) \simeq -\mathcal{N} \sum_i x_i (\ln x_i - 1) \ , \tag{4.10}$$

e i vincoli (4.2) e (4.3) diventano:

$$\begin{aligned} &\sum_i x_i = 1 \\ &\sum_i E_i x_i = U \ . \end{aligned} \tag{4.11}$$

Dovendo cercare il massimo della (4.10) in presenza dei vincoli (4.11), conviene ricorrere al metodo dei moltiplicatori di Lagrange.

Ricordiamo a questo proposito che i punti stazionari della funzione a più variabili $F(x_1, .., x_n)$, vincolata dalle condizioni: $G_j(x_1, .., x_n) = 0$, con $j = 1, .., k$ e $k < n$, sono soluzioni del sistema di equazioni:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left[F(x_1, .., x_n) + \sum_{j=1}^{k} \lambda_j G_j(x_1, .., x_n) \right] = 0 \quad i = 1, ..., n \ ,$$

oltre che delle stesse condizioni vincolari. Si hanno dunque $n + k$ equazioni nelle $n + k$ incognite x_i , $i = 1, ...n$, e λ_j , $j = 1, .., k$. Nel caso generico, sia le incognite x_i, sia i moltiplicatori λ_j, sono univocamente determinati.

Nel nostro caso specifico abbiamo il sistema:

$$\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial x_i}\left[\ln \mathcal{M} - \beta\mathcal{N}(\sum_j E_j x_j - U) + \alpha\mathcal{N}(\sum_j x_j - 1)\right] \\
&-\mathcal{N}\frac{\partial}{\partial x_i}\sum_j \left[x_j(\ln x_j - 1) + \beta E_j x_j - \alpha x_j\right] \\
&= -\mathcal{N}\left[\ln x_i + \beta E_i - \alpha\right] = 0
\end{aligned} \tag{4.12}$$

in cui $-\beta$ e α sono i moltiplicatori di Lagrange che possiamo calcolare usando i vincoli (4.2) e (4.3).

Tenendo conto della (4.4) e della discussione al punto 5 dell'introduzione al Capitolo 5 possiamo identificare le x_i che risolvono il sistema (4.12) con le probabilità di occupazione p_i della Distribuzione Canonica ottenendo

$$\log p_i + 1 + \beta E_i - \alpha = 0 \ , \tag{4.13}$$

cioè:

$$p_i = e^{-1-\beta E_i+\alpha} \equiv k\ e^{-\beta E_i} \tag{4.14}$$

dove β deve essere necessariamente positivo perchè le somme in (4.11) convergano.

I vincoli danno:

$$\begin{aligned}
p_i &= \frac{e^{-\beta E_i}}{\sum_j e^{-\beta E_j}} = -\frac{d}{dE_i}\ln\sum_j e^{-\beta E_j} \equiv -\frac{d}{dE_i}\ln Z \\
U &= \sum_i E_i p_i = -\frac{d}{d\beta}\ln\sum_j e^{-\beta E_j} \equiv -\frac{d}{d\beta}\ln Z \ .
\end{aligned} \tag{4.15}$$

La funzione

$$Z \equiv \sum_j e^{-\beta E_j} \ , \tag{4.16}$$

e chiamata *funzione di partizione*.

La seconda equazione in (4.15) esprime la relazione esistente fra il moltiplicatore β e l'energia media U e quindi implicitamente la temperatura d'equilibrio. Evidentemente la relazione fra β e la temperatura appare assai implicita, tuttavia è facile convincersi che β stessa è una funzione universale dela temperatura indipendente dal sistema di riferimento.

Per mostrare ciò è opportuno considerare il caso in cui ciascuno dei sistemi componenti il termostato $\mathcal{S}$ è a sua volta composto dai sistemi S_1 e S_2, i suoi cui

stati sono indicati rispettivamente dagli indici i e a e le corrispondenti energie sono date da ϵ_i e ϵ_a. Gli stati del sistema composto sono descritti dalla coppia di indici (a, i) e le corrispondenti energie da:

$$E_{a,i} = \epsilon_a + e_i \ .$$

Se indichiamo la distribuzione in termini degli $x_{a,i} \equiv \frac{N_{a,i}}{\mathcal{N}}$ e ripetiamo l'analisi precedente ci ritroviamo allo studio del massimo di

$$\ln \mathcal{M}(\{N_{a,i}\}) \simeq -\mathcal{N} \sum_{b,j} x_{b,j}(\ln x_{b,j} - 1) \ , \tag{4.17}$$

vincolato da:

$$\begin{aligned} &\sum_{b,j} x_{b,j} = 1 \\ &\sum_{b,j} (\epsilon_b + e_j) x_{b,j} = U \ . \end{aligned} \tag{4.18}$$

Seguendo sempre la stessa analisi troviamo infine

$$\begin{aligned} p_{a,i} &= -\frac{1}{\beta} \frac{d}{dE_{a,i}} \ln Z \\ U &= -\frac{d}{d\beta} \ln Z \ , \end{aligned} \tag{4.19}$$

ma Z è ora data da:

$$Z_{\mathcal{S}} = \sum_{b,j} e^{-\beta(\epsilon_b + e_j)} = \sum_b \sum_j e^{-\beta\epsilon_b} e^{-\beta e_j} = \sum_b e^{-\beta\epsilon_b} \sum_j e^{-\beta e_j} = Z_s Z_{s'} \ , \tag{4.20}$$

per cui la probabilità di occupazione fattorizza:

$$p_{a,i} = \frac{e^{-\beta(\epsilon_a + e_i)}}{Z_{\mathcal{S}}} = \frac{e^{-\beta\epsilon_a}}{Z_s} \frac{e^{-\beta e_i}}{Z_{s'}} = p_a p_i \ .$$

I due sistemi in contatto termico assumono distribuzioni indipendenti corrispondenti allo stesso β. Dunque β non dipende dal particolare sistema in studio ma dall'equilibrio termico; ed è quindi funzione universale della temperatura. La sua dipendenza dalla temperature termodinamica assoluta verrà presto determinata applicando il metodo di Gibbs a sistemi semplici.

Il cristallo di Einstein Consideriamo un cubetto di lato L del cristallo che, seguendo il metodo di Gibbs, mettiamo in contatto termico con un grande (infinito) numero di altri cubetti,otteniamo così un cristallo infinito immaginato idealmente diviso in cubetti. Dato che, a meno degli urti, i singoli atomi sono indipendenti, possiamo identificare il sistema in studio col singolo atomo fornendo la probabilità di occupazione dei suoi stati, ovviamente microscopici, all'equilibrio. Evidentemente le proprietà del volumetto considerato saranno dedotte combinando in modo indipendente quelle dei suoi atomi.

Ricordando che gli stati microscopici di un oscillatore isotropo sono individuati da un vettore $\vec{n}$ con componenti intere non negative e il corrispondente livello energetico è dato in (4.6) possiamo calcolare direttamente la funzione di partizione del singolo oscillatore:

$$Z_o = \sum_{n_x=0}^{\infty}\sum_{n_y=0}^{\infty}\sum_{n_z=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega\left(n_x+n_y+n_z+\frac{3}{2}\right)} = e^{-\frac{3}{2}\beta\hbar\omega}\left[\sum_{n=0}^{\infty}\left(e^{-\beta\hbar\omega}\right)^n\right]^3$$
$$= \left[\frac{e^{-\frac{1}{2}\beta\hbar\omega}}{1-e^{-\beta\hbar\omega}}\right]^3 = \left[\frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{e^{\beta\hbar\omega}-1}\right]^3 \tag{4.21}$$

L'energia media è allora:

$$U = -\frac{\partial}{\partial\beta}\log Z_o = -3\frac{\partial}{\partial\beta}\log\frac{e^{\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{e^{\beta\hbar\omega}-1} = 3\hbar\omega\left(\frac{e^{\beta\hbar\omega}}{e^{\beta\hbar\omega}-1}-\frac{1}{2}\right) \ . \tag{4.22}$$

Passando al limite classico in cui $\hbar \to 0$ questo risultato dà informazioni dirette su β. Infatti nel limite classico deve valere la legge di Dulong e Petit che afferma che $U = 3kT$ dove k è la costante di Boltzmann.

Considerando la nostra formula, osserviamo che nel limite classico $e^{\beta\hbar\omega}-1 \simeq \beta\hbar\omega$ e quindi $U \simeq \frac{3}{\beta}$. Quindi concludiamo che:

$$\beta = \frac{1}{kT} \ .$$

Questo risultato verrà confermato in modo più rigoroso usando la termodinamica statistica dei gas perfetti.

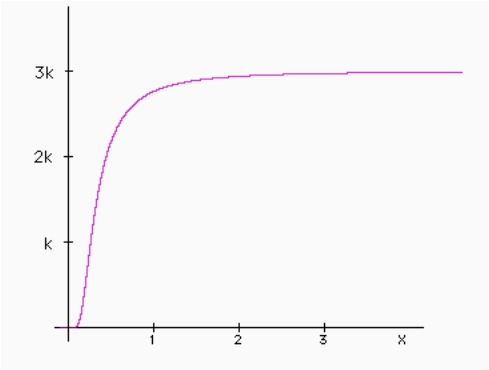
Ricordando che il calore specifico è definito da

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} \ ,$$

partendo da (4.22) otteniamo:

$$C = \frac{\partial\beta}{\partial T}\frac{\partial U}{\partial\beta} = -\frac{1}{kT^2}3\hbar^2\omega^2 e^{\beta\hbar\omega}\left[\frac{1}{e^{\beta\hbar\omega}-1} - \frac{e^{\beta\hbar\omega}}{(e^{\beta\hbar\omega}-1)^2}\right]$$
$$= \frac{3\hbar^2\omega^2}{kT^2}\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)^2} \ . \tag{4.23}$$

Posto $x = \frac{kT}{\hbar\omega}$ l'andamento del calore specifico atomico è mostrato nel diagramma qui di seguito. Si vede chiaramente come per $x \geq 1$ la legge di Dulong e Petit sia soddisfatta con ottima approssimazione. Non è invece del tutto soddisfacente l'andamento a basse temperature che prevede che C si annulli con tutte le sue derivate. L'importanza del modello di Einstein sta nel fatto che esso fornisce la prima spiegazione qualitativa delle violazioni della legge di Dulong e Petit a bassa temperatura. Infatti le osservazioni sperimentali mostrano calori specifici atomici sistematicamente inferiori a $3k$. Einstein fu il primo a mostrare l'annullamento del calore specifico alle basse temperature, ma fallì nel fornirne con precisione l'andamento. Questo risulta essere cubico in T negli isolanti e lineare nei conduttori, quando non si tenga conto della transizione superconduttrice. Il diverso andamento è spiegato, nel caso isolante, dallo scarso realismo dell'ipotesi di indipendenza del moti dei singoli atomi che è alla base del modello. Nella realtà gli atomi si muovono sotto l'azione delle forze esercitate dagli atomi vicini; il reticolo reale è dunque elastico e non rigido come nel modello. Nel caso dei conduttori invece l'andamento lineare è dovuto agli elettroni della banda di conduzione.



La particella in una scatola a pareti riflettenti In questo caso il termostato di Gibbs è costruito assemblando $\mathcal{N}$ scatole di lato L. Abbiamo già ricordato che lo stato della particella nella scatola k-esima è assegnato tramite un vettore a componenti $\vec{m}_k$ intere positive e l'energia è data dalla (4.7).

Abbiamo quindi che la funzione di partizione del sistema è data da

$$Z = \sum_{k_x=1}^{\infty} \sum_{k_y=1}^{\infty} \sum_{k_z=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}(k_x^2+k_y^2+k_z^2)} = \left(\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} k^2} \right)^3 . \tag{4.24}$$

Per grandi valori di β, piccole temperature, evidentemente si ha:

$$Z \simeq \left(e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}} \right)^3 , \tag{4.25}$$

perché il primo termine della serie in parentesi in (4.67) domina sugli altri. Per grandi temperature si può tener conto della lenta variabilità del sommando in (4.67) come funzione di $\vec{m}$ e trasformare la sommatoria in integrale:

$$\begin{aligned} Z &= \left(\sum_{k=1}^{\infty} e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} k^2} \right)^3 \simeq \left(\int_0^{\infty} dk \; e^{-\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} k^2} \right)^3 \\ &= \left(\frac{2mL^2}{\beta \pi^2 \hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} \left(\int_0^{\infty} dx e^{-x^2} \right)^3 = \left(\frac{m}{2\beta\pi} \right)^{\frac{3}{2}} \frac{L^3}{\hbar^3} = \left(\frac{m}{2\beta\pi\hbar^2} \right)^{\frac{3}{2}} V \; . \end{aligned} \tag{4.26}$$

Da questo risultato deduciamo che energia media a bassa temperatura tende a:

$$U \to -\frac{d}{d\beta} \left(-3\beta \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \right) = 3 \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \tag{4.27}$$

cioè all'energia dello stato fondamentale della particella nella scatola.

Ad alta temperatura si ha:

$$U \to -\frac{d}{d\beta} \left[\ln V + \frac{3}{2} \left(\ln m - \ln \beta - \ln(2\pi\hbar^2) \right) \right] = \frac{3}{2\beta} = \frac{3}{2} kT \; . \tag{4.28}$$

Questo risultato conferma l'identificazione di β con $\frac{1}{kT}$ perché il sistema in studio corrisponde a un gas perfetto costituito da una sola particella (atomo) la cui energia media al limite classico vale appunto kT in base alla definizione della temperatura termodinamica assoluta .

4.0.13 La pressione e le equazioni di stato

È ben noto che l'equazione di stato di un sistema omogeneo e isotropo stabilisce una relazione fra pressione, volume e temperatura del sistema stesso all'equilibrio.

Discutiamo ora come, data la distribuzione del sistema sugli stati possibili, se ne possa calcolare la pressione.

Il punto di partenza di questo calcolo è un teorema valido in meccanica classica e quantistica che 'e chiamato *teorema adiabatico*. Nella versione quantistica il teorema fa riferimento a un sistema soggetto a una lenta variazione dei parametri, come una particella di massa M in una dimensione fra due pareti riflettenti la cui distanza reciproca cambia percentualmente in modo irrilevante nel tempo $\frac{\hbar}{E_n}$ dove E_n è l'energia del livello occupato. In questa condizione di di lenta variazione dei parametri il teorema adiabatico asserisca che il sistema quantistico tende a matenere invariati i propri numeri quantici. Nell'esempio uni-dimensionale si tratta di n.

Se la distanza L tra le pareti viene ridotta lentamente, in base al teorema adiabatico, l'energia del sistema aumenta secondo la legge $E_n(L) = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{2ML^2}$ (3.89), questo vuol dire che è stato compiuto un lavoro sul sistema pari alla variazione della sua energia e quindi che è esercitata una forza su ciascuna parete riflettente pari a :

$$F(n, L) = -\frac{dE_n(L)}{dL} = \frac{\hbar^2 n^2 \pi^2}{ML^3} \ . \tag{4.29}$$

Se consideriamo il caso tridimensionale di una particella racchiusa in una scatola cubica di volume $V = L^3$, e per cui quindi si ha secondo la (3.93):

$$E_{\vec{n}}(V) = \frac{\hbar^2 |\vec{n}|^2 \pi^2}{2ML^2} = \frac{\hbar^2 |\vec{n}|^2 \pi^2}{2MV^{\frac{2}{3}}} \tag{4.30}$$

possiamo generalizzare la (4.29) sostituendo alla forza la pressione:

$$P(\vec{k}, V) = -\frac{dE_{\vec{k}}(V)}{dV} = \frac{2}{3}\frac{E_{\vec{k}}(V)}{V} \ . \tag{4.31}$$

La scelta di considerare la pressione P invece della forza è, dettata dall'intenzione di trattare il sistema in modo isotropo cioè senza fare riferimento all'orientazione della scatola cubica. La forza si applica in modo eguale sulle tre pareti della scatola ed è proporzionale all'area di ciascuna parete in ragione, appunto, della pressione.

All'equilibrio termico, in cui lo stato i-esimo è occupato con probabilità $P_i = e^{-\beta E_i(V)}$, la pressione si calcola mediando il valore di P_i associato al singolo stato sulla Distribuzione Canonica , e si ottiene di conseguenza:

$$P = -\frac{1}{Z}\sum_i e^{-\beta E_i(V)}\frac{\partial E_i}{\partial V} \ . \tag{4.32}$$

Nel caso di una particella nell scatola cubica, tenendo conto della (4.31) si ha evidentemente:

$$P = \frac{2}{3V} \sum_{k_x,k_y,k_z=0}^{\infty} \frac{e^{-\beta E_{\vec{k}}(V)}}{Z} E_{\vec{k}} = \frac{2U}{3V} \ , \tag{4.33}$$

che rappresenta l'equazione di stato del nostro sistema. Se si tiene conto della (4.28) si ottiene subito

$$P = \frac{kT}{V} \ , \tag{4.34}$$

che coincide con l'equazione di un gas perfetto costituito da un singolo atomo nel volume V.

Tenendo conto della definizione della funzione di partizione Z in (4.16) possiamo tradurre la (4.32) in una formula di validità completamente generale:

$$p = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V} \ . \tag{4.35}$$

Studio di un sistema a tre livelli Per illustrare ulteriormente il metodo di Gibbs verificando in particolare quanto già annunciato e cioè che *funzione molteplicità ha un unico picco intorno al suo massimo la cui larghezza tende a zero a limite di termostato ideale, cioè quando* $\mathcal{N} \to \infty$, partiamo dallo studio di un sistema semplicissimo caratterizzato da tre livelli energetici: $E_1 = 0$, $E_2 = \epsilon$ e $E_3 = 2\epsilon$ corrispondenti ciascuno a un singolo stato microscopico. Sia $\mathcal{U}$ l'energia totale del sistema isolato di $\mathcal{N}$ copie; ovviamente si ha $\mathcal{U} \leq 2\mathcal{N}\epsilon$. La distribuzione delle copie fra gli stati microscopici è assegnata fornendo tre numeri: N_1, N_2, N_3 vincolati da:

$$N_1 + N_2 + N_3 = \mathcal{N} \ , \tag{4.36}$$

e da:

$$N_2\epsilon + 2N_3\epsilon = \mathcal{U} \ . \tag{4.37}$$

La molteplicità della distribuzione vale:

$$M_{(N_i)} \equiv \frac{\mathcal{N}!}{N_1!N_2!N_3!} \ . \tag{4.38}$$

La semplicità del nostro modello è dovuta al fatto che, a causa dei due vincoli l'intera distribuzione è individuata dal valore di uno solo dei tre numeri N_1, N_2 e N_3. Noi scegliamo N_3 parametrizzato come:

$$N_3 = x\mathcal{N} \ .$$

Risolvendo i vincoli sopra descritti si ha;

$$N_2 = \frac{\mathcal{U}}{\epsilon} - 2x\mathcal{N} \equiv (u-2x)\mathcal{N} \ ,$$

dove abbiamo introdotto il simbolo $u \equiv \frac{\mathcal{U}}{\epsilon\mathcal{N}}$ proporzionale all'energia media delle copie ($U = u\epsilon$), e:

$$N_1 = (1-u+x)\mathcal{N}.$$

Dato che le occupazioni N_i sono numeri positivi, osserviamo che x varia fra il più grande tra 0 e $u-1$, e $\frac{u}{2}$. Osserviamo anche che se $u > 1$, $N_3 > N_1$. Dobbiamo escludere a priori questa possibilità perchè, come è evidente dalla espressione della Distribuzione Canonica (4.15) all'equilibrio termodinamico l'occupazione deve diminuire al crescere dell'energia. Si può notare però che esistono situazioni, in particolare nella fisica del LASER, in cui appaiono distribuzioni rovesciate (cioè i livelli più popolati sono quelli di maggiore energia), non si tratta però di stati all'equilibrio termico.

Se, approssimando il limite termodinamico, si sceglie $\mathcal{N}$ molto grande, escludendo distribuzioni di molteplicità trascurabile, si può dire che anche gli N_i sono molto grandi. In queste condizioni è lecito approssimare i fattoriali con la formula di Stirling (4.9) e la formula della molteplicità con:

$$\begin{aligned} M(x) &\simeq c\frac{\mathcal{N}^{\mathcal{N}}}{(x\mathcal{N})^{x\mathcal{N}}((u-2x)\mathcal{N})^{(u-2x)\mathcal{N}}((1-u+x)\mathcal{N})^{(1-u+x)\mathcal{N}}} \\ &= c\left(x^{-x}(u-2x)^{-(u-2x)}(1-u+x)^{-(1-u+x)}\right)^{\mathcal{N}} \ , \end{aligned} \tag{4.39}$$

dove c è una costante irrilevante per le nostre considerazioni.

Il punto importante della nostra analisi è la constatazione che la funzione in parentesi nella (4.39) è positiva nell'intervallo permesso: $0 \leq x \leq \frac{u}{2}$ e ha un unico minimo interno all'intervallo. Per individuarlo si può passare allo studio del logaritmo:

$$\log M(x) \simeq -\mathcal{N}\left(x\log x + (u-2x)\log(u-2x) + (1-u+x)\log(1-u+x)\right) \ ,$$

la cui derivata è

$$(\log M(x))' = -\mathcal{N}\left(\log x - 2\log(u-2x) + \log(1-u+x)\right) \ ,$$

e si annulla quando:

$$x(1-u+x) = (u-2x)^2 \ . \tag{4.40}$$

La (4.40) mostra che, nella distribuzione più probabile, N_2 è media geometrica fra N_1 e N_3. Esiste quindi un numero $z < 1$ per cui $N_2 = zN_1$ e $N_3 = z^2 N_1$. Ricordiamo che la Distribuzione Canonica (4.15) da $z = e^{-\beta\epsilon}$

La (4.40) ha le soluzioni reali

$$x = \frac{1 + 3u \pm \sqrt{(1+3u)^2 - 12u^2}}{6} \ .$$

Quella contenuta nell'intervallo $0 \leq x \leq \frac{u}{2}$ è:

$$x_M = \frac{1 + 3u - \sqrt{(1+3u)^2 - 12u^2}}{6}.$$

Si può calcolare la derivata seconda della molteplicità nel punto x_M usando:

$$M'(x) = -\mathcal{N}\left(\log x - 2\log(u - 2x) + \log(1 - u + x)\right) M(x) \ ,$$

e ovviamente $M'(x_M) = 0$. Si ha subito, tenendo conto della (4.40):

$$\begin{aligned} M''(x_M) &= -\mathcal{N}\left(\frac{1}{x_M} + \frac{4}{u - 2x_M} + \frac{1}{1 + x_M - u}\right) M(x_M) \\ &= -\mathcal{N}\frac{1 + 3u - 6x_M}{(u - 2x_M)^2} M(x_M) \ . \end{aligned} \tag{4.41}$$

Sostituendo il valore di x_M si ha infine:

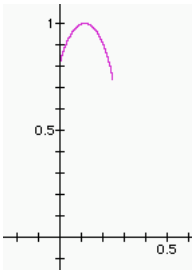
$$\frac{M''(x_M)}{M(x_M)} = -\mathcal{N}\frac{\sqrt{(1+3u)^2 - 12u^2}}{\left(\sqrt{(1+3u)^2 - 12u^2} - 1\right)^2} \leq -2\mathcal{N} \ . \tag{4.42}$$

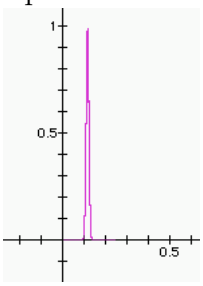
Da ciò, e dalle figure riportate qui di seguito, si vede che la molteplicità M ha un massimo la cui larghezza tende a zero come $\frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}}}$ e quindi, nello stesso limite, la probabilità corrispondente tende a una delta di Dirac:

$$P(x) \equiv \frac{M(x)}{\int_0^{\frac{u}{2}} dy M(y)} \to \delta(x - x_M) \ .$$

Questo conferma che la probabilità combinatoria delle distribuzioni si concentra su quella più probabile. Anche se questa legge presenta eccezioni, per esempio, nel caso specifico dei punti critici (ricordiamo il punto critico liquido vapore),

questo non riguarda i sistemi di cui ci stiamo occupando e quindi identificheremo d'ora in poi la distribuzione di equilibrio con la più probabile.



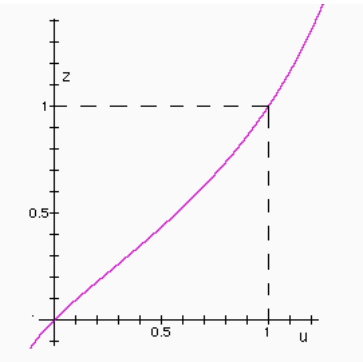


Le figure qui sopra mostrano i grafici della funzione in (4.39) con una scelta arbitraria delle ordinate. Si è scelto $u = \frac{1}{2}$ e si è posto a sinistra $\mathcal{N} = 1$ e a destra $\mathcal{N} = 1000$.

Riferendoci sempre al sistema a tre livelli osserviamo che i rapporti fra le probabilità di occupazione degli stati sono dati da

$$z = e^{-\beta\epsilon} = \frac{x_M}{u - 2x_M} = \frac{\sqrt{1 + 6u - 3u^2} + u - 1}{4 - 2u} \quad (4.43)$$

Il diagramma di z in funzione di u è presentato qui sotto e mostra che nell'intervallo $(0 - 1)$ si ha $0 \leq z \leq 1$. Si ha quindi che $\beta \to \infty$ per $u \to 0$ e $\beta \to 0$ per $u \to 1$.



Esercizi e problemi

1. Avendo a disposizione 4 oggetti distinti e tre contenitori, considerate tutte le possibili distribuzioni degli oggetti nei contenitori, ogni distribuzione essendo individuata dal numero degli oggetti contenuti in ciascun contenitore. Calcolate la molteplicità di ogni distribuzione, pari al numero di modi diversi in cui essa può essere realizzata e la probabilità combinatoria

corrispondente che, come si sa, è proporzionale alla molteplicità.

Soluzione: Vi sono
3 possibili distribuzioni del tipo $(4,0,0)$, ciascuna con molteplicità 1
6 possibili distribuzioni del tipo $(3,1,0)$, ciascuna con molteplicità 4
3 possibili distribuzioni del tipo $(2,2,0)$, ciascuna con molteplicità 6
3 possibili distribuzioni del tipo $(2,1,1)$, ciascuna con molteplicità 12.

2. Il numero intero k assume valori tra 0 e 8 secondo la distribuzione binomiale:
$$P(k) = \frac{1}{2^8}\binom{8}{k} \ .$$
Calcolare il valor medio $\bar{k}$ di k e lo scarto quadratico medio.

Soluzione: $\bar{k} = 4$; $\langle (k-\bar{k})^2 \rangle = 2$

3. Si consideri un sistema a 4 possibili stati enumerati dall'indice $i = 0, 1, 2, 3$ di energia $E_i = \epsilon \cdot i$ con $\epsilon = 10^{-2}$ eV. Il sistema è posto all'equilibrio termico alla temperatura ambiente $T \simeq 300^o$K. Calcolare l'energia media del sistema e la probabilità che il sistema venga a trovarsi nello stato di energia più alta.

Soluzione: $Z = \sum_{i=0}^{3} e^{-\beta\epsilon\cdot i}$; $U = (1/Z)\sum_{i=0}^{3} \epsilon \cdot i e^{-\beta\epsilon\cdot i} \simeq 1.02 \cdot 10^{-2}$eV ; $P_{i=3} = (1/Z)e^{-3\beta\epsilon} \simeq 0.124$.

4. Una molecola biatomica è costituita da due particelle di massa $M = 10^{-27}\ kg$ tenute a distanza fissa $L = 4 \cdot 10^{-10}\ m$. Un insieme di $N = 10^9$ di tali sistemi elementari, non interagenti fra di loro, è tenuto in equilibrio termico alla temperatura $T = 1^o$K. Stimare approssimativamente il numero di sistemi che a un dato istante hanno momento angolare (rispetto al proprio baricentro) non nullo, cioè il numero di molecole che ruotano. Usare il fatto che il numero di stati con momento angolare $n\hbar$ è pari a $2n + 1$.

Soluzione: L'energia rotazionale è quantizzata secondo Bohr, $E_n = n^2\hbar^2/(ML^2) \simeq 3.9{\cdot}10^{-4}n^2$ eV. I livelli rotazionali sono occupati secondo la Distribuzione Canonica con funzione di partizione $Z = \sum_{n=0}^{\infty}(2n+1)e^{-E_n/kT}$. Per $T = 1^o$K, $kT \simeq 0.833 \cdot 10^{-4}$eV, da cui $e^{-E_n/kT} \simeq e^{-4.68n^2} \simeq (9.28 \cdot 10^{-3})^{n^2}$. Ne segue che i termini con $n = 0, 1$ danno da soli un'ottima approssimazione di $Z \simeq 1 + 2.78 \cdot 10^{-2}$. La probabilità che una molecola non ruoti è $1/Z$, il numero di molecole che ruotano è quindi $N(1-1/Z) \simeq 2.8 \cdot 10^7$.

5. Il sistema in studio può trovarsi in 6 stati diversi, lo stato fondamentale con energia nulla, due primi stati eccitati con energia ϵ e tre altri stati con energia 2ϵ. Calcolate come il calore specifico dipende dalla temperatura.

   Soluzione: $Z = 1 + 2e^{-\beta\epsilon} + 3e^{-2\beta\epsilon}$; $U = 2\epsilon\frac{1+3e^{-\beta\epsilon}}{2+e^{\beta\epsilon}+3e^{-\beta\epsilon}}$
   $C(T) = dU/dT = (-1/(kT^2))dU/d\beta = k(\epsilon/kT)^2\frac{6+e^{\beta\epsilon}+3e-\beta\epsilon}{(2+e^{\beta\epsilon}+3e^{-\beta\epsilon})^2}$
   $\lim_{T\to 0} C(T) = \lim_{T\to\infty} C(T) = 0$.

6. Un sistema ammette 4 stati, lo stato fondamentale con energia nulla e tre stati eccitati con la stessa energia ϵ. Discutete la dipendenza dell'energia interna dalla temperatura.

   Soluzione: $Z = 1 + 3e^{-\epsilon/kT}$; $U = \frac{3\epsilon e^{-\epsilon/kT}}{1+3e^{-\epsilon/kT}}$
   $\lim_{T\to 0} U(T) = 0$; $\lim_{T\to\infty} U(T) = (3/4)\epsilon$.

7. Ricordando il principio di equipartizione dell'energia che assegna a ogni grado di liberta corrispondente a un termine quadratico nell'espressione dell'energia un valor medio pari a $\frac{1}{2}kT$ calcolare lo spostamento quadratico medio rispetto alla posizione d'equilibrio di un pendolo semplice di lunghezza $l = 10\ cm$ e massa $m = 10\ g$ alla temperatura $T = 300^o$.

   Soluzione: La variazione dell'energia potenziale del pendolo per piccoli spostamenti $s << l$ vale $\frac{mgs^2}{2l} = \frac{kT}{2}$; risolvendo in base al valore attribuito dal principio di equi-

partizione si trova che il valore quadratico medio dello spostamento vale $\bar{(}s^2) = \frac{kTl}{mg} = 4\ 10{-}20\ m^2$.

8. Una particella di massa nulla è vincolata a muoversi su un segmento di lunghezza L; la funzione d'onda si annulla agli estremi del segmento. Se il sistema è all'equilibrio a temperatura T calcolate l'energia media del sistema e il calore specifico a L costante. Calcolare altresì la forza esercitata dalla particella sugli estremi del segmento all'equilibrio a temperatura T.

   Soluzione: L'energia dello stato generico è data da $E = cp = ch/\lambda$. La condizione di quantizzazione è: $L = n\lambda/2$, dove $n = 1, 2 \cdots$. Quindi $E_n = nc\pi\hbar/L$. La funzione di partizione è dunque: $Z = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta E_n} = 1/(e^{\beta c\pi\hbar/L} - 1)$ da cui l'energia media: $U = -\frac{\partial \log Z}{\partial \beta} = \frac{c\pi\hbar}{L} \frac{1}{1-e^{-c\pi\hbar/LkT}}$, e il calore specifico $C_L = k(c\pi\hbar/LkT)^2 \frac{e^{-c\pi\hbar/LkT}}{(1-e^{-c\pi\hbar/LkT})^2}$, che tende a zero alle basse temperature e a k alle alte, violando l'equipartizione dell'energia.

   L'equazione di stato dedotta usando (4.29) e (4.35) da per la forza: $F = (1/\beta)\frac{\partial \log Z}{\partial L} = U/L$. Alle alte temperature si ritrova la legge dei gas perfetti: $FL = kT$.

9. Considerare un sistema di N particelle distinguibili non interagenti, ciascuna delle quali può occupare due stati, di energia rispettivamente 0 ed $\epsilon = 1$ eV. Il sistema è posto all'equilibrio termico alla temperatura $T = 10$ Kelvin. Calcolare l'energia media e il calore specifico del sistema.

   Soluzione: La funzione di partizione per una sola particella sarebbe $Z_1 = 1 + e^{-\frac{\epsilon}{kT}}$. Quella per N corpi nel caso distinguibile è $Z_N = Z_1^N$. L'energia mediaè $U = \frac{N\epsilon}{1+e^{\frac{\epsilon}{kT}}}$ e il calore specifico: $C = Nk(\frac{\epsilon}{kT})^2 \frac{e^{\frac{\epsilon}{kT}}}{(e^{\frac{\epsilon}{kT}}+1)^2}$.

10. Un sistema è costituito da una particella di massa m soggetta a un potenziale armonico ($V = \frac{k}{2}x^2$) per $x > 0$ e a un potenziale infinito per $x < 0$. Si ha quindi una barriera riflettente nell'origine e la funzione d'onda deve annullarsi per $x < 0$. Per questo sistema in equilibrio termico a temperatura T calcolare energia media e calore specifico

    Soluzione: I livelli energetici del sistema sono quelli di un oscillatore armonico con funzione d'onda dispari: $E_n = (2n+\frac{3}{2})\hbar\omega$, con $n = 0, 1, ..$ quindi la funzione di partizio-

ne vale: $Z = \frac{e^{-\frac{3\beta\hbar\omega}{2}}}{1-e^{-2\beta\hbar\omega}}$, l'energia media $U = \frac{3\hbar\omega}{2} + \frac{2\hbar\omega}{e^{2\beta\hbar\omega}-1}$ e $C = k(2\beta\hbar\omega)^2 \frac{e^{2\beta\hbar\omega}}{(e^{2\beta\hbar\omega}-1)^2}$.

11. Una particella di massa m si muove nel piano $x-y$ nel potenziale $V(x,y) = m(\omega_x^2 x^2/2 + \omega_y^2 y^2/2)$, si tratta cioè di un potenziale armonico non isotropo. I livelli energetici della particella sono in pratica identici a quelli di un sistema di due distinte particelle che si muovono ciascuna in una dimensione in due distinti potenziali armonici, uno di pulsazione ω_x e uno di pulsazione ω_y. Le due pulsazioni sono tali che $\omega_y \gg \omega_x$. Il sistema è posto all'equilibrio termico a temperatura T. Calcolare il calore specifico e studiarne l'andamento nei tre regimi $kT \ll \hbar\omega_x$, $\hbar\omega_x \ll kT \ll \hbar\omega_y$ e $kT \gg \hbar\omega_y$.

    Soluzione: La funzione di partizione si scrive come il prodotto di due funzioni di partizione relative a due oscillatori armonici di frequenze ω_x e ω_y. Quindi l'energia interna e il calore specifico saranno la somma dei rispettivi per i singoli oscillatori. In particolare:

$$C = \frac{(\hbar\omega_x)^2}{kT^2} \frac{e^{\beta\hbar\omega_x}}{(e^{\beta\hbar\omega_x}-1)^2} + \frac{(\hbar\omega_y)^2}{kT^2} \frac{e^{\beta\hbar\omega_y}}{(e^{\beta\hbar\omega_y}-1)^2}$$

    Nel primo regime entrambi i termini sono esponenzialmente soppressi

$$C \simeq \frac{(\hbar\omega_x)^2}{kT^2} e^{-\beta\hbar\omega_x} + \frac{(\hbar\omega_y)^2}{kT^2} e^{-\beta\hbar\omega_y}$$

    nel secondo regime il primo oscillatore si comporta già in modo classico

$$C \simeq k + \frac{(\hbar\omega_y)^2}{kT^2} e^{-\beta\hbar\omega_y}$$

    e infine nel terzo regime entrambi gli oscillatori si comportano in modo classico $C \simeq 2k$.

4.0.14 La distribuzione Gran Canonica e il gas perfetto

Il gas perfetto quantistico viene schematizzato con un gran numero di atomi, molecole, o più in generale particelle, della stessa specie di cui si trascura l'interazione reciproca, ma soggetto a forze esterne. Per esempio potremo considerare gas di particelle attratte elasticamente da un punto fisso o invece un gas contenuto in una scatola a pareti riflettenti. Noi svilupperemo in dettaglio

i calcoli in quest'ultimo caso che ha maggior interesse applicativo, ma il lettore è invitato a riflettere sulle ovvie generalizzazioni dei risultati al caso di forze esterne di altro tipo.

Trascurando gli inevitabili urti, lo stato di ogni particella nella scatola a pareti riflettenti viene descritto in termini dei livelli indicati a pagina 37 del capitolo di Meccanica Ondulatoria.

La classificazione degli stati pone un problema che non si è affrontato quando ci si è occupati di particelle singole. Si tratta del problema dell'*indis-tinguibilità quantistica* e della conseguente scelta statistica. Il principio d'inde-terminazione contrasta col concetto di traiettoria e di legge oraria di una particella. Se la particella viene localizzata con buona precisione a un certo istante la sua velocità resta altamente indeterminata e quindi la sua posizione, dopo un certo intervallo di tempo potrà variare in un volume assai ampio. Se abbiamo due particelle identiche che vengono localizzate accuratamente a un certo istante $t$nelle vicinanze dei punti $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$, le posizioni successive saranno distribuite in modo largamente casuale. Quindi, osservando le posizioni al tempo $t + \Delta t$ non potremo decidere quale, tra le due localizzazioni osservate corrisponde alla particella inizialmente in $\vec{r}_1$ e quale all'altra.

Si ha una densità di probabilità di doppia localizzazione simultanea delle due particelle $\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ nei due punti $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$, che, essendo le particelle indistinguibili, deve necessariamente essere una funzione simmetrica per scambio:

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \rho(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \ . \tag{4.44}$$

In altri termini gli indici 1 e 2 indicano i due punti in cui si localizzano simultaneamente le due particelle, ma non individuano in alcun modo a quale particella si faccia riferimento.

Se consideriamo che, anche nel caso di due particelle, deve valere la relazione ben nota tra densità di probabilità e funzione d'onda:

$$\rho(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = |\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)|^2 \ ,$$

troviamo subito, tenendo conto della (4.44), che:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = e^{i\phi} \, \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \ ,$$

dove ϕ non può dipendere dalle posizioni perchè questo cambierebbe l'energia dello stato corrispondente. Ripetendo due volte lo scambio si vede subito che

$e^{2i\phi} = 1$, cioè $e^{i\phi} = \pm 1$. Dunque si deve concludere che in generale la funzione d'onda di due particelle identiche soddisfa la relazione di simmetria:

$$\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \pm\, \psi(\vec{r}_2, \vec{r}_1) \ . \tag{4.45}$$

Dato che l'identità tra le particelle è equivalente all'invarianza dell'equazione di Schrödinger sotto lo scambio delle coordinate, la (4.45) costituisce un'ulteriore applicazione del principio di simmetria introdotto nel capitolo 4.6.

Generalizzando l'argomento a più di due particelle si può vedere che la scelta del segno deve essere la stessa per tutte le coppie di particelle identiche della stessa natura. Si ha il segno positivo per i fotoni, per gli atomi di idrogeno e di elio, per le molecole biatomiche formate da atomi identici e per molte altre particelle; numerose sono anche le particelle per cui il segno è negativo, fra esse primeggiano per importanza elettroni, protoni e neutroni. In generale si associa il nome di *bosoni* alle particelle del primo tipo e di *fermioni* a quelle del secondo. Un teorema generale assicura che sono fermioni le particelle con spin S semintero, bosoni quelle con spin intero.

Tornando a considerare i livelli di un sistema costituito da due particelle in una scatola a pareti riflettenti, essi sono dati dalla formula ricavata nel capitolo precedente:

$$E = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\left[k_{x,1}^2 + k_{y,1}^2 + k_{z,1}^2 + k_{x,2}^2 + k_{y,2}^2 + k_{z,2}^2\right] \ , \tag{4.46}$$

e quindi gli stati corrispondenti sono individuati da due vettori (*vettori d'onda*) a componenti intere e non negative $\vec{k}_1$ e $\vec{k}_2$ ed eventualmente dagli stati di spin s_1 e s_2 delle due particelle.

Se consideriamo la funzione d'onda di una particella nella scatola data da (3.91) indicandola con $\psi_{\vec{k}}(\vec{r})$ (ponendo $\vec{k} = \frac{\vec{n}\pi}{L}$), la funzione d'onda complessiva delle due particelle: $\psi(\vec{r}_1\ , \vec{r}_2\ , \sigma_1, \sigma_2)$ dovrebbe corrispondere al prodotto $\psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1)\psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2)\delta_{s_1,\sigma_1}\delta_{s_2,\sigma_2}$, ma evidentemente la condizione (4.45) impone la (anti)-simmetrizzazione dela funzione che diventa:

$$\psi(\vec{r}_1\ , \vec{r}_2\ , \sigma_1, \sigma_2) = N[\psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_1)\psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_2)\delta_{s_1,\sigma_1}\delta_{s_2,\sigma_2} \pm \psi_{\vec{k}_2}(\vec{r}_1)\psi_{\vec{k}_1}(\vec{r}_2)\delta_{s_1,\sigma_2}\delta_{s_2,\sigma_1}] \ . \tag{4.47}$$

Questa considerazione conduce a un paradosso se le due funzioni d'onda coincidono e le particelle sono fermioni nello stesso stato di spin, Supponiamo, per esempio di voler inserire due elettroni, entrambi con lo spin in su $(+\frac{1}{2})$, nello stato fondamentale, con funzione d'onda $\psi_{\vec{k}_0}(\vec{r})$; per il primo elettrone la funzione d'onda è: $\psi_{\vec{k}_0}(\vec{r}_1)\ \delta_{\sigma_1,+\frac{1}{2}}$, quella del secondo: $\psi_{\vec{k}_0}\vec{r}_2)\ \delta_{\sigma_2,+\frac{1}{2}}$, la funzione

d'onda complessiva $\psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \sigma_1, \sigma_2)$ si ottiene antisimmetrizzando il prodotto di quelle dei singoli elettroni: $\psi_0(\vec{r}_1)\ \psi_0(\vec{r}_2)\ \delta_{\sigma_1,+\frac{1}{2}}\ \delta_{\sigma_2,+\frac{1}{2}}$, ma questo da evidentemente zero. Questa considerazione conduce a un paradosso se i due vettori d'onda coincidono e le particelle sono fermioni nello stesso stato di spin, cioè se la funzione d'onda ha un'unica componente a valore complesso. Infatti in questo caso lo scambio dei vettori d'onda agisce sulla funzione d'onda in modo banale, ma deve cambiarne il segno. L'unica possibile soluzione del paradosso è il *Principio di Esclusione di Pauli* che vieta l'esistenza di due fermioni identici nello stesso stato.

L'identificazione degli stati di due particelle ottenibili l'uno dall'altro scambiando i vettori d'onda e spin suggerisce di non costruire gli stati associando vettori d'onda e spin alle particelle, ma di limitarsi a indicare quali fra i vettori d'onda e gli stati di spin appaiono nella funzione d'onda del sistema, cioè sono *occupati* e quante volte lo sono se si tratta di bosoni. Si introduce quindi per identificare uno stato microscopico una funzione *numero d'occupazione* del vettore d'onda e dello stato di spin che assume valori interi non negativi nel caso bosonico e 0 o 1 in quello fermionico.Per esempio lo stato con funzione d'onda (4.47) corrisponde alla funzione numero d'occupazione: $n_{\vec{k}\ ,\sigma} = \delta_{\vec{k},\vec{p}_1}\delta_{\sigma,s_1} + \delta_{\vec{k},\vec{p}_2}\delta_{\sigma,s_2}$.

Il caso dei fermioni. Partendo da quanto detto sopra circa le particelle quantistiche identiche identifichiamo il sistema in studio con un gas di N particelle con spin $\frac{1}{2}$ poste in una scatola cubica a pareti riflettenti di spigolo L. Naturalmente, seguendo il metodo di Gibbs, porremo la scatola a contatto termico con $\mathcal{N}$ scatole identiche.

Il generico microstato del nostro gas che nella costruzione di Gibbs abbiamo indicato con i è individuato assegnando la successione dei numeri d'occupazione $\{n_{\vec{k},\sigma}\}$ per tutti i valori del vettore d'onda $\vec{k}$ e dello spin $\sigma = \pm\frac{1}{2}$ vincolati da:

$$\sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma} = n\ . \tag{4.48}$$

L'energia del corrispondente microstato è data da:

$$E_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}} = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right) n_{\vec{k},\sigma} \equiv \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} k^2 n_{\vec{k},\sigma}\ . \tag{4.49}$$

Si noti che i numeri d'occupazione $n_{\vec{k},\sigma}$ si riferiscono alle particelle presenti nello stato specificato e non vanno confusi con i numeri che descrivono la distribuzione delle copie del sistema in studio nel metodo di Gibbs.

La funzione di partizione del nostro gas è dunque data da:

$$Z = \sum_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}:\sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma}=n} e^{-\beta E_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}}} = \sum_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}:\sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma}=n} e^{-\beta \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2} k^2 n_{\vec{k},\sigma}}$$

$$= \sum_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}:\sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma}=n} \prod_{\vec{k},\sigma} e^{-\frac{\beta\hbar^2\pi^2}{2mL^2} k^2 n_{\vec{k},\sigma}} \ . \tag{4.50}$$

Evidentemente il calcolo della funzione di partizione è notevolmente complicato dal vincolo (4.48) senza il quale la sommatoria nell'ultima espressione in (4.50) si fattorizzerebbe nel prodotto delle somme sui numeri d'occupazione nei singoli stati $\vec{k}, \sigma$.

È possibile superare questa difficoltà ricorrendo all'artificio di lasciare fluttuare il numero delle particelle contenute nella scatola vincolando soltanto il numero totale n_{tot} di quelle presenti nel macro-sistema formato da $\mathcal{N}$ copie del volume di gas considerato. Al posto del numero n delle particelle contenute nel gas apparirà nei calcoli il numero medio: $\bar{n} \equiv \frac{n_{tot}}{\mathcal{N}}$. Evidentemente il nostro artificio si basa sul fatto, ormai acclarato, che la probabilità combinatoria delle distribuzioni si concentra sulla distribuzione più probabile, le fluttuazioni sono trascurabili e quindi il numero delle particelle contenute dal singolo sistema non fluttua apprezzabilmente rispetto al valore medio $\bar{n}$.

Questo implica però il passaggio dalla Distribuzione Canonica a quella *Gran Canonica*. In sostanza, oltre che accoppiare debolemente fra loro i sistemi vicini permettendo scambi di energia, consideriamo le pareti riflettenti che contengono il nostro gas un poco permeabili, permettendo con ciò una piccola probabilità di passaggio (effetto tunnel) delle particelle delle diverse specie costituenti il sistema in studio da ciascun sistema ai suoi vicini. La Distribuzione Gran Canonica si riferisce nel caso generale a sistemi formati da particelle di specie diverse, però per semplicità noi limitiamo i nostri calcoli al caso di una sola specie.

Ripercorrendo la costruzione delineata nel capitolo (1,2), osserviamo che il generico stato del sistema in studio, che indichiamo ancora con i, è caratterizzato, oltre che dalla sua energia E_i, anche dal numero di particelle n_i. Si cerca dunque la distribuzione di massima molteplicità:

$$M\left(\{N_i\}\right) = \frac{\mathcal{N}!}{\prod_i N_i!}$$

vincolata dal numero dei sistemi considerati ((4.36), (**??**)), cioè da:

$$\sum_i N_i = \mathcal{N} \ , \tag{4.51}$$

dall'energia totale (4.37), cioè:

$$\sum_i N_i E_i = U\mathcal{N} \tag{4.52}$$

e dal numero totale di particelle di ciascuna specie. Nal caso specifico di un gas puro, cioè di particelle di una sola specie, si ha un unico ulteriore vincolo riferito alla specie stessa:

$$\sum_i n_i N_i = \bar{n}\ \mathcal{N}\ . \tag{4.53}$$

Applicando il metodo dei moltiplicatori di Lagrange, come nella costruzione della Distribuzione Canonica, otteniamo in modo del tutto analogo alla (4.12):

$$\log\ p_i = -1 + \gamma - \beta\,(E_i - \mu n_i)\ \ , \tag{4.54}$$

dove abbiamo introdotto il moltiplicatore di Lagrange $\beta\mu$ associato al vincolo (4.53). Sempre in completa analogia col caso canonico otteniamo la probabilità nella Distribuzione Gran Canonica:

$$p_i = \frac{e^{-\beta(E_i-\mu n_i)}}{\sum_j e^{-\beta(E_j-\mu n_j)}} \equiv \frac{e^{-\beta(E_i-\mu n_i)}}{\Xi}\ , \tag{4.55}$$

dove abbiamo implicitamente definito Ξ, la funzione di partizione gran canonica.

Tenendo conto dei casi già discussi e delle strette analogie fra le Distribuzioni Canoniche e Gran Canoniche, penso che basti osservare che, come l'equilibrio negli scambi energetici (termodinamico) impone l'eguaglianza fra i moltiplicatori β dei sistemi, così quello nello scambio di particelle delle varie specie presenti (chimico) impone l'eguaglianza del moltiplicatore μ, *potenziale termodinamico* relativo a ciascuna specie.

Il potenziale chimico può essere calcolato tramite l'espressione per il numero medio di particelle:

$$\bar{n} = \sum_i n_i p_i = \sum_i n_i \frac{e^{-\beta(E_i-\mu n_i)}}{\Xi}\ . \tag{4.56}$$

Ora possiamo tornare allo studio del gas perfetto fermionico. La funzione di partizione gran canonica si scrive:

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}} e^{-\beta\left(E_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}}-\mu\sum_{\vec{k},\sigma} n_{\vec{k},\sigma}\right)} = \sum_{\{n_{\vec{k},\sigma}\}} e^{-\beta\sum_{\vec{k},\sigma}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}k^2-\mu\right)n_{\vec{k},\sigma}} \\ &= \prod_{\vec{k},\sigma}\left(\sum_{n_{\vec{k},\sigma}=0}^{1} e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}k^2-\mu\right)n_{\vec{k},\sigma}}\right) = \prod_{\vec{k},\sigma}\left(1+e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}k^2-\mu\right)}\right)\ .\end{aligned} \tag{4.57}$$

Di conseguenza, in base alla (4.55), la probabilità relativa al microstato definito dai numeri d'occupazione $\{n_{\vec{k},\sigma}\}$ è data da:

$$p\left(\{n_{\vec{k},\sigma}\}\right) = \frac{e^{-\beta\sum_{\vec{k},\sigma}\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)n_{\vec{k},\sigma}}}{\Xi} = \prod_{\vec{k},\sigma}\left(\frac{e^{-\beta n_{\vec{k},\sigma}\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}}{1+e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}}\right) , \tag{4.58}$$

che, come si vede, fattorizza nel prodotto delle probabilità relative agli stati di singola particella: $p\left(\{n_{\vec{k},\sigma}\}\right) = \prod_{\vec{k},\sigma} p\left(n_{\vec{k},\sigma}\right)$ con:

$$p\left(n_{\vec{k},\sigma}\right) = \frac{e^{-\beta n_{\vec{k},\sigma}\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}}{1+e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}} . \tag{4.59}$$

Usando questo risultato è facile ricavare i numeri medi di occupazione sui singoli stati detta *distribuzione di Fermi*:

$$\bar{n}_{\vec{k},\sigma} = \sum_{n_{\vec{k},\sigma}=0}^{1} n_{\vec{k},\sigma} p\left(n_{\vec{k},\sigma}\right) = \frac{e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}}{1+e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}} = \frac{1}{1+e^{\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}} . \tag{4.60}$$

Questo risultato è subito generalizzato a fermioni soggetti a un campo di forze esterne in cui ogni singola particella possa occupare livelli individuati da uno o più indici α con energie E_α. Avremo infatti che, nel caso di fermioni, il numero medio di occupazione dello stato α è dato da:

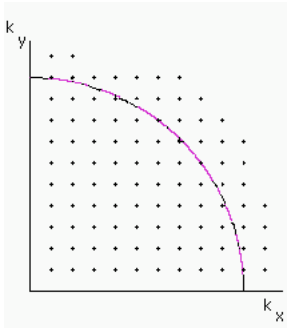
$$\bar{n}_\alpha = \frac{1}{1+e^{\beta(E_\alpha-\mu)}} . \tag{4.61}$$

Evidentemente il potenziale chimico va calcolato usando la (4.56) che alla luce delle (4.61) e (4.60) si scrive nella forma:

$$\bar{n} = \sum_\alpha \frac{1}{1+e^{\beta(E_\alpha-\mu)}} = \sum_{\vec{k},\sigma} \frac{1}{1+e^{\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}} . \tag{4.62}$$

Per utilizzare questa formula è conveniente contare gli stati $\vec{k},\sigma$ in funzione della loro energia trasformando la somma sugli indici di stato in una somma sulle energie. Per questo ricordiamo che gli stati di una particelle in una scatola cubica a pareti riflettenti corrispondono ai vertici di un reticolo formato dai

vettori d'onda $\vec{k}$. In figura qui di seguito viene rappresentato il reticolo degli stati nel caso bidimensionale.



Si vede subito che, a meno di piccole correzioni dovute alla discontinuità della distribuzione dei vertici del reticolo, il numero degli stati occupati con energia inferiore a E vale:

$$n_E = \frac{2}{8}\frac{4\pi\left(\frac{\sqrt{2mE}L}{\pi\hbar}\right)^3}{3} = \frac{\left(\frac{\sqrt{2m}L}{\hbar}\right)^3}{3\pi^2}E^{\frac{3}{2}} \ , \quad (4.63)$$

che è pari al volume della sfera di raggio:

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

diviso per il numero dei settori (che sono 8) e moltiplicato per il numero degli stati di spin (che sono 2).

L'approssimazione che abbiamo applicato sopra, che, fissata la densità, è tanto più valida quanto più grande è il volume L^3, consiste nel considerare gli stati distribuiti in funzione della loro energia in modo continuo, anzichè discreto. Su questa base possiamo calcolare la densità degli stati in funzione dell'energia :

$$\frac{dn_E}{dE} = \frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E} \ . \quad (4.64)$$

Possiamo quindi dedurre dalla (4.60) la distribuzione delle particelle in funzione della loro energia:

$$\frac{d\bar{n}(E)}{dE} = \frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\frac{\sqrt{E}}{1+e^{\beta(E-\mu)}} \ . \quad (4.65)$$

e sostituire la (4.62) con l'equazione:

$$\bar{n} = \int_0^\infty \frac{d\bar{n}(E)}{dE}dE = \int_0^\infty dE\frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\frac{\sqrt{E}}{1+e^{\beta(E-\mu)}} \ . \quad (4.66)$$

La (4.65) ha un significato assai semplice nel limite $T \to 0$ cioè quando $\beta \to \infty$. Infatti in questo limite l'esponenziale nel denominatore diverge per tutti gli stati di singola particelle la cui energia supera μ. Quindi l'occupazione di questi stati si annulla. Per gli stati invece la cui energia è inferiore al potenziale

chimico l'esponenziale si annulla e il numero d'occupazione vale 1. Quindi il potenziale chimico nel limite di bassa temperatura, che è chiamato energia di Fermi (E_F), si calcola tramite:

$$n_{E_F} = \frac{\left(\frac{\sqrt{2m}L}{\hbar}\right)^3}{3\pi^2} E_F^{\frac{3}{2}} = \bar{n} \ , \tag{4.67}$$

da cui, risolvendo in E_F si ottiene:

$$E_F = \mu|_{T=0} = \frac{\hbar^2}{2m}\left(3\pi^2\rho\right)^{\frac{2}{3}} \ , \tag{4.68}$$

dove $\rho = \frac{\bar{n}}{L^3}$ è la densità del gas.

Nel limite opposto in cui T diventa grande ($\beta \to 0$) osserviamo che μ deve tendere a $-\infty$. Infatti, se μ rimanesse finito al limite $\beta \to 0$, il prodotto $\beta\mu$ che appare nella (4.66) potrebbe essere trascurato, si avrebbe quindi:

$$\bar{n} = \frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty dE \frac{\sqrt{E}}{1+e^{\beta E}} = \frac{\sqrt{2(mkT)^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{1+e^x} \to \infty \ , \tag{4.69}$$

che è evidentemente assurda perchè $\bar{n}$ è stato fissato a priori.

Dunque alle alte temperature μ deve tendere a $-\infty$, l'esponenziale nel denominatore della (4.60) domina rispetto a 1 e quindi la (4.65) è ben approssimata da:

$$\frac{d\bar{n}(E)}{dE} = \frac{\left(\frac{\sqrt{2m}L}{\hbar}\right)^3}{2\pi^2}\sqrt{E}e^{-\beta(E-\mu)} \equiv AL^3\sqrt{E}e^{-\beta E} \ . \tag{4.70}$$

La costante A, e quindi μ, possono essere calcolati tramite l'equazione:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty AL^3\sqrt{E}e^{-\beta E}dE &= 2AL^3\int_0^\infty x^2 e^{-\beta x^2}dx = -2AL^3\frac{d}{d\beta}\int_0^\infty e^{-\beta x^2}dx \\ &= -AL^3\frac{d}{d\beta}\int_{-\infty}^\infty e^{-\beta x^2}dx = -AL^3\frac{d}{d\beta}\sqrt{\frac{\pi}{\beta}} = \frac{AL^3}{2}\sqrt{\frac{\pi}{\beta^3}} = \bar{n} \ .\end{aligned} \tag{4.71}$$

Si ha dunque: $A = 2\rho\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}} = \frac{\sqrt{2m^3}}{\pi^2\hbar^3}e^{\beta\mu}$ che conferma il tendere a $-\infty$ di μ al tendere a zero di β ($\mu \sim \frac{\log\beta}{\beta}$).

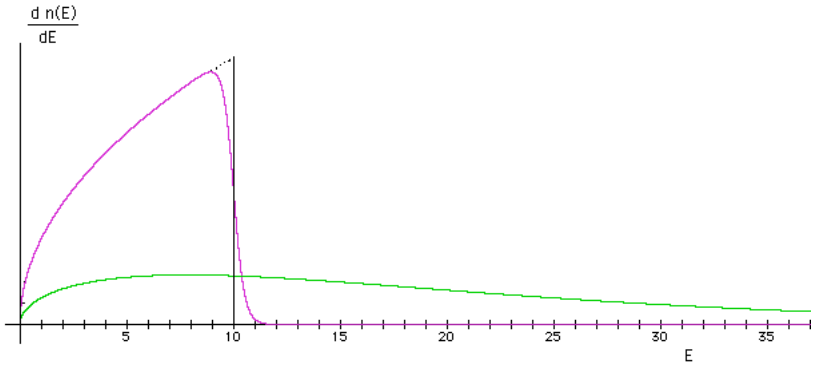
È notevole il fatto che nel limite considerato, in cui la distribuzione delle particelle in funzione dell'energia è data:

$$\frac{d\bar{n}(E)}{dE} = 2\rho\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}L^3\sqrt{E}e^{-\beta E} \ , \tag{4.72}$$

la costante di Planck è scomparsa dalle formule. Se di conseguenza attribuiamo all'energia delle particelle il valore classico $E = \frac{mv^2}{2}$ possiamo trovare la legge di distribuzione delle velocità corrispondente alla (4.70):

$$\frac{d\bar{n}(v)}{dv} \equiv \frac{d\bar{n}(E)}{dE}\frac{dE}{dv} = \rho\sqrt{\frac{2m^3\beta^3}{\pi}}L^3v^2e^{-\beta\frac{mv^2}{2}} \ . \tag{4.73}$$

Se si sostituisce β con $\frac{1}{kT}$ la (4.73) riproduce la ben nota distribuzione delle velocità di Maxwell . Questo risultato conferma l'identificazione di β che avevamo dedotto precedentemente.



La figura qui sopra riproduce l'andamento della (4.65) per tre valori diversi di kT, e precisamente per $kT = 0,\ 0.25$ e $12,5$ nella scala di energie indicata. Come si vede chiaramente le due curve a bassa temperatura mostrano prevalere saturazione degli stati con energia piccola in contrasto con la terza curva che riproduce un tratto della distribuzione di Maxwell e corrisponde a piccoli numeri d'occupazione.

Usando la (4.65) possiamo ricavare l'energia media U del gas:

$$U = \int_0^\infty E\frac{d\bar{n}(E)}{dE}dE = \frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{E^3}}{1+e^{\beta(E-\mu)}}dE \ , \tag{4.74}$$

ottenendo, nel limite di bassa temperatura:

$$U = \frac{\sqrt{8m^3}L^3}{5\pi^2\hbar^3}E_F^{\frac{5}{2}} = \frac{(3\bar{n})^{\frac{5}{3}}\pi^{\frac{2}{3}}\hbar^2}{10mL^2} = \frac{(3\bar{n})^{\frac{5}{3}}\pi^{\frac{2}{3}}\hbar^2}{10mV^{\frac{2}{3}}} \ , \tag{4.75}$$

dove abbiamo introdotto il volume del gas: $V = L^3$.

Alle alte temperature si ha invece:

$$U = 2\rho\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}L^3\int_0^\infty E^{\frac{3}{2}}e^{-\beta E}dE = 4\rho\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}L^3\int_0^\infty x^4 e^{-\beta x^2}dx$$
$$= \frac{3}{2}\bar{n}\sqrt{\frac{\beta^3}{\pi}}\sqrt{\frac{\pi}{\beta^5}} = \frac{3}{2\beta}\bar{n} \equiv \frac{3}{2}\bar{n}kT \ . \tag{4.76}$$

Questo risultato riproduce quanto previsto dalla teoria cinetica classica e in particolare il calore specifico per grammo atomo a volume costante: $C_V = \frac{3}{2}kN_A \equiv \frac{3}{2}R$.

Per il calcolo del calore specifico si può procedere dalla (4.74) derivando rispetto a T e ottenendo:

$$C = k\beta^2\frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\int_0^\infty \frac{\sqrt{E^3}(E-\mu)\ e^{\beta(E-\mu)}}{(1+e^{\beta(E-\mu)})^2}dE \ . \tag{4.77}$$

Per grandi valori di β il fattore esponenziale a numeratore rende trascurabili i contributi all'integrale provenienti da $E << \mu$. Questo permette di sviluppare in serie di Taylor gli integrandi in (4.66) e (4.77). effettuando lo sviluppo in (4.66) e clcolando gli integrali si vede che $\mu = E_F - O(\beta^{-2})$. Quindi al primo ordine in T E_F e μ coincidono. Per vlutare i contributi di ordine T nella (4.77) sviluppiamo in serie di Taylor sotto integrale e, tenendo conto della (4.67), scriviamo:

$$C \simeq k\beta^2\frac{3\bar{n}}{8E_F^{\frac{3}{2}}}\int_{-\infty}^\infty \frac{\sqrt{E^3}(E-E_F)}{(\cosh\frac{\beta(E-E_F)}{2})^2}dE \simeq k\beta^2\frac{3\bar{n}}{8}\int_{-\infty}^\infty \frac{(E-E_F)}{(\cosh\frac{\beta(E-E_F)}{2})^2}dE$$
$$+k\beta^2\frac{9\bar{n}}{16E_F}\int_{-\infty}^\infty \frac{(E-E_F)^2}{(\cosh\frac{\beta(E-E_F)}{2})^2}dE = k\bar{n}\frac{9kT}{2E_F}\int_{-\infty}^\infty \left(\frac{x}{\cosh x}\right)^2 dx$$
$$= k\bar{n}\frac{3\pi^2 kT}{4E_F} \ , \tag{4.78}$$

che evidenzia il termine lineare nel calore specifico a bassa temperatura. Peraltro il fatto che, a bassa temperatura, il calore specifico cresce linearmente, può essere facilmente capito esaminando la rappresentazione della (4.65) mostrata nella figura e in particolare tenendo conto del fatto che a bassa temperatura le particelle tendono a occupare tutti gli stati di energia più bassa saturando il limite imposto dal principio d'esclusione di Pauli. Infatti in queste condizioni le particelle hanno difficoltà a scambiare energia con l'esterno perchè scambi energetici dell'ordine di kT comporterebbero prevalentemente transizioni a stati già

occupati. Riferendoci alla curva a $kT = 0.25$ nelle unità indicate in figura, solo le particelle che occupano gli stati con energia compresa in un intervallo kT intorno a 10, dove l'occupazione scende rapidamente, possono scambiare energia con l'esterno e quindi forniscono al calore specifico un contributo dell'ordine di k per particella. Si ha dunque per grammo atomo l'ordine di R moltiplicato per $\frac{kT}{E_F}$ come infatti risulta dal calcolo esatto.

Evidentemente ci si deve aspettare che i risultati ottenuti si applichino agli elettroni della banda di conduzione in un metallo. Gli elettroni essendo carichi scambiano forze coulombiane repulsive e quindi non parrebbero a prima vista ben rappresentati da un gas di fermioni indipendenti; tuttavia la forza coulombiana è in parte schermata dalle cariche presenti per cui non ha effetti qualitativi notevoli alle basse energie. Applicando la nostra trattazione agli elettroni di conduzione in un metallo, ricordiamo che si ha un elettrone conduttore per ogni atomo. Per esempio nel caso del ferro, che ha densità circa $\rho \simeq 5\ 10^3\ Kg/m^3$ e peso atomico circa $A \simeq 50$ la densità elettronica risulta: $\frac{\bar{n}}{V} = \rho \frac{N_A}{A} 10^3 \sim 6\ 10^{28} particelle/m^3$. Usando la (4.68) si ottiene allora: $E_F \simeq \frac{10^{-68}}{1.8\ 10^{-30}} (3\pi^2 6\ 10^{28})^{\frac{2}{3}}\ Joule \simeq 10^{-18}\ Joule \simeq 6\ eV$. Ricordando che a temperatura ambiente $kT \simeq 2.5\ 10^{-2}\ eV$ si vede subito che l'ordine di grandezza del contributo al calore specifico per grammo atomo dovuto agli elettroni è $2\ 10^{-2} R$ da confrontarsi con $3R$ dovuto agli atomi secondo la legge di Dulong e Petit. Senza tener conto degli effetti quantistici e applicando il principio di equi-partizione dell'energia si avrebbe invece per gli elettroni un contributo di $\frac{3}{2}R$. Abbiamo una ulteriore conferma della rilevanza degli effetti quantistici per gli elettroni nella materia.

Tornando alla trattazione generale, per ricavare l'equazione di stato possiamo ricorrere alla formula (4.35) ricordando che l'energia del generico microstato è data dalla (4.49) da cui si ha subito: $\frac{\partial E_i}{\partial V} = -\frac{2E_i}{3V}$. Si ha dunque:

$$pV = \frac{2}{3} U \ , \tag{4.79}$$

che alle alte temperature, dove vale la (4.76), riproduce chiaramente la legge dei gas perfetti .

Il gas perfetto di Bose-Einstein Per completare il nostro programma consideriamo un gas di atomi senza spin e quindi bosoni; come riferimento fenomenologico possiamo pensare a un gas monoatomico nobile come l'elio. A parte l'assenza dello spin, la trattazione che ha introdotto la statistica di Fermi-Dirac

può essere ripetuta senza varianti fino al calcolo della funzione di partizione gran canonica. Il lettore è quindi invitato a ripercorrere nel caso bosonico i primi passi della costruzione già descritta per i fermioni giungendo al calcolo della funzione di partizione per cui, nel caso bosonico, si ottiene:

$$\begin{aligned}\Xi &= \sum_{\{n_{\vec{k}}\}} e^{-\beta\left(E_{\{n_{\vec{k}}\}}-\mu\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}}\right)} = \sum_{\{n_{\vec{k}}\}} e^{-\beta\sum_{\vec{k}}\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}k^2-\mu\right)n_{\vec{k}}} \\ &= \prod_{\vec{k}}\left(\sum_{n_{\vec{k}}=0}^{\infty} e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}k^2-\mu\right)n_{\vec{k}}}\right) \\ &= \prod_{\vec{k}} \frac{1}{1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}k^2-\mu\right)}} \ . \end{aligned} \tag{4.80}$$

da cui segue la probabiltà relativa al generico microstato:

$$\begin{aligned} p\left(\{n_{\vec{k}}\}\right) &= \frac{e^{-\beta\sum_{\vec{k}}\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)n_{\vec{k}}}}{\Xi} \\ &= \prod_{\vec{k}}\left(e^{-\beta n_{\vec{k}}\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}\left(1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}\right)\right) \ , \end{aligned} \tag{4.81}$$

che, di nuovo, fattorizza nel prodotto delle probabilità relative agli stati di singola particella:

$$p\left(n_{\vec{k}}\right) = e^{-\beta n_{\vec{k}}\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}\left(1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}\right) \ . \tag{4.82}$$

Possiamo dunque calcolare il numero medio di occupazione sul generico stato $\vec{k}$, cioè la distribuzione di Bose-Einstein:

$$\begin{aligned} \bar{n}_{\vec{k}} &= \sum_{n_{\vec{k}}=0}^{\infty} n_{\vec{k}}\ p\left(n_{\vec{k}}\right) = \left(1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}\right)\sum_{n=0}^{\infty} n\ e^{-\beta n\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)} \\ &= \frac{e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}}{1-e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}} = \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2}-\mu\right)}-1} \ . \end{aligned} \tag{4.83}$$

Di qui si deduce subito che il potenziale chimico non deve superare l'energia minima di singola particella, cioè:

$$\mu \leq 3\frac{\hbar^2\pi^2}{2mL^2}$$

altrimenti l'occupazione media sullo stato fondamentale (di energia minima) diventerebbe negativa. Noi considereremo solo il caso di volumi macroscopici in cui si può considerare nulla l'energia minima di una particella. Quindi per noi il protenziale chimico dovrà essere minore di zero.

Resta da stabilire il valore del potenziale chimico che è determinato dalla relazione:

$$\bar{n} = \sum_{\vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}} = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\beta\left(\frac{\hbar^2\pi^2k^2}{2mL^2} - \mu\right)} - 1} \ . \tag{4.84}$$

Per il calcolo esplicito si usa, come fatto nel caso fermionico, passare alla distribuzione in energia approssimandola con una funzione continua:

$$\frac{d\bar{n}(E)}{dE} = \sqrt{\frac{m^3}{2}} \frac{L^3}{\pi^2\hbar^3} \frac{\sqrt{E}}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} \ . \tag{4.85}$$

Si noti che la (4.85) differisce dall'analoga del caso fermionico (4.65), oltre che per il segno nel denominatore, anche per un fattore $\frac{1}{2}$ globale dovuto dell'assenza del grado di libertà di spin.

Evidentemente l'approssimazione continua per la distribuzione in energia è poco accurata per energie piccole per cui si hanno pochi livelli. Nel caso fermionico in cui il numero d'occupazione non può superare due, il contributo delle piccole energie è trascurabile nei sistemi macroscopici, e quindi l'approssimazione della distribuzione continua risulta applicabile.

Invece la situazione è più complessa nel caso bosonico. Infatti se il potenziale chimico è molto vicino a zero il numero d'occupazione degli stati di piccola energia può essere molto grande e il contributo di questi stati alla somma (4.84) può essere importante.

Escludendo per il momento questa possibilità calcoliamo il potenziale chimico usando la relazione;

$$\bar{n} = \sqrt{\frac{m^3}{2}} \frac{L^3}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dE \frac{\sqrt{E}}{e^{\beta(E-\mu)} - 1} = \sqrt{\frac{(mkT)^3}{2}} \frac{L^3}{\pi^2\hbar^3} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{ze^x - 1} \ , \tag{4.86}$$

dove si è posto $z = e^{-\beta\mu} \geq 1$. Introducendo la densità del gas $\rho \equiv \frac{\bar{n}}{L^3}$ possiamo riscrivere la (4.86) nella forma:

$$\int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{ze^x - 1} = \pi^2\hbar^3\rho \sqrt{\frac{2}{(mkT)^3}} \ . \tag{4.87}$$

Ricordando ora che $z \geq 1$ abbiamo le disuguaglianze:

$$\int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{ze^x - 1} \leq \frac{1}{z} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} \leq \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x}}{e^x - 1} \simeq 2,315 \ . \tag{4.88}$$

sostituendo in (4.87) si ha:

$$T \geq T_c \simeq 4,38 \frac{\hbar^2 \rho^{\frac{2}{3}}}{m \ k} \ . \tag{4.89}$$

Questo risultato va interpretato nel senso che l'approssimazione della distribuzione continua non è applicabile sotto alla temperatura *critica* T_c. Alla luce delle considerazioni sopra esposte questo vuol dire che, se la temperatura si avvicina a quella critica, il potenziale chimico praticamente si annulla e quindi l'occupazione dello stato fondamentale diventa confrontabile con $\bar{n}$ e quindi macroscopica. Per temperature inferiori a quella critica il calcolo del numero totale delle particelle mostrato in (4.86) va riscritto:

$$\bar{n} = \bar{n}_f + \sqrt{\frac{m^3}{2}} \frac{L^3}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^\infty dE \frac{\sqrt{E}}{e^{\beta E} - 1} \ , \tag{4.90}$$

dove $\bar{n}_f$ tiene conto delle particelle che occupano gli stati di energia più bassa, mentre l'integrale della distribuzione continua, in cui abbiamo trascurato μ rende conto delle particelle che occupano gli altri stati. Cambiando variabile sotto integrale si ha:

$$\bar{n} \simeq \bar{n}_f + 2,315 \sqrt{\frac{(mkT)^3}{2}} \frac{L^3}{\pi^2 \hbar^3} \ , \tag{4.91}$$

che mostra che per $T < T_c$, $\bar{n}_f$ assume valori macroscopici, cioè dell'ordine di grandezza del numero di Avogadro N_A.

Questa situazione viene indicata col nome di condensazione di Bose-Einstein. Nella realtà pratica per densità dell'ordine di quelle dei gas ordinari in condizioni normali, cioè $\rho \simeq 10^{25}$ $particelle/m^3$, la temperatura critica risulta dell'ordine del centesimo di Kelvin, un valore per cui le forze interatomicche non sono trascurabili nemmeno per l'elio e quindi l'approssimazione di gas perfetto non è applicabile. Recentemente la condensazione di Bose è stata osservata a temperature dell'ordine del miliardesimo di Kelvin e densità dell'ordine di 10^{15} $particelle/m^3$.

Per temperature molto grandi rispetto a T_c il -1 nel denominatore della distribuzione continua è trascurabile e si ottiene la stessa distribuzione del caso fermionico alle alte temperature cioè la distribuzione di Maxwell.

Un gas di fotoni; il corpo nero Brevemente consideriamo il caso di un campo di radiazione in una scatola a pareti quasi perfettamente riflettenti, cioè idealmente riflettenti a meno degli scambi termici . In termini classici l'ampiezza del campo può essere decomposta in modi normali corrispondenti a valori ben determinati della frequenzae a campi elettrici e magnetici soddisfacienti le note condizioni di riflessione sulla superficie della scatola. I modi in questione, a parte la possibilità di due polizzazioni diverse del campo elettrico, mostrano una dipendenza spaziale del tutto analoga alle possibili funzioni d'onda di una particella in una scatola a pareti riflettenti da in Eq.(3.91) cioè sinusoidi la cui fase, scegliendo l'origine delle coordinate in un vertice della scatola, vale:

$$\frac{\pi}{L}\left(k_x x + k_y y + k_z z - \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}ct\right) \equiv \frac{\pi}{L}\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - kct\right) \ , \tag{4.92}$$

dove, al solito, il vettore $\vec{k}$ ha componenti (k_x, k_y, k_z) intere positive. Si hanno dunque le frequenze:

$$\nu_{\vec{k}} = \frac{c}{2L}\sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2} \ . \tag{4.93}$$

Pertanto, tenendo conto delle due polarizzazioni possibili, il numero dei modi con frequenza inferiore a ν vale:

$$n_\nu = \frac{\pi}{3}|\vec{k}|^3 = \frac{8\pi L^3\nu^3}{3c^3} \ , \tag{4.94}$$

e quindi si ha:

$$\frac{dn_\nu}{d\nu} = \frac{8\pi L^3\nu^2}{c^3} \ . \tag{4.95}$$

Assumendo l'equipartizione dell'energia, cioè un'energia media pari a kT per ogni modo normale Rayleigh e Jeans trovavano per la distribuzione dell'energia del corpo nero in funzione della frequenza, grandezza peraltro facilmente misurabile nel caso di un forno, il valore:

$$\frac{dU(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi kT}{c^3}L^3\nu^2 \ . \tag{4.96}$$

Questo risultato è evidentemente assurdo, perché, integrando sulle frequenze, si otterrebbe un'energia interna infinita.

Storicamente questo paradosso spinse Planck a formulare la prima ipotesi dei quanti di energia, che fu poi riformulata da Einstein assumendo l'esistenza dei fotoni.

Partendo dall'ipotesi di Einstein la (4.95) va interpretata come densità degli stati di un gas di fotoni, bosoni con energia $E = h\nu$. Allora la densità degli stati (4.64) diventa:

$$\frac{dn_E}{dE} = \left(\frac{L}{\hbar c}\right)^3 \frac{E^2}{\pi^2} \ . \tag{4.97}$$

Per un gas di fotoni gli urti con le pareti che termalizzano il sistema corrispondono a processi di riflessione non ideali con possibilità di emissione e assorbimento dei fotoni stessi. Questo significa che nel caso dei fotoni il vincolo (4.53) riguardante il numero totale delle particelle viene meno e quindi la Distribuzione Canonica coincide con quella Gran Canonica in cui il potenziale chimico è nullo.

Pertanto la legge di distribuzione in energia dei fotoni è data da:

$$\frac{dn(E)}{dE} = \left(\frac{L}{\hbar c}\right)^3 \frac{E^2}{\pi^2} \frac{1}{e^{\frac{E}{kT}} - 1} \ . \tag{4.98}$$

Da questa legge possiamo passare a quella di distribuzione in frequenza:

$$\frac{dn(\nu)}{d\nu} = \left(\frac{L}{\hbar c}\right)^3 \frac{(h\nu)^2}{\pi^2} \frac{h}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} = \frac{8\pi}{c^3} L^3 \frac{\nu^2}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \ . \tag{4.99}$$

Infine possiamo ricavare la distribuzione dell'energia portata dalla radiazione in funzione della frequenza moltiplicando ambo i membri della (4.99) per l'energia portata da ciascun fotone ottenendo:

$$\frac{dU(\nu)}{d\nu} = \frac{8\pi h}{c^3} L^3 \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \ . \tag{4.100}$$

Questa distribuzione fu a ricavata per la prima volta da Planck di cui porta il nome.

Si vede subito che per piccole frequenze la distribuzione diventa eguale alla (4.96), mentre alle alte frequenze la quantizzazione dell'energia porta a un fattore di taglio esponenziale e quindi elimina il paradosso dell'energia interna infinita

Esercizi e problemi

1. Considerate un sistema formato da due particelle identiche fermioniche ciascuna delle quali può occupare quattro stati. Elencate tutte le possibili scelte dei numeri d'occupazione delle particelle sugli stati. Supponendo

che le energie di due dei quattro stati siano nulle: $E_1 = E_2 = 0$, e quelle degli altri due stati siano $E_3 = E_4 = \epsilon$, calcolare, in funzione della temperatura, il numero medio di occupazione in uno degli stati con energia nulla.

Soluzione: Si hanno 6 stati diversi del sistema caratterizzati dai numeri d'occupazione sui 4 stati di particella singola (n_1, n_2, n_3, n_4) pari a: $(1,1,0,0)$, $(1,0,1,0)$, $(1,0,0,1)$, $(0,1,1,0)$, $(0,1,0,1)$, $(0,0,1,1)$. Le corrispondenti energie sono: $0,\ \epsilon,\ \epsilon,\ \epsilon,\ \epsilon, 2\epsilon$. Il numero d'occupazione sullo stato 1 di singola particella (n_1) in ciascuno dei quattro stati è: $1,\ 1,\ 1,\quad 0,\ 0,\ 0$. Il suo valor medio è allora $\bar{n}_1 = (1+2e^{-\beta\epsilon})/(1+4e^{-\beta\epsilon}+e^{-2\beta\epsilon})$.

2. Si hanno 4 bosoni identici ciascuno dei quali può occupare tre stati, indicati con 1,2 e 3. Enumerare gli stati possibili del sistema indicando il corrispondente numero d'occupazione. Discutere anche il caso in cui le particelle sono fermioni.

   Soluzione: Gli stati possibili del sistema si enumerano indicando tutte le possibili scelte dei numeri di occupazione i_1, i_2, i_3 dei tre stati di singola particella, con il vincolo sul numero totale di particelle $i_1 + i_2 + i_3 = 4$. In tutto si enumerano 15 stati. Nel caso di fermioni i numeri di occupazione possono essere solo 0 o 1, per cui il vincolo $i_1 + i_2 + i_3 = 4$ non può essere più soddisfatto e non esiste alcun possibile stato del sistema.

3. Si consideri un sistema formato da tre particelle identiche bosoniche ciascuna delle quali può occupare tre stati. Elencate tutte le possibili scelte dei numeri d'occupazione delle particelle sugli stati. Supponendo che le energie dei tre stati siano: $E_1 = 0$, $E_2 = \epsilon$, $E_3 = 2\epsilon$ e che: $e^{-\beta\epsilon} = \frac{1}{2}$, calcolare con quale probabilità tutte e tre le particelle occupano lo stato fondamentale.

   Soluzione: Tutte le possibili scelte di i_0, i_1, i_2 con $i_0 + i_1 + i_2 = 3$. La funzione di partizione è $Z = \sum_{\{i_0,i_1,i_2\}} e^{-i_1\epsilon - 2i_2\epsilon} = 155/64$ da cui $P_{300} = 1/Z \simeq 0.413$.

4. Si consideri un sistema formato da quattro particelle identiche bosoniche ciascuna delle quali può occupare due stati. Elencate tutte le possibili scelte dei numeri d'occupazione delle particelle sugli stati. Supponendo che le energie dei due stati siano: $E_1 = 0$, $E_2 = \epsilon$ e che: $e^{-\beta\epsilon} = \frac{1}{2}$, calcolare con quale probabilità tutte e quattro le particelle occupano lo stato fondamentale. Ripetere il calcolo anche nel caso in cui le particelle siano distinguibili.

   Soluzione: Indicando con N_1 il numero d'occupazione nello stato 1 ($N_2 = 4 - N_1$) i suoi possibili valori sono ovviamente $0, 1, 2, 3, 4,$. Le energie sono ovviamente pari a ϵN_2, le molteplicità degli stati corrispondenti sono tutte 1 nel caso di particelle indistringuibili, mentre sono rispettivamente $1, 4, 6, 4, 1$ nel caso distinguibile. La probabilità del primo stato è $\frac{16}{31}$ nel primo caso e $(\frac{2}{3})^4$nel secondo.

5. Si consideri un gas di elettroni a temperatura zero e si calcoli per quale densità gli effetti relativistici diventano importanti nel senso che risultano occupati stati con velocità $v = \frac{\sqrt{3}}{2}c$.

   Soluzione: A $T = 0$ gli elettroni si dispongono ad occupare tutti i livelli accessibili a partire dal più basso. Supponendo di quantizzare in una scatola cubica di lato L, il numero di livelli accessibili che stanno sotto un certo numero d'onda k_M è pari, tenendo conto del grado di libertà di spin, a

$$N = \frac{k_M^3 L^3}{3\pi^2}$$

   da cui segue la densità $\rho = k_M^3/3\pi^2$. Il valore massimo del numero d'onda è imposto dalla condizione che nessun elettrone abbia velocità maggiore di $v_M = \frac{\sqrt{3}}{2}c$. Essendo

$$\hbar k_M = \frac{m_e v_M}{\sqrt{1 - v_M^2/c^2}} = \sqrt{3} m_e c$$

   si ricava infine $\rho \simeq 4.8\ 10^{36}$ particelle/m^3.

6. La densità degli stati nel caso di elettroni liberi è proporzionale alla radice dell'energia cinetica: $\frac{dn_E}{dE} = \frac{\sqrt{2m^3}L^3}{\pi^2\hbar^3}\sqrt{E}$; in una banda di conduzione la densità può avere una diversa dipendenza dalla energia. Possiamo, per esempio considerare il caso semplice in cui la densità è costante: $\frac{dn_E}{dE} = \gamma\, V$

con $\gamma = 8\ 10^{47} m^{-3}\ Joule^{-1}$, l'energia varia fra zero e $E_0 = 1\ eV$ e la densità elettronica nella banda di conduzione è pari a $\rho \equiv \frac{\bar{n}}{V} = 6\ 10^{28}\ m^{-3}$. Per temperature non molto superiori a quella ambiente si può pensare che le bande superiori a quella di conduzione non siano per nulla occupate e quelle di valenza, inferiori a quella di conduzione, restino completamente occupate. Pertanto si può affrontare il problema della distribuzione in energia degli elettroni di conduzione limitandosi a considerare l'intervallo di energia $0 - 1\ eV$, cioè la sola banda di conduzione. Calcolate in queste condizioni particolari come il potenziale chimico elettronico dipende dalla temperatura.

Soluzione: Il numero totale medio di particelle si calcola come $\bar{N} = \int_0^{E_0} n(\epsilon) g(\epsilon) d\epsilon$. La densità di livelli $g(\epsilon) = \frac{dn_E}{dE} = \gamma\ V$, il numero medio di occupazione $n(\epsilon) = 1/(e^{\beta(\epsilon-\mu)} + 1)$. Calcolando l'integrale e risolvendo per μ si ottiene

$$\mu = kT \ln \left(\frac{e^{\rho/(\gamma kT)} - 1}{1 - e^{\rho/(\gamma kT)} e^{-E_0/kT}} \right) .$$

Si verifica che, nel limite $T \to 0$, μ si riduce all'energia di Fermi $\epsilon_F = \rho/\gamma$.

7. Calcolare la velocità quadratica media di un gas rarefatto e ideale di particelle di massa $M = 10^{-20} kg$ a temperatura ambiente.

   Soluzione: $\bar{v^2} = 3kT/m \simeq 1.2\ m^2/sec^2$

8. La moderna teoria della cosmogenesi suggerisce che lo spazio cosmico contenga circa 10^8 neutrini per ogni metro cubo e per ogni specie. I neutrini sono particelle fermioniche che in prima approssimazione possono essere considerate prive di massa e con un solo stato di spin (invece dei due degli elettroni). Essi appartengono a 6 specie diverse. Ci si pone il problema di valutare l'energia di Fermi dei neutrini di ciascuna specie che va trattata come indipendente. Il problema è dunque quello di calcolare l'energia di Fermi per particelle senza massa, per cui lo spettro delle energie in una scatola cubica a pareti riflettenti di spigolo L è dato da $E_{\vec{k}} = \frac{\pi \hbar c}{L} k$, con densità $\rho \equiv \frac{\bar{n}}{V} = 10^8\ m^{-3}$ e un unico stato di spin.

   Soluzione: L'energia di Fermi ϵ_F è il potenziale chimico a T = 0. A T = 0 il numero medio di occupazione è 1 sotto ϵ_F e zero sopra. Il numero totale di stati con

energia minore di ϵ_F è $N_{\epsilon_F} = (\pi/6)\epsilon_F^3 L^3/(\pi\hbar c)^3$; questo deve essere pari al numero medio di particelle $\bar{N} = \rho L^3$, quindi $\epsilon_F = \hbar c\ (6\pi^2\rho)^{1/3} \simeq 3.38 \cdot 10^{-4}$ eV.

9. Facendo riferimento al sistema descritto nel esercizio precedente calcolare a temperatura nulla l'energia interna e quindi la pressione per un gas di particelle fermioniche senza massa, per cui lo spettro delle energie in una scatola cubica a pareti riflettenti di spigolo L è dato da $E_{\vec{k}} = \frac{\pi\hbar c}{L}k$, con densità $\rho \equiv \frac{\bar{n}}{V} = 10^8\ m^{-3}$ e un unico stato di spin.

   Soluzione: L'energia interna per unità di volume vale: $U/V\ = (81\pi^2\rho^4/32)^{\frac{1}{3}}\hbar c \simeq 4.1\ 10^{-15}\ Joule$, la pressione: $p = U/3V\ \simeq 1.36\ 10^{-15}\ Pa$.

10. 1000 bosoni sono soggetti forza di richiamo armonica con frequenza ν con $h\nu = 1\ eV$. Considerando che il numero medio di occupazione del livello $m \geq 0$ dell'oscillatore è dato dalla distribuzione di Bose: $n_m = \frac{1}{e^{\beta(hm\nu-\mu)}-1)}$ dove il potenziale chimico $\mu \leq 0$, calcolate il potenziale chimico stesso ponendo $T = 300\ ^oK$.

    Soluzione: Il numero totale di particelle, $N = 1000$, si scrive come

$$N = \sum_m n_m = \frac{1}{e^{-\beta\mu}-1} + \frac{1}{Ke^{-\beta\mu}-1} + \frac{1}{K^2e^{-\beta\mu}-1} + \dots$$

    dove $K = \exp(h\nu/kT) \simeq e^{40}$. Poiché K è un numero grandissimo e $\exp(-\beta\mu)$ è un numero sicuramente più grande di uno, è chiaro che solo il primo termine è diverso da zero. Quindi

$$\exp(-\beta\mu) = 1 + \frac{1}{N}$$

    da cui infine $\mu \simeq -2.5\ 10^{-5}$ eV.

11. Si considerino N particelle identiche bosoniche di massa m che si muovono in una dimensione in un potenziale armonico $U(x) = \frac{m\omega^2x^2}{2}$. Si individui la configurazione corrispondente allo stato fondamentale del sistema e quella corrispondente al primo stato eccitato, determinando i relativi valori dell'energia.

Se $\hbar\omega = 0.1$ eV ed il sistema è posto all'equilibrio termico alla temperatura ambiente $T = 300^o$ K, qual è il rapporto fra la probabilità che il sistema si trovi nel primo stato eccitato e quella che il sistema si trovi nello stato fondamentale? Come cambia la risposta a quest'ultima domanda nel caso in cui le particelle siano distinguibili?

Soluzione: Nello stato fondamentale tutte le particelle hanno energia $\frac{\hbar\omega}{2}$, nel primo stato eccitato una perticella ha energia $\frac{3\hbar\omega}{2}$. La molteplicità di questo stato è 1 se le particelle sono bosoni, N se sono distinguibili. Il rapporto R fra le probabilità vale $R = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} = 0.018$. nel caso bosonico e $R = N\ e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ nell'altro caso.

12. Si consideri un sistema composto da n particelle identiche fermioniche senza spin di massa m vincolate a muoversi lungo l'asse x in un potenziale armonico $V(x) = \frac{m\omega^2}{2}x^2$. Si determini l'energia dello stato fondamentale del sistema e quella del primo stato eccitato. Supponendo che $\hbar\omega = 1\ eV$ e che il sistema sia posto all'equilibrio termico alla temperatura $T \simeq 1000^o$ K, calcolare il rapporto fra la probabilità che il sistema si trovi nel primo livello eccitato e quella relativa allo stato fondamentale .

Soluzione: Nello stato fondamentale sono occupati i primi n stati dell'oscillatore, ne segue che l'energia dello stato vale $E_0 = \sum_{i=0}^{n-1}(n + \frac{1}{2})\hbar\omega = \frac{n^2}{2}\hbar\omega$, L'energia del primo stato eccitato vale $E_1 = E_0 + \hbar\omega$. segue che il rapporto R fra le due probabilità vale $R = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} = 1.6\ 10^{-6}$.

13. Su un filo conduttore di lunghezza pari a $L = 1\ cm$ sono posti 10^8 elettroni ciascuno dei quali può essere trattato come libero di muoversi in una buca unidimensionale a pareti riflettenti e di larghezza L. Tenendo conto anche del grado di libertà spin, calcolare l'energia di Fermi del sistema

Soluzione: Tenendo conto del grado di libertà di spin e del principio di Pauli il numero quantico corrispondente al livello di Fermi è $n_F = 5\ 10^7$ per cui l'enegia di Fermi vale $E_F = \frac{\hbar^2 n_F^2 \pi^2}{2mL^2} = 1.23\ 10^{-18} Joule$

Testi Consigliati

- F.Reif,
  La Fisica del Berkeley - Vol. 5.
  Zanichelli - Bologna.
- Per un approfondimanto: E.Schrödinger
  Termodinamica statistica
  Boringhieri

Appendice A

I tetravettori

Una descrizione sintetica delle trasformazioni di Lorentz e della loro azione sulle grandezze fisiche può essere fornita usando l'algebra delle matrici. Se si identificano coordinate di un evento nel riferimento O con gli elementi della matrice colonna ξ:

$$\xi \equiv \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \tag{A.1}$$

mentre alla trasformazione di Lorentz fra O e O' data in (2.6) e (**??**) si fa corrispondere la matrice:

$$\bar{\Lambda} \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} & 0 & 0 & \frac{-v}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{-v}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \end{pmatrix} \tag{A.2}$$

la matrice colonna costruita con le coordinate dello stesso evento nel riferimento O' son date da:

$$\xi' \equiv \begin{pmatrix} ct' \\ x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \bar{\Lambda}\xi \equiv \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} & 0 & 0 & \frac{-v}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{-v}{c\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} & 0 & 0 & \frac{1}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} . \tag{A.3}$$

Qui il prodotto fra le matrici è eseguito righe per colonne, cioè se $a_{i,j}$ con $i = 1, \cdot\cdot, M \quad j = 1, 1, \cdot\cdot, N$ è l'elemento della i-esima riga e j-esima colonna della matrice A con M righe e N colonne e $b_{l,m}$ quello della l-esima riga e m-esima colonna della matrice B con N righe e P colonne, la matrice prodotto AB ha M righe e P colonne e il suo elemento generico è dato da:

$$(AB)_{i,m} = \sum_{j=1}^{N} a_{i,j} b_{j,m} \ . \tag{A.4}$$

Come si è discusso in capitolo (2) una generica trasformazione di Lorentz corrisponde a una trasformazione lineare omogenea delle coordinate degli eventi che lascia invariata la forma quadratica nelle coordinate:

$$\xi^2 \equiv x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 \ , \tag{A.5}$$

il segno del tempo e trasforma terne Cartesiane destrorse in terne destrorse. Questa forma quadratica può essere costruita nella rappresentazione matriciale degli eventi introducendo la matrice *metrica*:

$$g \equiv \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \ , \tag{A.6}$$

e definendo :

$$\xi^2 = \xi^T g \xi \equiv \begin{pmatrix} ct' & x' & y' & z' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} ct \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} \ , \tag{A.7}$$

dove appaiono ancora prodotti righe per colonne, ma nell'espressione a sinistra dentro la parentesi l'apice T sta a indicare la trasposizione cioè che le righe sono scambiate con le colonne. Si noti che, mantenendo la convenzione del prodotto righe per colonne, sotto il segno di trasposto l'ordine del prodotto è invertito:

$$(AB)^T = B^T A^T \ . \tag{A.8}$$

Ora è facile tradurre la condizione di invarianza in una equazione matriciale per la generica trasformazione di Lorentz Λ:

$$\xi'^T g \xi' = \xi^T \Lambda^T g \Lambda \xi \equiv \xi^T g \xi \qquad \forall \xi \quad \longrightarrow \Lambda^T g \Lambda = g \ . \tag{A.9}$$

All'equazione a destra va unita la condizione che il determinante di Λ sia unitario e il suo elemento in prima riga e colonna sia positivo. Utilizzando la relazione evidente: $g^2 = I$, dove I è la matrice identica ottenuta da g cambiando il segno del suo primo elemento, che soddisfa per qualunque matrice $IA = A = AI$, sia ha:

$$g\Lambda^T g\Lambda = I \longrightarrow g\Lambda^T g = \Lambda^{-1} \ . \tag{A.10}$$

La matrice reciproca è definita da: $A^{-1}A = AA^{-1} = I$.

I vettori colonna che appaiono in relatività sono chiamati tetravettori. Ma, per quel che riguarda l'azione di una trasformazione di Lorentz va fatta una precisazione. Consideriamo una funzione continuamente derivabile delle 4 coordinate dell'evento $f(\xi)$ che sia invariante, cioè per cui $f(\Lambda\xi) = f(\xi)$, le derivate parziali di f rispetto alle coordinate dell'evento possono essere organizzate in una matrice colonna:

$$\partial f(\xi) \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\xi)}{\partial ct} \\ \frac{\partial f(\xi)}{\partial x} \\ \frac{\partial f(\xi)}{\partial y} \\ \frac{\partial f(\xi)}{\partial z} \end{pmatrix} \ . \tag{A.11}$$

Peraltro questa matrice non si trasforma come ξ per un cambiamento del sistema di riferimento. Infatti in O' si ha:

$$\partial' f(\xi') \equiv \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\xi')}{\partial ct'} \\ \frac{\partial f(\xi')}{\partial x'} \\ \frac{\partial f(\xi')}{\partial y'} \\ \frac{\partial f(\xi')}{\partial z'} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f(\xi)}{\partial ct'} \\ \frac{\partial f(\xi)}{\partial x'} \\ \frac{\partial f(\xi)}{\partial y'} \\ \frac{\partial f(\xi)}{\partial z'} \end{pmatrix} \ . \tag{A.12}$$

Per procedere oltre è necessario utilizzare (A.10) per ottenere $\xi = g\Lambda^T g\xi'$ e applicare la regola di derivazione composta delle derivate parziali. Questa stabilisce che, se le variabili $q_i \ , i = 1, \cdot\cdot, n$ dipendono dalle q'_i tramite $q_i = Q_i(q')$ e reciprocamente $q'_i = \tilde{Q}_i(q)$, allora si ha per le derivate parziali di una funzione $F(q)$:

$$\frac{\partial F(q)}{\partial q'_i} = \sum_{l=1}^{n} \frac{\partial Q_l(\tilde{Q}(q))}{\partial q'_i} \frac{\partial F(q)}{\partial q_l} \ . \tag{A.13}$$

Interpretando questa espressione come un prodotto matriciale è evidente che l'indice i è riferito alla riga e l alla colonna. Nel caso specifico della (A.12) la $Q(q')$ corrisponde al prodotto matriciale $g\Lambda^T g\xi'$ e $\frac{\partial Q_l(\tilde{Q}(q))}{\partial q'_i}$ corrisponde alla matrice $(g\Lambda^T g)^T = g\Lambda g$. Infatti, come sopra osservato, e come risulta dalle

definizione del prodotto (A.4), l'indice i si riferisce alla riga per la prima matrice è alla colonna della seconda.

Si ha dunque la relazione matriciale:

$$\partial' f = g\Lambda g\partial f \longrightarrow g\partial' f = \Lambda g\partial f \ , \tag{A.14}$$

da cui si vede che non è la matrice delle derivate parziali che si trasforma come le coordinate dell'evento, bensì il risultato del prodotto di g per tale matrice .

Volendo quindi, in analogia con le rotazioni, usare la parola vettore anzi in questo caso *tetravettore* per una matrice colonna che si trasforma come quella delle coordinate, il titolo di tetravettore spetta a $g\partial f$ e non a ∂f.

Nella pratica matematica si indica normalmente col nome di tetravettore *controvariante* quello delle coordinate e con quello di tetravettore *covariante* quello delle derivate parziali; questa distinzione è accopagnata dalla diversa posizione degli indici che appaiono come apici nel caso controvariante. Si noti peraltro che questa distinzione è importante solo nel caso in cui le trasformazioni delle coordinate siano non lineari, come nel caso di varietà curve. Nel nostro caso non vale assolutamente la pena di introdurre vettori dei due tipi.

L'uso degli indici può essere conveniente nel caso di grandezze che si trasformano come il prodotto tensoriale di più vettori cioè come prodotti di componenti diverse di tetravettori, questo è il caso dei campi elettrico e magnetico, ma non del potenziale vettore.

Constatato che numerose sono le grandezze fisiche che si trasformano come tetravettori, ricordiamo in particolare quello formato dal rapporto $\frac{E}{c}$ e dalle componenti dell'impulso che per il momento indichiamo con ϵ, va osservato che, dati due tetravettori η e ζ, è possibile formare un invariante:

$$\eta^T g\zeta = \zeta^T g\eta \rightarrow \eta'^T g\zeta' = (\Lambda\eta)Tg\Lambda\zeta = \eta^T\Lambda^T g\Lambda\zeta = \eta^T g\zeta \ . \tag{A.15}$$

Per analogia col caso delle rotazioni l'invariante viene spesso chiamato prodotto scalare fra i tetravettori e indicato con $\eta \cdot \zeta$. Un esempio importante è la fase delle onde di De Broglie che è data da $-\frac{1}{\hbar}\epsilon \cdot \xi = \frac{1}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r} - Et)$.

Appendice B

Termidinamica e entropia

Abbiamo mostrato in qualche esempio come è possibile ricavare le distribuzioni di equilibrio per sistemi di cui siano noti i livelli energetici. Questo ci ha permesso di calcolare l'energia media all'equilibrio identificando quindi il moltiplicatore di Lagrange β con $\frac{1}{kT}$. Naturalmente la ricostruzione completa delle proprietà termodinamiche dei sistemi all'equilibrio richiede ulteriori passi e maggiore informazione. Peraltro, per quel che riguarda l'unico modello con un contenuto fisico esplicito studiato finora, cioè il cristallo di Einstein nello schema infinitamente rigido, l'analisi termodinamica si riduce a ben poco. Infatti il modello descrive scambi di energia con l'esterno unicamente sotto forma di calore. Questo significa che il calore scambiato è una funzione di stato che può essere semplicemente identificata, ovviamente a meno di una costante, con l'energia media e quindi con l'energia interna $U(T)$.

Questo peraltro non impedisce di parlare di entropia partendo dall'equazione differenziale $dS = \frac{dU}{T}$, che utilizzando la (4.23), da:

$$dS = \frac{C(T)}{T}dT = \frac{3\hbar^2\omega^2}{kT^3}\frac{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1\right)^2}dT = -3k\hbar^2\omega^2\frac{e^{\beta\hbar\omega}}{\left(e^{\beta\hbar\omega}-1\right)^2}\beta d\beta$$
$$= d\left[3k\left(\frac{\beta\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega}-1} - \log\left(1-e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right)\right] \ . \tag{B.1}$$

Quindi, se scegliamo: $S(0) = 0$ come condizione iniziale per $S(T)$, troviamo per l'entropia del nostro cristallo:

$$S(T) = \frac{3\hbar\omega}{T}\frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}-1} - 3k\log\left(1-e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}\right) \ , \tag{B.2}$$

da cui si vede in particolare che alle alte temperature $S(T)$ cresce come $3k \log T$.

A parte questo risultato, l'espressione (B.2) è interessante perchè si presta a un'interpretazione relativamente semplice in termini delle distribuzioni statistiche all'equilibrio. Infatti, ricordando che la probabilità del generico microstato identificato dal vettore $\vec{n}$ è data da:

$$P_{\vec{n}} = e^{-\beta\hbar\omega(n_x+n_y+n_z)} \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)^3 \ ,$$

possiamo calcolare l'espressione:

$$\begin{aligned}
&-k \sum_{n_x,n_y,n_z=0}^{\infty} P_{\vec{n}} \log P_{\vec{n}} = k \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)^3 \sum_{n_x,n_y,n_z=0} e^{-\beta\hbar\omega(n_x+n_y+n_z)} \\
&\left[\beta\hbar\omega \left(n_x + n_y + n_z\right) - 3 \log\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)\right] \\
&= -3k \log\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) \left(\left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right) \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}\right)^3 \\
&+3k\,\beta\,\hbar\,\omega \left(1 - e^{-\beta\hbar\omega}\right)^3 \left(\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega n}\right)^2 \sum_{m=0}^{\infty} m\ e^{-\beta\hbar\omega m} \ . \qquad \text{(B.3)}
\end{aligned}$$

Ricordando che, per $|x| < 1$ la serie geometrica ha per somma: $\sum_{n=0}^{\infty} x^n = \frac{1}{1-x}$ e pertanto: $\sum_{n=1}^{\infty} n x^n = x \frac{d}{dx} \frac{1}{1-x} = \frac{x}{(1-x)^2}$, si ritrova facilmente l'espressione (B.2).

Uno degli aspetti significativi di questo risultato è il fatto che la relazione

$$S = -k \sum_{\alpha} P_\alpha \log P_\alpha \ , \qquad \text{(B.4)}$$

fornisce un'interpretazione probabilistica dell'entropia di validità del tutto generale. Questa relazione è particolarmente interessante anche per la sua semplicità; infatti, se consideriamo un sistema isolato, e assumiamo che gli stati accessibili siano equiprobabili, segue che P_α è costante ed eguale al reciproco del numero degli stati accessibili. Se indichiamo con Ω tale numero, si vede subito che $S = k \log \Omega$; dunque l'entropia misura il numero degli stati accessibili.

A titolo di esempio possiamo applicare la (B.4) al sistema a tre livelli. In questo caso l'entropia può essere facilmente espressa in funzione del parametro $z = e^{-\beta\epsilon}$:

$$S = k \log(1 + z + z^2) - \frac{k}{1 + z + z^2}(z + 2z^2) \log z \ ,$$

che, come si vede facilmente, è massima per $z = 1$ cioè al bordo dell'intervallo degli stati di equilibrio termodinamico.

Per discutere la generalità della (B.4) tentiamo di rendere più realistico il nostro modello assumendo che, nel regime di pressione che interessa, la frequenza degli oscillatori dipenda dalla loro densità secondo una legge del tipo $\omega = \alpha \left(\frac{N}{V}\right)^{\gamma}$ dove si può assumere tipicamente $\gamma \sim 2$. In queste condizioni il nostro cristallo scambia energia con l'esterno anche sotto forma di lavoro. Usando la (**??**) caso specifico otteniamo la pressione:

$$p = \sum_{n_x,n_y,n_z=0}^{\infty} P_{\vec{n}} \frac{\gamma}{V} E_{\vec{n}} = \frac{\gamma\, U}{V} \ , \tag{B.5}$$

che è l'equazione di stato del cristallo.

Tornando a considerare l'entropia, calcoliamo il calore scambiato in seguito a una variazione infinitesima dei parametri β e V; usando la (**??**) si ottiene:

$$dU + pdV = \frac{\partial U}{\partial \beta} d\beta + \frac{\partial U}{\partial V} dV + \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V} dV \ , \tag{B.6}$$

usando poi la (**??**) si ha, sempre per il calore infinitesimo:

$$-\frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} d\beta - \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta \partial V} dV + \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V} dV \ , \tag{B.7}$$

e quindi dalla definizione dell'entropia si ha:

$$\begin{aligned} dS &= k\beta \left[-\frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta^2} d\beta - \frac{\partial^2 \log Z}{\partial \beta \partial V} dV + \frac{1}{\beta} \frac{\partial \log Z}{\partial V} dV \right] \\ &= k \left[\frac{\partial}{\partial \beta} \left(\log Z - \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) d\beta + \frac{\partial}{\partial V} \left(\log Z - \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) dV \right] \\ &= kd \left(\log Z - \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) \ . \end{aligned} \tag{B.8}$$

D'altra parte è facile verificare usando la (**??**) e la (**??**) che:

$$\begin{aligned} -k \sum_{\alpha} P_\alpha \log P_\alpha &= k \sum_{\alpha} P_\alpha \left(\beta E_\alpha + \log Z \right) \\ &= k \left(\beta U + \log Z \right) = k \left(\log Z - \beta \frac{\partial \log Z}{\partial \beta} \right) \equiv S \ , \end{aligned} \tag{B.9}$$

che conferma la generalità dell'interpretazione probabilistica dell'entropia. Quest'equazione fornisce anche un'interpretazione diretta della funzione di partizione in termini dei potenziali termodinamici; infatti la relazione: $S = k\left(\beta U + \log Z\right)$ equivale a $U = TS - \frac{1}{\beta} \log Z$ e quindi $\log Z = -\beta(U - TS)$.

Quindi possiamo concludere che il logaritmo della funzione di partizione è eguale a β volte l'energia libera cambiata di segno.