Un'introduzione alla meccanica quantistica per le secondarie

Camillo Imbimbo

Genova, Gen-Feb, 2016

Progetto Lauree Scientifiche Dipartimento di Fisica dell'Università di Genova https://www.ge.infn.it/ imbimbo/PLS2016/

Il programma delle lezioni

• Lezione 1: La crisi della fisica classica

- La stabilità dell'atomo
- L'effetto fotoelettrico
- L'effetto Compton
- Gli spettri atomici
- Lezione 2: Il dualismo onda-particella
 - L' atomo di Bohr
 - La lunghezza d'onda di De Broglie
 - La diffrazione delle particelle
 - La regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld
- Lezione 3: La Meccanica Statistica
 - La distribuzione di Boltzmann
 - Il teorema di equipartizione e i calori specifici
 - La meccanica statistica quantistica
 - Il corpo nero e la catastrofe ultravioletta
 - La distribuzione di Planck

• Lezione 4:

- Il principio di interderminazione
- La funzione d'onda
- L'equazione di Schrödinger

Prima lezione

- Il concetto moderno di atomo e l'idea che ad ogni elemento chimico corrisponde un atomo furono originalmente introdotti per spiegare i fenomeni chimici.
- Fenomeni di natura fisica (la conduzione elettrica, l'emissione di luce dalla materia, l'elettrolisi, etc.) dimostrano che gli atomi, benché elettricamente neutri, contengono cariche positive e negative.

- Le cariche negative contenute negli atomi risultano essere tutte eguali tra loro. Sono chiamate elettroni.
- La loro massa e la loro carica furono misurate da J.J. Thomson (1897) e R. Millikan (1910):

$$e = -1.6 \times 10^{-19} C$$
 $m_e = 0.9 \times 10^{-30} kg$

 Le masse atomiche sono molto più grandi. Per esempio, la massa m_H dell'idrogeno, l'elemento più leggero, vale

 $m_{H} = 1.7 \times 10^{-27} \, kg \approx 1836 \, m_{e}$

• L'ordine di grandezza delle dimensioni atomiche risulta essere

 $r_0 \sim 10^{-10} m = 1 \text{ Å}$

・ロト ・ 同 ト ・ ヨ ト ・ ヨ ト … ヨ

7/253

Il modello di Rutherford

- Il modello atomico che si impose nella prima decade del XX secolo è dovuto a Rutherford (1911)¹.
- Il modello di Rutherford per gli atomi è un modello di tipo planetario, con il nucleo, carico positivamente, molto più piccolo della dimensione atomica, al posto del sole, e gli elettroni al posto dei pianeti.
- Poiché la massa dei protoni e dei neutroni che compongono il nucleo è molto più grande di quella degli elettroni, possiamo, con buona approssimazione, pensare che il nucleo rimanga fermo e gli elettroni gli ruotino intorno.

¹Un modello alternativo, formulato da Thomson, fu preso seriamente in considerazione nella prima decade del XX secolo. Esperimenti di diffusione di particelle alfa su fogli di oro invalidarono il modello di Thomson in favore di quello di Rutherford.

- L'atomo più semplice, quello di idrogeno, ha un solo elettrone che ruota intorno ad un nucleo composto da un singolo protone.
- Le equazioni del moto, per orbite circolari, sono analoghe a quelle per il sistema solare

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\,\frac{1}{r^2}=\frac{m_e\,v^2}{r}$$

dove *r* è il raggio dell'orbita, e *v* la sua velocità.

Esiste quindi una relazione tra velocità e raggio per un elettrone dell' atomo di H

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \frac{1}{r}$$

Energia e momento angolare

- Energia, momento angolare, velocità dell'elettrone sono determinati una volta noto il raggio dell'orbita.
- L'energia *E* dell'elettrone è

$$E = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e}{4 \pi \epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} m_e v^2 = -\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{2 r}$$

II (modulo del) momento angolare L è pure funzione di r

$$L = r m_e v = \sqrt{\frac{e^2 m_e r}{4 \pi \epsilon_0}}$$

 Ritroviamo così un fatto che conosciamo bene dalla discussione del moto dei pianeti:

Esistono un numero infinito di orbite (circolari) possibili, il cui raggio è determinato una volta assegnata l'energia, o il momento angolare.

• Questo fatto pone un problema molto serio per il modello di Rutherford.

Un' orbita "speciale"?

- Dalla chimica si sa che tutti gli atomi di un certo tipo —diciamo tutti gli atomi di idrogeno — nelle stesse condizioni di temperatura, pressione etc, sono uguali tra loro. In particolare sembrano avere tutti la stessa dimensione.
- Nel modello planetario questo implicherebbe che gli elettroni di tutti gli atomi di idrogeno ruotano intorno al nucleo su orbite con raggio (o energia o momento angolare) fissato.
- Ma cosa determina questo raggio "speciale"?
- L'esistenza un raggio "speciale" certamente sembra qualcosa che non ha nessun equivalente nel caso delle orbite dei pianeti.

 Gli elettroni che ruotano intorno al nucleo sono accelerati, con accelerazione pari, in modulo, a

$$a=\frac{v^2}{r}=\frac{e^2}{4\,\pi\,\epsilon_0\,m_e}\,\frac{1}{r^2}$$

- L'elettromagnetismo prevede che una carica accelerata emette radiazione elettromagnetica².
- Gli elettroni che ruotano intorno al nucleo dovrebbero perdere energia per radiazione.

²Discuteremo più avanti quanto questo fatto sia ragionevolmente giustificabile in un contesto liceale.

Una stima della vita di un atomo classico

- Un calcolo ³ di elettromagnetismo dimostra che un elettrone che ruota su una orbita circolare di $r_0 = 10^{-10} m$ dal nucleo cadrebbe sul nucleo in un tempo dell'ordine di $\tau \sim 10^{-10} sec$.
- Ma questo non è quello che si osserva: gli atomi sembrano avere tutti le stesse dimensioni e queste dimensioni non descrescono col tempo.

Perché?

³Discutiamo più avanti quanto questo calcolo sia ragionevolmente fattibile in un contesto liceale.

Il modello dell'atomo classico è inconsistente

La soluzione di questo problema non avvenne in un singolo passo: fu piuttosto il lento risultato di un processo tortuoso in cui una serie di idee, proposte per spiegare un insieme di fenomeni apparentemente diversi tra loro, furono alla fine sintetizzate in un quadro concettuale coerente.

Concetti coinvolti nella discussione precedente

- La legge della dinamica $\vec{F} = m \vec{a}$.
- Accelerazione centripeta per moto circolare uniforme $|\vec{a}| = \frac{\vec{v}^2}{r}$.
- Le orbite (circolari) dei pianeti.
- Potenziale di Coulomb $V(r) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$.
- Energia $E = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 + V(r)$.
- Momento angolare $\vec{L} = m \vec{r} \wedge \vec{v}$.
- Potenza irraggiata da una carica accelerata: $\frac{dE}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} |\vec{a}|^2.$

Potenza irraggiata da una carica accelerata*

- Uno studente del V anno delle secondarie è familiare col fatto che una carica elettrica ferma genera un campo elettrostatico di Coulomb.
- È anche familiare col fatto che un flusso di cariche che si muove con velocità costante, ovvero una corrente elettrica stazionaria, genera un campo magnetostatico.
- Il caso in cui le cariche sono accelerate fuoriesce dall'ambito dell'elettrostatica e della magnetostatica: la sua trattazione richiede l'uso delle equazioni di Maxwell dipendenti dal tempo.

Il ricorso all'analisi dimensionale

- Benché una trattazione generale dell'irraggiamento non sia ragionevolmente accessibile nel contesto liceale, è possibile introdurre con metodi elementari, in situazioni particolarmente semplici, l'idea che correnti elettriche dipendenti dal tempo generano delle onde elettromagnetiche.
- Diventa quindi credibile assumere che una carica accelerata perda energia per irraggiamento.
- La formula che determina la potenza irraggiata da una carica accelerata è allora derivabile, a meno di una costante numerica, da considerazioni dimensionali.

 La potenza irraggiata deve essere proporzionale ad una potenza della carica e ad una potenza dell'accelerazione; può in linea di principio dipendere anche da c:

$$W = \frac{dE}{dt} = K a^{\alpha} \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0}\right)^{\beta} c^{\gamma}$$

$$[m] [L]^{2} [t]^{-3} = [L]^{\alpha} [t]^{-2\alpha} ([m] [L]^{3} [t]^{-2})^{\beta} [L]^{\gamma} [t]^{-\gamma}$$
$$[m] [L]^{2} [t]^{-3} = [L]^{\alpha+3\beta+\gamma} [t]^{-2\alpha-2\beta-\gamma} [m]^{\beta}$$

Otteniamo quindi il sistema

 $\alpha + 3 \beta + \gamma = 2$ 2 \alpha + 2 \beta + \gamma = 3 \beta = 1

la cui soluzione è

$$\alpha = 2$$
 $\beta = 1$ $\gamma = -3$

 In definitiva la formula per l'irraggiamento è determinata da argomentazioni dimensionali a meno di una costante (negativa) numerica

$$\mathcal{N} = rac{dE}{dt} = K a^2 rac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 c^3}$$

• *K* è fissata dalle equazioni di Maxwell essere $K = -\frac{2}{3}$

Problemi per l'autovalutazione

- **Problema 1.** Si dimostri che non è possibile costruire una lunghezza a partire da $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}$ e m_e .
- Problema 2. Si dimostri che il tempo τ nel quale elettrone che parte da un'orbita circolare di raggio r₀ cade sul nucleo per effetto dell'irraggiamento è

$$\tau = \frac{1}{4} \frac{(m c^2)^2}{(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 r_0})^2} \frac{r_0}{c}$$

Si calcoli τ per $r_0 = 10^{-10} m$.

- L'effetto fotoelettrico fu osservato per la prima volta da H. Hertz nel 1887 e studiato in seguito da molti fisici sperimentali negli anni seguenti, tra cui J.J. Thomson nel 1899, P. Lennard nel 1900.
- L'effetto consiste in questo: Alcuni materiali (solidi metallici e non-metallici, liquidi, gas) emettono degli elettroni in seguito all'assorbimento di radiazione elettromagnetica incidente di frequenza corrispondente allo spettro visibile o ultra-violetto.

Sperimentalmente il fenomeno ha le seguenti caratteristiche:

- L'effetto si manifesta solo quando la frequenza ν della radiazione incidente è più alta di una frequenza di soglia ν_0 che dipende dal materiale.
- Il numero di elettroni emesso per unità di tempo è proporzionale all'intensità della radiazione incidente.
- L'energia cinetica massima *T_{max}* degli elettroni emessi soddisfa la relazione

 $T_{max} = h(\nu - \nu_0)$ $h = 6.6 \times 10^{-34} J \times sec$

dove *h* è una costante indipendente dal materiale.

- Il fatto che la radiazione elettromagnetica sia in grado di "strappare" degli elettroni dai loro atomi non è, di per sé, in contraddizione con i principi electromagnetismo.
- È difficile però spiegare, in un modello classico, le caratteristiche qualitative e quantitative osservate dell'effetto fotoelettrico. Vediamo perché.

I numeri in gioco

• Le frequenze delle onde elettromagnetiche per le quali si manifesta l'effetto sono quelle dello spettro visibile:

 $u_{\text{visibile}} pprox (0.40 - 0.750) imes 10^{15} \text{Hz}$

 Le energie dei foto-elettroni emessi sono dell'ordine di grandezza dell'elettron-volt:

 $E_{elettrone} \sim h
u_0 \sim (1-10) imes 10^{-19} J$

 L'intensità Φ — ovvero il flusso di energia per unità di tempo e di superficie — della radiazione incidente che dà origine a effetti misurabili è dell'ordine di grandezza

 $\Phi \sim (10 - 10^2) \, watt/m^2$

• Il tempo τ entro il quale l'effetto si manifesta è piccolo:

$$au \sim 10^{-8}\,sec$$

Un problema di numeri

- Sappiamo che gli elettroni sono legati ad atomi la cui dimensione r₀ ~ 10⁻¹⁰ m.
- La potenza energetica che colpisce una superficie di dimensione atomiche posta ortogonalmente al flusso è pertanto

 $W \sim \Phi \times r_0^2 \sim 10^{-19}$ watt

 Conseguentemente l'energia totale che irradia un singolo atomo durante il tempo τ, tempo entro il quale l'effetto si manifesta, è dell'ordine di

 $au imes W \sim 10^{-27} J$

Le energie misurate $E_{elettrone} \sim (1-10) \times 10^{-19} J$ dei fotoelettroni emessi sono 7-8 ordini di grandezza superiori all'energia elettromagnetica trasportata dalla radiazione $\tau \times W \sim 10^{-27} J$ che colpisce un atomo nel tempo rilevante τ .

Come fa l'elettrone ad acquistare così tanta energia in così poco tempo τ mentre si muove in una regione così piccola r_0^2 ?

- Gli elettroni atomici investiti dall'onda elettromagnetica sono sottoposti ad una forza proporzionale al campo elettrico dell'onda.
- Tanto maggiore sarà \vec{E} tanto più facile dovrebbe essere per l'onda "liberare" l'elettrone dall'attrazione atomica.
- In particolare, ci aspetteremmo che per |*E*| troppo piccolo l'effetto non si manifesti.
- E che l'effetto diventi possibile \vec{E} sufficientemente grande.
- Inoltre, l'energia acquisita dall'elettrone strappato dovrebbe crescere all'aumentare di *E*.

 Il flusso energetico dell'onda elettromagnetica dipende quadraticamente dal modulo del campo elettrico:

 $\Phi = c \epsilon_0 \, |\vec{E}|^2$

- Inoltre i foto-elettroni emessi dovrebbero avere energie maggiori al crescere di Φ.

- Ambedue le predizioni sono in contrasto con l'esperimento: sperimentalmente esiste una soglia nella frequenza ma non nell'intensità. E l'energia massima misurata dei foto-elettroni, non dipende dalla intensità ma dalla frequenza.
- Inoltre, le energie osservate dei foto-elettroni emessi sono di molti ordini di grandezza più grandi di quelle che sarebbe ragionevole attendersi classicamente.

Il modello di Einstein

 La proposta di A. Einstein (1879-1955) fu quella di ipotizzare che la radiazione elettromagnetica ceda energia agli elettroni in "pacchetti", o quanti, ognuno della stessa energia *E_ν*, legata alla frequenza della luce dalla relazione

$$E_{\nu} = h \nu$$

 Denotando con W l'energia necessaria per strappare l'elettrone dal metallo, si deduce che l'energia cinetica massima dei foto-elettroni emessi è

$$T_{\max} = h\nu - W = h\left(\nu - \frac{W}{h}\right)$$

• Questa relazione coincide con quella sperimentale ponendo $\nu_0 = \frac{W}{h}$.

I fotoni

- Il modello di Einstein spiega anche la proporzionalità del numero dei foto-elettroni emessi con l'intensità della radiazione, in quanto questa è proporzionale al flusso dei "pacchetti" elettromagnetici che colpiscono il materiale.
- A questi pacchetti venne dato il nome di fotoni.
- La costante *h* che appare nella relazione di Einstein ha le dimensioni di un momento angolare.
- Essa risulta coincidere numericamente con una costante, oggi nota come costante di Planck, che era già apparsa nella formula di Planck per lo spettro della radiazione di corpo nero.

Onde e corpuscoli

- Se si supponesse, secondo il modello classico, che l'energia dell' onda elettromagnetica sia uniformemente"dispersa" nello spazio, essa non sarebbe sufficiente, per le intensità luminose per le quali l'effetto è osservabile, a strappare elettroni dagli atomi.
- Nel modello corpuscolare, invece, gran parte degli elettroni non vengono colpiti dai fotoni, ma quelli che vengono colpiti acquistano l'energia necessaria per fuoriscire dal materiale
 — se l'energia di ciascun fotone, e quindi la sua frequenza, è sufficientemente alta.
- In definitiva il puzzle delle grandi energie dei foto-elettroni emessi è risolto da Einstein assumendo che l'energia della radiazione luminosa sia "concentrata" nei fotoni.

- Concetti di ampiezza e frequenza di un'onda.
- Relazione tra frequenza e lunghezza d'onda.
- Flusso di energia trasportato da un'onda: relazione con ampiezza del campo elettrico.
- Conservazione dell'energia: barriera di potenziale.

- 1. Si calcoli l'energia dei fotoni per luce nello spettro visibile.
- 2. Si determini il numero di fotoni N per unità di superficie per unità di tempo corrispondente ad una radiazione di intensità a Φ = 1 W/m² e di frequenza di ν = 0.5 · 10¹⁵ Hz.
- 3. Per avere un'idea delle intensità luminose necessarie per estrarre un elettrone da un atomo in un modello classico si consideri il seguente problema: Si consideri un elettrone sottoposto ad campo elettrico uniforme *E* che si muove per una distanza *r* = 10⁻¹⁰*m*: si calcoli che campo *E*₀ è necessario affinché l'elettrone acquisti un' energia *W* = 1 *eV*. Si determini l'intensità luminosa di un'onda elettromagnetica di ampiezza *E*₀.
Soluzioni

• 1.
$$E_{visibile} \approx (2.6 - 5.0) \times 10^{-19} J \approx (1.6 - 3) eV$$

- 2. $E_{fotone} = 6.6 \cdot 10^{-34} \times 0.5 \, 10^{15} J = 3.3 \cdot 10^{-19} J$ $N = \frac{\Phi}{E_{fotone}} = \frac{1}{3.3 \cdot 10^{-19}} \, m^{-2} \, s^{-1} = 0.3 \cdot 10^{19} \, m^{-2} \, s^{-1}$
- 3. $e E_0 r = W \Rightarrow E_0 = \frac{1 eV}{1 e 10^{-10} m} = 10^{10} V/m$ $\Phi = c \epsilon_0 |\vec{E}|^2 = 3 \cdot 10^8 \times 8.8 \cdot 10^{-12} \times 10^{20} W/m^2 =$

 $= 2.6 \cdot 10^{17} W/m^2$

 L'aspetto "corpuscolare" della radiazione elettromagnetica che emerge dalla descrizione di Einstein dell'effetto fotoelettrico fornisce una spiegazione molto semplice dell' effetto (o spostamento) Compton, un fenomeno osservato da A. H. Compton (1923) studiando la diffusione di radiazione elettromagnetica di alta frequenza (raggi X o raggi gamma) su elettroni.

Il processo fisico

- Un elettrone a riposo, colpito da radiazione di frequenza ν.
- Nell'ipotesi fotonica, il processo è descritto dall'urto elastico di un fotone incidente di energia *E* ed impulso p
 con l'elettrone a riposo.



Figura 1: Effetto Compton.

Energia ed impulso del fotone

 La relazione tra energia ed impulso di una particella di massa M in meccanica relativistica

$${\it E}={\it c}\,\sqrt{ec{\it p}^2+{\it M}^2\,{\it c}^2}$$

• Per un fotone, M = 0, e quindi la relazione tra impulso ed energia diventa

 $E = c |\vec{p}|$

 Si noti che questa relazione tra energia e impulso è anche quella, classica, tra densità di energia e densità di impulso trasportato da un'onda elettromagnetica⁴.

⁴Questo fatto è in linea teorica accessibile in una trattazione dell'elettromagnetismo delle secondarie

Le variabili cinematiche

- Denotiamo con p' and E' momento e energia del fotone diffuso.
- Denotiamo con \vec{P} il momento dell'elettrone dopo il processo di diffusione e con m_e la sua massa.
- L'energia dell'elettrone prima della diffusione è $E_{el} = m_e c^2$
- L'energia dell'elettrone dopo della diffusione è

 $E_{el}' = c \sqrt{\vec{P}^2 + m_e^2 c^2}$

Urto elastico

- $\vec{p} = \vec{p'} + \vec{P} \Rightarrow \vec{P} = \vec{p} \vec{p'}$ conservazione del momento;
- $E + m_e c^2 = E' + c \sqrt{\vec{P}^2 + m_e^2 c^2}$ conservazione dell'energia;
- $(E E' + m_e c^2)^2 = m_e^2 c^4 + c^2 (\vec{p}^2 + \vec{p'}^2 2 \vec{p} \cdot \vec{p'})$ = $m_e^2 c^4 + E^2 + (E')^2 - 2 E E' \cos \theta$
- $(E-E') m_e c^2 = E E' (1-\cos\theta)$
- $E = \frac{ch}{\lambda}$ $E' = \frac{ch}{\lambda'}$ la relazione di Einstein

Lo spostamento di Compton

In definitiva

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta)$$

La radiazione diffusa in avanti a $\theta = 0$ ha la stessa lunghezza d'onda della radiazione incidente. Ma la lunghezza d'onda della radiazione che è diffusa ad un angolo $\theta \neq 0$ differisce dalla lunghezza d'onda della radiazione incidente di una quantità proporzionale alla cosidetta lunghezza di Compton dell'elettrone

$$\lambda_{Compton} \equiv \frac{h}{m_e c} = 2.43 \times 10^{-12} m_e$$

La diffusione classica e quella quantistica

- Classicamente, la radiazione diffusa dovrebbe invece avere la stessa frequenza di quella incidente⁵.
- Lo spostamento di Compton mostra che possiamo consistentemente attribuire ai fotone non solo energia ma anche momento e che ambedue sono conservati nei processi di diffusione.
- In definitiva l'effetto Compton fornisce una importante conferma della relazione di Einstein per l'energia dei fotoni e dell' ipotesi "corpuscolare" della luce.

⁵Come discusso precedentemente, questo è un fatto derivabile dall'elettromagnetismo in un contesto liceale al prezzo di qualche sforzo.

- Conservazione dell'energia e dell'impulso negli urti elastici.
- Relazione tra energia ed impulso per particelle relativistiche.
- Relazione di Einstein tra energia e frequenza dei fotoni.

Problemi per l'autovalutazione

- Problema 1. Perché l'effetto Compton per gli elettroni è osservabile per raggi X e non per luce visibile?
- **Problema 2.** Determinare la lunghezza d'onda della radiazione elettromagnetica necessaria per osservare l'effetto Compton usando protoni al posto di elettroni.
- **Problema 3.** Discutere l'urto elastico del fotone con l'elettrone a riposo nel limite in cui l'elettrone può essere considerato non-relativistico. Quali sono le condizioni di validità di questa approssimazione?

- Un ingrediente essenziale nel processo che portò alla scoperta della meccanica quantistica fu l'osservazione sperimentale che gli atomi non emettono o assorbono luce di frequenza arbitraria, ma solo in corrispondenza a certe frequenze discrete.
- Nel caso dell'idrogeno, J. Rydberg osservò nel 1888 che tutte le frequenze ν_{n,m} della luce assorbita o emessa erano descritte dalla formula,

$$\frac{\nu_{n,m}}{c} = \frac{1}{\lambda_{n,m}} = R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right) \qquad n,m = 1,2,3,\dots$$

ヘロト ヘポト ヘヨト ヘヨト

47/253

- Questa formula fu derivata da Rydberg in maniera completamente empirica, cercando di fittare gli spettri dell'idrogeno misurati.
- Il passaggio fondamentale fu esprimere i risultati in termini del numero d'onda, ovvero l'inverso della lunghezza d'onda.
- *R_H* è la costante di Rydberg per l'idrogeno, una grandezza fisica che è possibile misurare con notevole precisione

 $R_{H} = 1.0967760 \times 10^{7} \, m^{-1}$

L'importanza della precisione delle misure spettroscopiche

- *R_H* rappresenta il valore del massimo numero d'onda del fotone che può essere emesso da un atomo di idrogeno.
- Il fatto che questa grandezza fosse misurabile con grande precisione già all'epoca di Bohr è stato determinante per la scoperta della meccanica quantistica.

Il principio di combinazione di Rydberg-Ritz

- Formule analoghe furono trovate per gli spettri di altri elementi chimici, anche se non così semplici e così accurate come quella per l'idrogeno.
- Queste osservazioni portarono al principio, formulato da Ritz nel 1908, senza alcuna base teorica, che le righe spettrali di ogni elemento includono frequenze che sono o la somma o da differenza di frequenze di due altre righe.
- Equivalentemente il principio affermava che valeva una generalizzazione della formula di Rydberg per elementi diversi dell'idrogeno della forma

 $\nu_{n,m} = c (T_n - T_m)$ n, m = 1, 2, 3, ...

Fine della prima lezione

Seconda lezione

 N. Bohr (1885-1962) capì che l'ipotesi dei fotoni di Einstein avrebbe spiegato il carattere discreto degli spettri di assorbimento ed emissione dell'idrogeno se si fosse ulteriormente postulato che non tutte le orbite degli elettroni sono permesse, ma solo quelle con energie discrete date dalla formula

$$E_n = -\frac{h c R_H}{n^2}$$
 $n = 1, 2, 3, ...$

ヘロト ヘポト ヘヨト ヘヨト

Transizioni tra orbite elettroniche

- Bohr propose (1913) quindi che il processo di assorbimento od emissione di radiazione elettromagnetica da parte di un elettrone dell'atomo di idrogeno corrispondesse alla transizione dell'elettrone da un'orbita di energia E_m ad un'altra di energia E_n.
- La conservazione dell'energia richiede che l'energia elettromagnetica emessa (o assorbita) dall'elettrone nella transizione sia $E_m E_n$.
- La relazione di Einstein implica che la frequenza della radiazione emessa (o assorbita) sia

$$u_{n,m} = rac{E_m - E_n}{h} = c \, R_H \, ig(rac{1}{n^2} - rac{1}{m^2} ig)$$

riproducendo la regola di Rydberg.

- L'ipotesi che le energie "permesse" degli elettroni fossero discrete spiegava anche la stabilità delle dimensioni dell'atomo di idrogeno.
- La relazione classica $E = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{2r}$ tra energia e raggio di un'orbita circolare determina i raggi discreti delle orbite permesse:

$$r_n = \frac{e^2}{8 \pi \epsilon_0 h c R_H} n^2$$
 $n = 1, 2, 3, \dots$

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

Il raggio di Bohr

 Esiste dunque un'orbita di energia più bassa, quella con n = 1 il cui raggio è il più piccolo possibile

$$r_{1} = \frac{1}{2} \frac{e^{2}}{4 \pi \epsilon_{0} h c R_{H}} = \\ = \frac{1}{4 \pi} \frac{1}{137} \frac{1}{1.0967760 \times 10^{7}} m = \\ = 0.53 \times 10^{-10} m$$

 Questo numero è dell' ordine di grandezza corretto per poter accordarsi con i risultati sulle dimensioni dell'atomo di idrogeno che si inferiscono dagli esperimenti di diffusione, di chimica etc.

Perché quelle orbite?

- L'ipotesi di Bohr sembrava dunque andare nella giusta direzione.
- Ma cosa c'era di così speciale nelle orbite con energie $E_n = -\frac{h c R_H}{n^2}$?
- Perché queste erano permesse e non altre?
- Capire questo era essenziale per poter fare ulteriori progressi: la formula spettroscopica di Rydberg era infatti valida solo per l'idrogeno, per atomi diversi si trovavano formule diverse e molto più complicate.

- La scoperta della "regola" generale che individuava fra tutte le orbite classiche quelle "permesse" richiedeva un salto d'immaginazione.
- Un modo di motivare⁶ tale salto d'immaginazione è quello di calcolare il momento angolare L per le orbite permesse.

⁶Questo non è il modo seguito originalmente da Bohr, che si fece guidare da altre considerazioni che discuteremo più avanti.

Il momento angolare fondamentale

• Dalla relazione
$$L = r m_e v = \sqrt{\frac{e^2 m_e r}{4 \pi \epsilon_0}}$$
,

$$L_n = \sqrt{\frac{e^2 m_e r_n}{4 \pi \epsilon_0}} = n \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} \sqrt{\frac{m_e}{2 h c R_H}}$$

• Il momento angolare delle orbite permesse dell'idrogeno è dunque un multiplo intero di un momento angolare fondamentale pari a $\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} \sqrt{\frac{m_e}{2 h c R_H}}$.

Il momento angolare fondamentale

- La costante fisica h introdotta da Einstein (e prima ancora, da Planck) aveva pure le dimensioni di un momento angolare.
- Questo suggerisce di postulare che questi due momenti angolari siano uguali (a meno di un fattore 2 π) :

$$\frac{e^2}{4\,\pi\,\epsilon_0}\,\sqrt{\frac{m_e}{2\,h\,c\,R_H}} = \frac{h}{2\,\pi} \equiv \hbar$$

Una predizione teorica accurata

• Questa relazione permette di esprimere la costante di Rydberg in termini di costanti fisiche fondamentali:

$$R_H = rac{e^4}{(4 \, \pi \, \epsilon_0)^2} \, rac{m_e}{\hbar^3 \, c} \, rac{1}{4 \, \pi}$$

Inserendo i valori numerici di e, me, c, ħ otteniamo

$$R_{H}^{teorico} = 1.0973700 \times 10^{7} \, m^{-1}$$

in eccellente accordo col valore sperimentale osservato $R_{H}^{sperim} = 1.0967760 \times 10^7 m^{-1}$!

- L'accordo del modello di Bohr con i dati spettroscopici è in realtà ancora migliore di quanto risulta dall'analisi precedente.
- Nel derivare R_H siamo partiti dalle espressioni per L ed E per il moto circolare di una particella di massa m_e intorno ad un centro fisso: abbiamo trascurato il fatto che il nucleo ha in realtà una massa M grande rispetto a m_e ma non infinita.

La massa ridotta

 È possibile tenere conto della massa finita del nucleo rimpiazzando la massa dell'elettrone nelle espressioni per L ed E con la massa ridotta del sistema nucleo+elettrone⁷:

$$\mu = rac{m_e\,M}{m_e+M} = m_e\,rac{1}{1+rac{m_e}{M}}$$

 La formula corretta per la costante di Rydberg dell'idrogeno pertanto non è la precedente ma piuttosto

$$R_{H} = \frac{e^{4}}{(4 \pi \epsilon_{0})^{2}} \frac{\mu}{\hbar^{3} c} \frac{1}{4 \pi}$$

⁷Questo fatto è realisticamente dimostrabile in un corso di meccanica classica di livello liceale.

Una predizione teorica spettacolare

• Ricordando che $\frac{m_p}{m_e} = 1836.15$ otteniamo per la massa ridotta elettrone+protone il valore

$$\mu = m_e \frac{1}{1 + \frac{m_e}{m_p}} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{m_p}\right) = m_e \left(1 - \frac{1}{1836.15}\right)$$

 La costante di Rydberg per l'idrogeno predetta da Bohr è quindi un po' più piccola di quella di un nucleo infinitamente pesante

$$R_{H}^{teo} = 1.096776 \times 10^7 \ m^{-1}$$

in accordo spettacolare col valore sperimentale osservato $R_H^{sperim} = 1.0967760 \times 10^7 m^{-1}$!

La quantizzazione del momento angolare

 Le orbite "permesse" sono dunque caratterizzate da una condizione molto semplice

$$L_n = n \hbar$$
 $n = 1, 2, 3...$

 Questa regola di quantizzazione del momento angolare permette di esprimere lo spettro ed il raggio di un atomo di idrogeno in termini di costanti fondamentali

$$r_{1} \equiv a_{Bohr} = \frac{4 \pi \epsilon_{0} \hbar^{2}}{m_{e} e^{2}}$$
$$E_{n} = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^{2}} \frac{e^{4}}{(4 \pi \epsilon_{0})^{2}} \frac{m_{e}}{\hbar^{2}} \qquad n = 1, 2, \dots$$

Il principio di corrispondenza

- Consideriamo i livelli di Bohr per *n* grandi.
- Per n grandi la distanza tra due livelli contigui E_{n+1} e E_n è molto piccola:

$$\frac{\Delta E_n}{|E_n|} = \frac{E_{n+1} - E_n}{|E_n|} = \frac{2n+1}{(n+1)^2} \approx \frac{2}{n} \qquad \text{per } n \gg 1$$

- Per *n* grandi quindi lo spettro dei livelli dell'atomo diventa in pratica continuo.
- Il principio di corrispondenza afferma che in questo limite il risultato quantistico deve ridursi a quello classico.

Il limite classico

• La variazione del raggio dell'orbita, nella transizione $E_{n+1} \rightarrow E_n$ è

$$\frac{\Delta r_n}{r_n} = \frac{r_{n+1} - r_n}{r_n} \approx \frac{2}{n} \ll 1 \qquad \text{per } n \gg 1$$

• La variazione del raggio dell'orbita è pertanto per *n* grandi una frazione molto piccola del raggio stesso. Questo significa che per *n* grandi l'emissione corrispondente alla transizione $E_{n+1} \rightarrow E_n$ corrisponde ad una variazione del raggio del orbita praticamente continua, come ci si aspetta nella descrizione classica di questo processo fisico.

Spettro delle transizioni con n grandi

• Ripartiamo da $r_n = \frac{e^2}{8 \pi \epsilon_0 h c R_H} n^2$, da cui deduciamo

$$n = \sqrt{\frac{r_n}{\frac{e^2}{8 \pi \epsilon_0 \, h \, c \, R_H}}}$$

• La frequenza della radiazione emessa corrispondente alla transizione $E_{n+1} \rightarrow E_n$ diventa per $n \gg 1$

$$u_{n+1,n} \approx \frac{2}{hn} |E_n| \quad \text{per } n \gg 1$$

Questa frequenza in funzione del raggio è quindi

$$\nu_{n+1,n} \approx \frac{2}{\sqrt{\frac{r_n}{\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 h c R_H}}}} \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 h r_n} = \frac{2 c R_H}{\left(\frac{8\pi\epsilon_0 h c R_H}{e^2}\right)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{r_n^{\frac{3}{2}}}$$

・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト

Lo spettro classico

- Classicamente, una carica che ruota su una orbita circolare con frequenza orbitale ν emette radiazione elettromagnetica con frequenza (che è un *multiplo intero* di) ν^8
- Per un elettrone su una orbita circolare di raggio r

$$\nu_{classica} = \frac{v}{2 \pi r} = \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 m_e}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2 \pi} \frac{1}{r^{\frac{3}{2}}}$$

• Quindi, in accordo col principio di corrispondenza, la frequenza classica ν ha la stessa dipendenza da r — è proporzionale a $r^{-\frac{3}{2}}$ — di quella quantistica nel limite $n \gg 1$.

⁸Sulla dimostrabilità di questo fatto nel contesto liceale si rimanda alla discussione precedente.

La (probabile) derivazione originale di R_H

• Se richiediamo che il risultato classico coincida esattamente con quello quantistico nel limite di *n* grandi, dobbiamo equagliare i coefficienti che moltiplicano $r^{-\frac{3}{2}}$ nelle espressioni classiche e quantistiche, ottenendo

$$\frac{2\,c\,R_H}{\left(\frac{8\,\pi\,\epsilon_0\,h\,c\,R_H}{e^2}\right)^{\frac{3}{2}}} = \left(\frac{e^2}{4\,\pi\,\epsilon_0\,m_e}\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{2\,\pi}$$

da cui

$$h c R_H = \frac{1}{2} \frac{m_e}{\hbar^2} \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0}\right)^2$$

ovvero l'espressione per la costante di Rydberg che abbiamo ottenuto imponendo la quantizzazione del momento angolare.

La "regola" di quantizzazione definitiva?

 Si trattava di capire, a questo punto, da dove discendesse la misteriosa regola di quantizzazione del momento angolare: se questa potesse a sua volta essere derivata da principi fisici più fondamentali. • 1. **Problema:** Si applichi la condizione di quantizzazione del momento angolare ad un satellite di massa $m = 100 \ kg$ orbitante circolarmente intorno alla Terra. Si supponga che il satellite si trovi su un'orbita circolare di raggio vicino a quello della Terra $R_t = 6400 \ km$, con un dato numero intero \overline{n} . Di quanto varia il raggio dell'orbita se il satellite si sposta su una orbita successiva con $n = \overline{n} + 1$?
Soluzione Problema 1.

- La relazione tra velocità e raggio dell'orbita: $v^2 = \frac{GM}{r}$;
- Regola di quantizzazione momento angolare:

$$mrv = m\sqrt{GMr} = n\hbar \Rightarrow r_n = \frac{n^2\hbar^2}{GMm^2}$$

• \bar{n} è un numero enorme per $r_{\bar{n}} \approx R_t$,

$$\bar{n}^{2} \approx \frac{GMR_{t}m^{2}}{\hbar^{2}} = \frac{gm^{2}R_{t}^{3}}{\hbar^{2}} \approx \frac{9.8 \times 10^{4} \times 6.4^{3} \times 10^{18}}{1.05^{2} \times 10^{-68}} = 24 \times 10^{92}$$
$$\bar{n} \approx 5 \times 10^{46}$$

dove $g = \frac{GM}{R^2} = 9.8 \frac{m}{sec^2}$ è l'accelerazione di gravità.

• Se *n* cambia da $n \rightarrow n + \Delta n = n + 1$, la variazione del raggio è

$$\Delta r_n = r_{n+1} - r_n \approx \frac{2 n \Delta n \hbar^2}{G M m^2} = \frac{2 \Delta n r_n}{n} = \frac{2 r_n}{n}$$
$$\Delta r_n \approx \frac{2}{5 \times 10^{46}} \times 6.4 \times 10^6 m \approx 2.6 \times 10^{-40} m$$

In altre parole, per un oggetto macroscopico come un satellite, la condizione di quantizzazione di Bohr dà risultati indistinguibili da quelli della fisica classica: i raggi di orbite permesse successive differiscono tra loro per una quantità minuscola e quindi, in pratica, in questi contesti, il raggio può essere considerato come una variabile continua. 2. Problema. Gli idrogenoidi sono atomi o ioni che hanno un solo elettrone. Si derivino i valori numerici delle constanti di Rydberg predette dal modello di Bohr per gli idrogenoidi seguenti: il deuterio *D* (un atomo il cui nucleo è composto da un protone ed un neutrone), l'elio ionizzato una volta *He*⁺ e il litio ionizzato due volte *Li*⁺⁺.

Soluzione Problema 2.

- $V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r}$: potenziale per idrogenoidi.
- $E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \frac{Z^2 e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2} \frac{\mu}{\hbar^2} \equiv -Z^2 \frac{R(M) h c}{n^2}$ n = 1, 2, ...: livelli per gli idrogenoidi.
- $R(M) = R_{\infty} \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} \approx R_{\infty} \left(1 \frac{m_e}{M}\right)$: costanti di Rydberg per gli idrogenoidi.
- $R_{\infty} = \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{4 \pi} \frac{m_e}{\hbar^3 c}$: costante di Rydberg per ioni pesanti.
- $R_D = R(2 m_p) \approx R_\infty \left(1 \frac{m_e}{2 m_p}\right) = 1.097074 \times 10^7 m^{-1}$ $R_{He^+} = R(4 m_p) \approx R_\infty \left(1 - \frac{m_e}{4 m_p}\right) = 1.097224 \times 10^7 m^{-1}$ $R_{Li^{++}} = R(7 m_p) \approx R_\infty \left(1 - \frac{m_e}{7 m_p}\right) = 1.097288 \times 10^7 m^{-1}$

Onde corpuscolari e corpuscoli ondulatori

- La formula di Einstein $E = h\nu$ "spiega" l'effetto fotoelettrico, l'effetto Compton ed è alla base del modello atomico di Bohr.
- Questa formula, che esprime l'aspetto corpuscolare delle onde elettromagnetiche, coinvolge la stessa costante di Planck che appare nella regola di quantizzazione di Bohr $L = \hbar n$, che si applica invece alle particelle.
- Questo suggerì a L. De Broglie che le particelle potessero a loro volta esibire una natura ondulatoria.

Applicare la relazione di Einstein alle particelle?

 La relazione di Einstein esprime la lunghezza d'onda in termini dell'energia dei fotoni

$$\lambda = \frac{hc}{E}$$

 Questa relazione, valida per i fotoni, coinvolge c e quindi non si presta ad essere direttamente applicata a particelle con massa non nulla che, come gli elettroni negli atomi, possono essere non-relativistiche.

La relazione di De Broglie

• Possiamo però riscrivere la stessa relazione in termini del momento del fotone $|\vec{p}| = \frac{E}{c}$, ottenendo la relazione

$$\lambda = rac{h}{|ec{
ho}|}$$

in cui c è sparito !

 Questa formula, proposta da L. De Broglie nel 1923 è quindi sensata anche per particelle di massa non nulla, per esempio elettroni. Essa è in effetti valida per ogni particella: fotoni, elettroni, protoni, ...

La lunghezza d'onda degli elettroni

 In particolare per un elettrone non-relativistico di energia E la lunghezza d'onda di De Broglie è

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 \, m E}} = \frac{12.26 \,\text{\AA}}{\sqrt{E[eV]}}$$

- La lunghezza d'onda di De Broglie associata ad un elettrone di energia E = 100 eV è dunque di circa 1.2 Å: ovvero una lunghezza dello stesso ordine di grandezza di quella dei raggi X.
- Secondo De Broglie, quindi, la natura ondulatoria degli elettroni con E = 100 eV dovrebbe manifestarsi in contesti sperimentali simili a quelli che danno luogo alla diffrazione dei raggi X.

La diffrazione dei raggi X

 La diffrazione dei raggi X di lunghezza d'onda λ può essere studiata usando reticoli atomici con passo reticolare d dello stesso ordine di grandezza di λ.



Figura 2: Diffrazione di Bragg

 Diffondendo dei raggi X di lunghezza d'onda λ su un reticolo cristallino di passo si osservano picchi di diffrazione in corrispondenza di angoli di diffusione determinati dalla legge di Bragg

 $2 d \sin \theta = n \lambda$

 Questi angoli corrispondono a raggi riflessi il cui percorso ottico è un multiplo intero di λ, che quindi interferiscono costruttivamente.

L'esperimento di Davisson e Germer

- Davisson e Germer (1927) eseguirono degli esperimenti di diffrazione su reticoli atomici di cristalli di nichel, usando al posto dei raggi X, elettroni "monocromatici", cioè con energia fissata.
- Per energie degli elettroni tra i 50 ed i 100eV, Davisson e Germer osservarono pattern di diffrazione assolutamente analoghi a quelli dei raggi X.
- I picchi di diffrazione erano visibili in corrispondenza di angoli di diffusione determinati dalla legge di Bragg con

$$\sin \theta_n = \frac{n\lambda}{2d} = \frac{nh}{2d\sqrt{2mE}} \qquad n = 1, 2, \dots$$

come predetto dalla relazione di De Broglie.

- Interferenza costruttiva e interferenza distruttiva.
- Diffrazione.

- Problema 1. In uno degli esperimenti di Davisson-Germer, gli elettroni erano accelerati da una differenza di potenziale V = 54 Volt. Il reticolo di nichel aveva un passo d = 0.92Å. A che angolo θ₁ fu osservato il primo picco di diffusione?
- Problema 2. Nella stessa serie di esperimenti, Davisson e Germer mantennero fisso θ₁ e aumentarono il potenziale accelerante V: quale sarebbe dovuto essere il successivo valore di V per il quale avrebbero dovuto osservare un nuovo picco di diffrazione?

La regola di Bohr rivisitata da De Broglie

 La condizione di quantizzazione L = ħ n per l'atomo di idrogeno può essere riformulata in termini della lunghezza d'onda di De Broglie:

Le orbite degli elettroni atomici "permesse" sono quelle la cui lunghezza dell'orbita è pari ad un numero intero di lunghezze d'onda di De Broglie

Lunghezza dell' orbita = $n\lambda$ $n = 1, 2, \cdots$

• Verifichiamo che questa regola riproduce effettivamente $L = \hbar n$:

$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{p} \Rightarrow L = rp = n\frac{h}{2\pi} = n\hbar$$

Particella in una scatola

- Il vantaggio della nuova formulazione della regola di quantizzazione è che essa è applicabile a situazioni diverse da quella dell'atomo di idrogeno.
- Si consideri per esempio il caso di una particella di massa m che si muove in una scatola unidimensionale di lunghezza L, con pareti perfettamente riflettenti.



Figura 3: Buca uni-dimensionale

La quantizzazione degli impulsi in una scatola

- La particella si muove all'interno della scatola con impulso ±p che cambia di segno ogni volta che la particella urta le pareti della scatola.
- La lunghezza dell'orbita è quindi uguale a 2 L
- La condizione di quantizzazione nella formulazione di De Broglie implica che

$$\frac{h}{|p|} n = 2L \Rightarrow |p_n| = \frac{nh}{2L}$$

 Pertanto gli impulsi della particella in una scatola sono quantizzati.

La quantizzazione delle energie nella scatola

 Di conseguenza anche le energie di questo sistema sono quantizzate

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8mL^2}$$
 $n = 1, 2, ...$

- La conclusione è che l'esistenza di livelli energetici discreti non è una prerogativa dell'atomo di idrogeno. Anche l'energia di una particella in una scatola non assume tutti i valori reali positivi ma solo valori discreti.
- Si noti che in questo caso la dipendenza da n dei livelli energetici è n² e non n⁻² come era nel caso dell'idrogeno.

- Benché la nuova formulazione della regola di quantizzazione permette di considerare un sistema fisico diverso dall'atomo di idrogeno, è evidente che, in questa forma, la regola si applica ad un numero molto limitato di casi.
- Poiché $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$ la regola si applica nella forma data solo alle orbite per le quali il modulo dell'impulso è costante.

Una particella uni-dimensionale in un potenziale

- È naturale chiedersi se e come la regola di quantizzazione si estenda a situazioni in cui il modulo dell'impulso vari.
- Per esempio come si applichi al caso di una particella che si muove in un potenziale unidimensionale

$$E=\frac{p^2}{2\,m}+V(x)$$

 Da questa relazione ricaviamo che, per una energia E fissata, l'impulso p(x) è una funzione del punto x in cui si trova la particella

$$p(x) = \pm \sqrt{2 m (E - V(x))}$$

Una riscrittura apparentemente banale

Riscriviamo la regola di De Broglie nel caso in cui |p| è costante:

 $|\boldsymbol{p}| \times \text{Lunghezza dell' orbita} = nh$

Dividiamo l'orbita in piccoli tratti di lunghezza Δx, ognuno centrato in un punto x_i lungo l'orbita, con i = 1, ··· N e N molto grande:

Lunghezza dell'orbita =
$$\sum_{i} \Delta x$$

• Quindi la regola di De Broglie si riscrive:

 $\sum_{i} |\mathbf{p}| \Delta x = \mathbf{n} h$

(a) < (a) < (b) < (b)

92/253

 Questa riscrittura suggerisce però in modo naturale la seguente generalizzazione al caso di p(x) dipendente da x

$$\sum_i p(x_i) \, \Delta x = n \, h$$

 Nel limite in cui le lunghezze ∆x sono sempre più piccole la somma diventa un integrale:

$$\int_{\text{orbita}} dx \, p(x) = n \, h$$

- Dobbiamo precisare come vada inteso l'integrale \int_{orbita} "lungo l'orbita" nella formula precedente.
- Per capirlo, riconsideriamo di nuovo il caso della particella nella scatola a pareti riflettenti.
- In questo caso p non è costante ma assume solo due valori: ±|p|.

L'integrale lungo l'orbita per la particella nella scatola

- Possiamo dividere l'orbita in due tratti di lunghezza L: il tratto in cui p è positivo e la particella si muove (per esempio) dalla parete di sinistra a quella di destra e quello in cui p è negativo e la particella si muove in senso opposto.
- La somma nell'integrale si riduce quindi a due soli termini

|p|L + (-|p|)(-L) = nh

- Si osservi il punto importante: per ottenere il risultato corretto quando *p* è positivo dobbiamo prendere Δ*x* = *L* positivo, ma quando *p* è negativo dobbiamo prendere Δ*x* = *L* negativo.
- In altre parole dobbiamo intendere il prodotto p(x_i) ∆x sempre positivo.

La regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

- Il modo più elegante di esprimere questa prescrizione è quello di introdurre il vettore dx, definito come il vettore di modulo pari a Δx e orientato lungo la tangente all'orbita.
- In termini di $d\vec{x}$ la regola di quantizzazione si scrive

$$\int_{\text{orbita}} \vec{p}(x) \cdot d\vec{x} = nh \qquad n = 1, 2, \dots$$

 Questa formula è nota come regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld⁹.

⁹Originalmente Bohr aveva ottenuto la sua regola di quantizzazione per sistemi unidimensionali. Sommerfeld estese la regola a sistemi più generali con molti gradi di libertà.

L'oscillatore armonico

 Per esemplificare la regola di Bohr-Sommerfeld la applicheremo al caso di un oscillatore armonico unidimensionale:



Figura 4: Il potenziale dell'oscillatore armonico.

- Classicamente, tutte le energie E > 0 sono permesse.
- La particella percorre orbite chiuse, la cui ampiezza dipende dall'energia *E*.
- L'orbita di energia *E* giace sul segmento $[-x_0, x_0]$ dove

$$x_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}$$

98/253

L'oscillatore armonico quantistico

• Le orbite permesse dalla regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld sono quelle per cui

$$\int_{\text{orbita}} \sqrt{2 m (E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2)} \, dx = n h$$

 Lungo l'orbita la particella percorre il tratto da -x₀ a x₀ con p positivo ed il tratto da x₀ a -x₀ con p negativo. Pertanto

$$nh = \int_{\text{orbita}} dx \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} =$$

= $2 \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{2mE - m^2 \omega^2 x^2} =$
= $2m\omega \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{x_0^2 - x^2}$

I livelli dell'oscillatore armonico

 L'integrale che appare nel membro di destra è l'area di un semicerchio di raggio x₀, pari a π/2 x₀². Pertanto

$$nh = m\omega \pi x_0^2 = m\omega \pi \frac{2E}{m\omega^2}$$

 In definitiva otteniamo per i livelli energetici permessi di un oscillatore armonico la formula

 $E_n = n \hbar \omega$ $n = 1, 2, \ldots$

 Si noti che la dipendenza da in questo caso è lineare ed i livelli sono equispaziati.

- Quella che abbiamo descritto finora costitutisce, grosso modo, quella che oggi è nota come la "vecchia" teoria dei quanti.
- Questa "teoria" è in realtà una serie di regole ad hoc, che, come abbiamo discusso, hanno avuto un notevole successo predittivo ma che non costitutiscono una teoria logicamente coerente e completa.
- La sintesi di questa "teoria" è rappresentata dalla regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld.

Un emendamento alla meccanica classica

- La vecchia teoria dei quanti non abbandona i concetti classici di traiettoria, posizione e momento, equazioni del moto.
- La regola di BS è pensata come un emendamento aggiuntivo alla meccanica classica: è un principio che seleziona tra tutte le orbite classiche chiuse¹⁰ un sottoinsieme discreto di orbite quantisticamente permesse.
- La conseguenza più rilevante di questa regola è lo spettro discreto per i valori dell'energia, di cui abbiamo dato diversi esempi: i livelli dell'atomo di Bohr, i livelli di una particella in una scatola, i livelli dell'oscillatore armonico.

¹⁰Si noti che nella teoria di Bohr-Sommerfeld le orbite aperte (infinite) non sono affette da nessuna condizione di quantizzazione.

Un dualismo non risolto...

- Molte domande sono lasciate senza risposta nella "vecchia" teoria dei quanti.
- Per esempio, all'origine della teoria c'è l'aspetto corpuscolare della luce catturato dalla relazione di Einstein: ma come si concilia questo con gli aspetti ondulatori della luce che pure sono ben confermati dall'esperienza?
- L'altra idea centrale della teoria di BS è quella di un'onda associata agli elettroni e alle altre particelle atomiche. Ma cos'è esattamente quest'onda e come è essa compatibile col fatto, sperimentalmente verificato, che gli elettroni portano energia e momento in forma discreta, ovvero si comportanto come corpuscoli?

...ed alcuni "dettagli" poco chiari

- Nella condizione di quantizzazione di Bohr per le orbite degli idrogenoidi era evidente che il numero intero n dovesse partire da 1. Il valore n = 0 darebbe un valore infinito.
- D'altra parte il valore n = 0 darebbe un risultato accettabile se sostituito nelle formule per i livelli di una particella nella scatola o per quelli di un oscillatore armonico: in ambedue i casi n = 0 corrisponde all'orbita classica in cui la particella è ferma con energia nulla.
- Le orbite con n = 0 sono permesse o no, in questi casi?
 Esiste un livello di energia nulla per la particella nella scatola o per l'oscillatore armonico?
- La teoria di Bohr-Sommerfeld è vaga su questo punto.

La regola di BS è una approssimazione

- La risposta a queste domande, come pure la "risoluzione" del dualismo onda-corpuscolo, verrà dalla teoria quantistica "completa".
- La risposta della teoria quantistica "completa" sarà, grosso modo, che non esistono, per i due esempi fatti, orbite con energia nulla.
- Ma all'interno della teoria "completa" il concetto stesso di orbita non sarà più veramente applicabile!
- La formula di Bohr-Sommerfeld emergerà, nella teoria "vera", come una approssimazione valida, di norma, solo quando *n* è molto grande.

I livelli dell'oscillatore armonico corretti

- Risulterà in particolare che la formula per il livelli dell'oscillatore armonico non è esatta!
- Quella corretta è

$$E_n = n\hbar\omega + \frac{1}{2}\hbar\omega \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$

 Questa formula mostra da un lato che non esistono "orbite" dell'oscillatore armonico con energia nulla; dall'altro mostra che per n ≫ 1 i livelli esatti diventano molto vicini a quelli ottenuti dalla regola di Bohr-Sommerfeld.

Una benigna coincidenza?

- Benché la formula di Bohr-Sommerfeld sia dunque, nella teoria "completa", *in generale*, solo una formula approssimata, i livelli degli idrogenoidi ¹¹ ottenuti dalla regola di BS coincidono esattamente con quelli calcolati con la teoria "completa".
- Considerata l'importanza che lo stupefacente accordo tra la formula di Bohr per gli idrogenoidi e le osservazioni sperimentali ha avuto storicamente per l'affermarsi della teoria quantistica, si è tentati di dire che esattezza della formula di Bohr-Sommerfeld in questo caso particolare sia stata una benigna ed un po' "fortunosa" casualità.

¹¹Anche i livelli della particella in una scatola derivati dalla regola di BS sono quelli corretti purché si prenda $n \ge 1$.

- Il moto di una particella uni-dimensionale in un potenziale.
- Conservazione dell'energia.
- L'oscillatore armonico classico.
- **Problema 1.** Si calcolino i livelli energetici di una particella di massa *m* in un potenziale uni-dimensionale $V(x) = \sigma |x|$
- **Problema 2.** Si calcolino i livelli energetici di una particella di massa *m* che si muove lungo orbite circolari in un potenziale centrale $V(r) = \sigma r$.

Fine della seconda lezione

Terza lezione

Una scatola con tante palline

 Consideriamo una scatola posta contenente un numero molto grande N di palline.



Figura 5: Una scatola con tante palline

- Le palline nella scatola urtano tra loro e con le pareti della scatola, cambiando continuamente la loro energia, il loro impulso, etc.
- Se conoscessimo ad un dato momento le posizioni e le velocità di tutte le palline nella scatola e sapessimo come le palline si comportano quando urtano tra loro e con le pareti della scatola potremmo, in linea di principio, determinare le posizioni e le velocità di ciascuna pallina in tutti i tempi successivi.
- Quando il numero di palline diventa grande descrivere in questo modo lo stato del sistema è una impresa che diventa rapidamente disperata. E, spesso, anche poco sensata.

- In molti contesti infatti non siamo interessati a sapere dove si troverà ciascuna della N palline e con quale velocità ad un certo momento.
- Piuttosto siamo interessati a sapere quante palline ci saranno in una data zona della scatola, in media, in un istante di tempo dato. E quante palline avranno, in media, una certa velocità.
- Queste sono domande di tipo statistico: sono le domande che si pone la meccanica statistica.

Distribuzioni di probabilità

- Il concetto centrale per rispondere a questo tipo di domande è quello di distribuzione di probabilità.
- Siano:
 - N il numero delle palline nella scatola;
 - *x* è una variabile dinamica (posizione, velocità, impulso, energia, etc.) di una pallina;
 - $\Delta N(x)$ il numero di palline con variabile x compresa tra x e $x + \Delta x$

$$\frac{1}{N}\frac{\Delta N(x)}{\Delta x} \equiv f(x)$$

distribuzione di probabilità della variabile dinamica x

Distribuzioni di probabilità



Figure 4. Typical Probability Distribution Function (pdf)

Figura 6: Probability distribution.

- Di particolare importanza in fisica è la distribuzione di probabilità dell'energia.
- Conderiamo di nuovo un sistema con un grande numero di palline in una scatola che urtano tra loro e con le pareti della scatola scambiandosi energia, impulso etc.

La distribuzione di Boltzmann

 L'affermazione centrale della meccanica statistica è che, dopo un tempo sufficientemente lungo, la distribuzione delle energie delle palline non dipenderà piu dal tempo e, all'equilibrio

 $\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta E} = C\,\rho(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}$

dove

- C è una costante indipendente dalla energia;
- T è la temperatura (di equilibrio) del sistema,
- $\rho(E)$ è la densità delle orbite, che dipende dal sistema;
- k è la costante di Botlzmann, (1844-1906).

La costante di normalizzazione

• La costante di normalizzazion *C* è fissata dalla richiesta che l'integrale della distribuzione di probabilità sia pari ad 1:

$$\frac{1}{N} \int_0^\infty \Delta E \, \frac{\Delta N}{\Delta E} = 1$$

ovvero

$$\frac{1}{C} = \int_0^\infty dE \, C \, \rho(E) \, \mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}$$

119/253

La distribuzione di Boltzmann

In definitiva la distribuzione di Boltzmann si scrive

$$\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta E} = \frac{\rho(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}}{\int_0^\infty dE\,C\,\rho(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}}$$

 Per conoscerla, dato un sistema, è necessario quindi determinare preliminarmente il fattore ρ(E).

La distribuzione di Boltzmann



Figura 7: La distribuzione delle energie di Boltzmann ($\rho(E) = 1$)

- La gran parte delle palline, all'equilibrio termico, ha una energia *E* dell'ordine di *kT*.
- Pochissime palline avranno energia molto maggiore di kT.
- Ci aspettiamo quindi che le palline in media avranno una energia dell'ordine di ~ kT.

Lo spazio delle fasi

- Un'orbita in meccanica classica è identificata una volta assegnate le posizioni x_a ed gli impulsi p_a, con a = 1,...n di tutte le n particelle che compongono il sistema.
- L'insieme dei punti (x_a, p_a) definiscono lo spazio delle fasi del sistema.



Figura 8: Lo spazio delle fasi di una particella in una scatola

La densità delle orbite

Il fattore ΔE ρ(E) che appare nella formula di Boltzmann è il volume ΔV della regione dello spazio delle fasi che include tutte le orbite con energie comprese tra E e E + ΔE



Figura 9: La densità delle orbite

La densità delle orbite di una particella in un segmento

• Per esempio, per una particella in una scatola uni-dimensionale di lato *L*, le orbite con energia costante *E* sono rette orizzontali $p = \pm \sqrt{2 m E}$ nel piano (x, p).

Quindi

$$\Delta \mathcal{V} = \rho(E) \Delta E = 2 L \Delta p$$

Poiché

$$E = \frac{p^2}{2m} \Rightarrow \Delta E = \frac{p \, \Delta p}{m}$$

otteniamo

$$\Delta \mathcal{V} = \rho(E) \Delta E = 2 L \Delta p = L \sqrt{\frac{2 m}{E}} \Delta E$$

La densità delle orbite di un oscillatore armonico

Le orbite con *E* costante sono punti sulle ellissi nel piano (*x*, *p*):





Figura 10: Le orbite dell'oscillatore armonico nello spazio delle fasi

La densità delle orbite di un oscillatore armonico

 Poichè l'area dell'ellisse che include tutte le orbite con energia < <u>E</u> è

$$\mathcal{V}(E) = \pi \sqrt{2 \, m E} \sqrt{\frac{2 \, E}{k}} = \frac{2 \, \pi \, E}{\omega}$$

la densità delle orbite dell'oscillatore armonico è indipendente da E

$$\Delta \mathcal{V} =
ho(\mathbf{E}) \Delta \mathbf{E} = rac{2 \pi \Delta \mathbf{E}}{\omega}$$

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

La distribuzione di energia di un gas in una scatola

 Ragionando analogamente, ottentiamo per una pallina in una scatola 3-dimensionale la densità delle orbite

 $\Delta \mathcal{V} = \rho(E) \,\Delta E = L^3 \,4 \,\pi \, p^2 \,\Delta p = L^3 \,4 \,\pi \,\sqrt{2 \,m^3 E} \,\Delta E$

 La distribuzione delle energie delle particelle nella scatola è pertanto

$$\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta E} = C L^3 4 \pi \sqrt{2 m^3 E} e^{-\frac{E}{kT}}$$

<ロ> <回> <回> <回> < 回> < 回>

La distribuzione di energia di un gas in una scatola

 La costante C è determinata dalla condizione di normalizzazione

$$\int \Delta E \, \frac{\Delta N}{\Delta E} = N$$
$$C = \frac{1}{L^3} \, \frac{1}{\left(2 \, \pi \, m \, k \, T\right)^{\frac{3}{2}}}$$

In definitiva

$$\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta E} = \frac{2}{(k T)^{\frac{3}{2}}}\sqrt{\frac{E}{\pi}} e^{-\frac{E}{kT}}$$

L'energia media di un gas in una scatola

 Possiamo finalmente calcolare l'energia media di una pallina in una scatola in equilibrio termico

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty dE \, \frac{2}{(kT)^{\frac{3}{2}}} \sqrt{\frac{E}{\pi}} \, \mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}} \times E = \frac{3}{2} \, k \, T$$

• L' energia interna complessiva del gas è quindi

$$U = N \langle E \rangle = \frac{3}{2} k T N$$

• Ed il calore specifico a volume costante

$$c_V = rac{\partial U}{\partial T} = rac{3}{2} \, k \, N$$

risulta essere una costante indipendente dalla temperatura.

La distribuzione di energia di un "ensemble" di oscillatori

 Dalla densità delle orbite per un oscillatore armonico deriviamo la distribuzione di energie di un "ensemble" di oscillatori uni-dimensionali

$$\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta E} = C\frac{2\pi}{\omega}e^{-\frac{E}{kT}}$$

- *C* è determinato come al solito dalla condizione di normalizzazione.
- In definitiva

$$\frac{1}{N}\frac{\Delta N}{\Delta E} = \frac{1}{kT}e^{-\frac{E}{kT}}$$

L'energia media di un "ensemble" di oscillatori uni-dimensionali

 Possiamo quindi calcolare l'energia media di un oscillatore dell'ensemble in equilibrio termico

$$\langle E \rangle = \int_0^\infty dE \, \frac{1}{k \, T} \, \mathrm{e}^{-\frac{E}{k \, T}} \times E = k \, T$$

• L' energia interna complessiva del gas di oscillatori è quindi

 $U = N \langle E \rangle = N k T$

Il calore specifico a volume costante

$$c_V = rac{\partial U}{\partial T} = k N$$

anche in questo caso una costante indipendente dalla temperatura.

L'energia media di un insieme di oscillatori 3-dimensionali

 Possiamo analogamente calcolare l'energia media di un gas di oscillatori 3-dimensionali in equilibrio termico

 $\langle E \rangle = 3 \, k \, T$

L' energia interna complessiva del gas è quindi

 $U = N \langle E \rangle = 3 k T N$

Il calore specifico a volume costante

$$c_V = rac{\partial U}{\partial T} = 3 \, k \, N$$

risulta essere una costante indipendente dalla temperatura.

Il teorema di equipartizione dell'energia

 In tutti i casi che abbiamo considerato, l'energia interna dell' "ensemble" di N sotto-sistemi meccanici è risultata essere

$$U = g imes rac{1}{2} k T N$$

dove g è un numero intero pari a:

- 1 per particelle libere in una scatola 1d, $E = \frac{p^2}{2m}$;
- 2 per oscillatori armonici 1d, $E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$;
- 3 per particelle libere in una scatola 3d, $E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m}$;
- 6 per oscillatori armonici 3d,

 $E = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2(x^2 + y^2 + z^2);$

Il teorema di equipartizione dell'energia

- La regola generale, che va sotto il nome di teorema di equipartizione sembra dunque essere:
 - Un sistema meccanico la cui energia *E* espressa in funzione delle *p* e delle *x* contiene *g* termini quadratici ha un'energia interna pari a $g \times \frac{1}{2} k T N$.
 - Corrispondentemente il calore specifico a volume costante per un tale sistema è $c_V = g \times \frac{1}{2} k N$.

 La dimostrazione del teorema di equipartizione non è difficile, ma richiede l'introduzione di un concetto ausiliario, la funzione di partizione

$$Z(T) \equiv \int_0^\infty dE \,\rho(E) \,\mathrm{e}^{-\frac{E}{kT}}$$

L'utilità della funzione di partizione poggia su questa identità

$$-\frac{\partial Z(T)}{\partial \beta} = \int_0^\infty dE \,\rho(E) \, E \, \mathrm{e}^{-\beta \, E} \qquad \beta \equiv \frac{1}{k \, T}$$

・ロト ・回ト ・ヨト ・ヨト

135/253

L'energia interna e la funzione di partizione

 L'energia interna dell'ensemble si scrive quindi in termini della funzione di partizione

$$U = N \langle E \rangle =$$

= $N \frac{\int_0^\infty dE \rho(E) e^{-\beta E} E}{\int_0^\infty dE \rho(E) e^{-\beta E}} =$
= $-\frac{N}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial \beta}$

136/253

La funzione di partizione come integrale sullo spazio delle fasi

 Poiché, come abbiamo detto, la densità delle orbite ρ(E) è il volume nello spazio delle fasi

$$\Delta E
ho(E) = \int dx \, dp,$$

la funzione di partizione si riscrive come un integrale sullo spazio delle fasi, avendo espresso E in termini delle x e delle p

$$Z(T) = \int dx \, dp \, \mathrm{e}^{-\beta \, E(x,p)}$$

La funzione di partizione di un sistema quadratico

La funzione di partizione per un sistema con

$$E = \sum_{a=1}^{g} c_a q_a^2$$

dove q_a , con a = 1, ..., g, sono coordinate o impulsi è pertanto

$$Z(T) = K \int \prod_{a} dq_{a} e^{-\beta \sum_{a=1}^{g} c_{a} q_{a}^{2}} =$$
$$= K \prod_{a=1}^{g} \int_{-\infty}^{\infty} dq_{a} e^{-\beta c_{a} q_{a}^{2}}$$

 K è il fattore, indipendente dalla temperatura, che è il volume delle coordinate dello spazio delle fasi diverse dalle g coordinate q_a.

Un integrale fondamentale

 Per calcolare quest'integrale multiplo ci basta conoscere il valore dell'integrale indefinito sull'asse reale

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx \, \mathrm{e}^{-c \, x^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \qquad c > 0$$

Quindi

$$Z(T) = K \prod_{a=1}^{g} \sqrt{\frac{\pi}{\beta c_a}} = \left(K \prod_{a=1}^{g} \sqrt{\frac{\pi}{c_a}}\right) \beta^{-\frac{g}{2}}$$

Il teorema di equipartizione dimostrato

In definitiva

$$U = -\frac{N}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial \beta} = -N \frac{\left(-\frac{g}{2}\right) \beta^{-\frac{g}{2}-1}}{\beta^{-\frac{g}{2}}} =$$
$$= N \frac{g}{2} \frac{1}{\beta} = N g \frac{k T}{2}$$

4 ロ ト 4 回 ト 4 直 ト 4 直 ト 重 の Q (0)
140/253

- Consideriamo un ensemble composto di un sistema di due palline legati da una asta rigida
- In questo caso

g = 3 + 2 = 5

Quindi

$$c_V = \frac{5}{2} k N$$

- Supponiamo che l'asta non sia perfettamente rigida ma permetta delle vibrazioni in senso longitudinale
- In questo caso

g = 3 + 2 + 1 + 1 = 7

Quindi

 $c_V = \frac{7}{2} \, k \, N$

 ・<
 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・

 ・
 <li

• Per gas monoatomici, la previsione $\frac{c_V}{Nk} = 3/2$ è abbastanza ben soddisfatta per un ampio intervallo di temperature:

He	Ar	Kr
1.515	1.497	1.471

Un conflitto con l'esperimento

• Per i gas biatomico, $\frac{c_V}{Nk}$ dipende sensibilmente dalla temperatura: per basse temperatura $\frac{c_V}{Nk}$ decresce e tende a $\frac{3}{2}$. Per grandi temperature cresce. Per esempio per H_2 , $\frac{c_V}{Nk} = \frac{5}{2}$ solo per $T \approx 300K$.



Figura 11: I calori specifici dei gas diatomici
- Oltre ad essere in disaccordo con l'esperimento nella teoria classica dei calori specifici è insita una difficoltà di principio.
- Per esempio, abbiamo visto che in una certa schematizzazione di una molecola diatomica possiamo pensare che g = 5. Ma cè una schematizzazione più raffinata — quella che tiene conto dei piccoli movimenti vibratori lungitudinali della molecola — in cui g = 7.
- Abbiamo visto che in alcuni casi il valore "meno raffinato"
 g = 5 è più in accordo con l'esperimento del valore g = 7.

Un concetto mal definito

- Potremmo aumentare la raffinatezza della nostra descrizione ed aggiungere per esempio i movimenti rotatori intorno all'asse della molecola: questo farebbe aumentare g!
- Qual'è dunque la vera predizione classica per c_V?
 5/2,7/2,9/2,...?
- Il punto centrale è che il concetto di "gradi di libertà" g è mal definito: g dipende da quanto è accurata la nostra descrizione del sistema. Il valore di c_V non dovrebbe dipendere in maniera discreta da g !

- Quello che si osserva sperimentalmente è che le cose vanno come se g variasse con continuità con la temperatura.
- Al diminuire di *T* i gradi di libertà *g* sembrano diminuire: come se venissero man mano congelati all'abbassarsi della temperatura.
- Per esempio per energie sufficientemente basse $\frac{c_V}{Nk}$ per un gas diatomico tende al valore $\frac{3}{2}$, come se il grado di libertà rotazionale si congelasse.

Una difficoltà molto seria

- Maxwell nel 1859 scrisse uno degli articoli fondamentali della teoria cinetica dei gas.
- Nonostanti i successi della sua teoria nel dedurre le proprietà termodinamiche come le equazioni di stato, in termini microscopici, è chiarissimo a Maxwell che il teorema di equipartizione dell'energia costituisca un problema molto serio, al punto che scriverà in seguito, riferendosi sostanzialmente al teorema di equipartizione:

"I have now put before you what I consider to be the greatest difficulty yet encountered by the molecular theory."

 Altri fisici dell'epoca, J. H. Jeans (1877-1946), Lord Rayleigh (John William Strutt) (1842-1919), si occuparono di questa difficoltà.

La Meccanica Statistica Quantistica

- Un po' sorprendentemente, la meccanica statistica quantistica è più semplice di quella classica, dal punto di vista concettuale.
- La ragione è che, come abbiamo visto, i sistemi come le molecole in una scatola, gli oscillatori armonici etc. hanno uno spettro di energie discreto e non continuo.
- Le distribuzioni di probabilià rilevanti saranno pertanto in meccanica statistica quantistica quelle discrete. E queste sono più semplici da trattare.

- Supponiamo di avere un ensemble quantistico, composto da un numero grande di sistemi identici i cui livelli di energia sono E₀, E₁, E₂,....
- La legge di Boltzmann, nel caso quantistico, dice allora che la probabilità che uno dei sistemi dell'ensemble si trovi in un livello *E_i* è

 $P_i = C e^{-\frac{E_i}{kT}}$

< 日 > < 同 > < 回 > < 回 > < □ > <

La distribuzione di Boltzmann per i livelli discreti

• La costante C è fissata dalla condizione

$$\sum_{i} P_{i} = T$$

per cui¹²



¹²Nella teoria quantistica completa, in questa formula il fattore esponenziale $e^{-\frac{E_i}{kT}}$ è rimpiazzato da $g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$ dove i fattori g_i sono interi positivi che possono essere diversi da 1, associati alla degenerazione del livello E_i . Nella "vecchia" teoria quantistica questi fattori non sono calcolabili.

L'energia media e la funzione di partizione quantistica

• L'energia media di un sistema dell'ensemble è pertanto

$$\langle E \rangle = \sum_{i} E_{i} P_{i} = \frac{\sum_{i} E_{i} e^{-\frac{E_{i}}{kT}}}{\sum_{j} e^{-\frac{E_{j}}{kT}}} = -\frac{1}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial \beta}$$

dove abbiamo introdotto la funzione di partizione quantistica

$$Z(T) = \sum_{j} e^{-\beta E_{j}} \qquad \beta \equiv \frac{1}{k T}$$

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

La funzione di partizione di un oscillatore armonico

- Abbiamo visto che per un oscillatore armonico 1d: $E_n = \hbar \omega n.$
- Pertanto la funzione di partizione è

$$Z(T) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}} =$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}$$

dove

$$\boldsymbol{q} \equiv \mathrm{e}^{-\frac{\hbar\,\omega}{k\,T}} = \mathrm{e}^{-\beta\,\hbar\,\omega}$$

<□ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > <

Possiamo allora calcolare l'energia media dell'oscillatore

$$egin{aligned} \langle E
angle &= -rac{1}{Z(T)} \, rac{\partial Z(T)}{\partial eta} = \ &= -(1-q) \, rac{1}{(1-q)^2} \, (-\hbar\,\omega) \, q = \ &= rac{q}{(1-q)} \, \hbar\,\omega = rac{\hbar\,\omega}{\mathrm{e}^{\beta\,\hbar\,\omega} - 1} \end{aligned}$$

L'energia media per alte temperature

 L'energia media (E) dell'oscillatore armonico per grandi temperature T ≫ ħω diventa

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{\mathrm{e}^{\beta \hbar \omega} - 1} \approx \frac{\hbar \omega}{\beta \hbar \omega} = \frac{1}{\beta} = k T \qquad k T \gg \hbar \omega$$

- Ad alte temperature ritroviamo il valore classico predetto dal teorema di equipartizione!
- Ad alte temperature quindi il contributo al calore specifico diventa quello classico

$$c_V = rac{\partial U}{\partial T} = N rac{\partial \langle E
angle}{\partial T} pprox N k$$

L'energia media per basse temperature

Per basse temperature però

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar \omega}{\mathrm{e}^{\beta \, \hbar \omega} - 1} \approx \hbar \, \omega \, \mathrm{e}^{-\frac{\hbar \, \omega}{k \, T}} \qquad k \, T \ll \hbar \omega$$

l'energia media va esponenzialmente a zero.

• Il contributo al calore specifico diventa

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} = N \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \approx N k \frac{(\hbar \, \omega)^2}{(k \, T)^2} e^{-\frac{\hbar \, \omega}{k \, T}} \qquad k \, T \ll \hbar \omega$$

che va a zero esponenzialmente: il grado di libertà corrispondente si congela, esattamente come osservato da Jeans!

La teoria dei calori specifici quantistica

- Possiamo applicare le idee esposte ai gas monatomici, a quelli diatomici etc.
- La meccanica quantistica risolve il paradosso del teorema di equipartizione e del concetto di gradi di libertà.
- Possiamo attribuire ad un sistema meccanico il numero di gradi di libertà che vogliamo: traslazionali, rotazionali, vibrazionali, etc.
- Il punto importante è che ad ognuno di questi sarà associata certa energia caratteristica △E che è la distanza tipica tra i livelli discreti.

Gradi di libertà quantistici

- Quali di questi gradi di libertà sono rilevanti dipende dalla temperatura.
- Ad una temperatura sufficientemente alta, cioè quando *k* T ≫ ΔE quel grado di libertà si comporterà classicamente e darà contributo ¹/₂ kN al calore specifico.
- Ma quando le temperature scendono e diventano
 k T « ΔE, la natura quantistica di quel grado di libertà si manifesta: il contributo di quel grado di libertà si congela.

- Distribuzioni di probabilità continue e discrete.
- Orbite in meccanica classica: spazio delle fasi.
- Equilibrio termodinamico.
- Energia interna di un gas.
- Calori specifici.

Problemi per l'autovalutazione

- Si determini la densità $\rho(x)$ di una colonna di gas di sezione fissata e altezza *h* in equilibrio termico a temperatura costante *T*, in funzione dell'altezza $x \le h$, conoscendo la densità ρ_0 all'altezza x = 0.
- Un pendolo di lunghezza *l* = 1*m* e massa *m* = 1*kg* sulla superficie terrestre è in equilibrio termico a temperatura *T* = 300*K*. Qual'è lo scarto quadratico medio delle oscillazioni del pendolo dal suo punto di equilibrio?
- Si consideri un gas monoatomico ideale composto da atomi di massa m = 10⁻²⁷kg, posto in una scatola
 3-dimensionale di lato L = 10⁻²m. Fino a quali temperature T ci si aspetta che valga il risultato classico c_V = ³/₂ k T?

La meccanica statistica del campo e.m.

 Un problema che ci si può porre è considerare una scatola a temperatura fissata contenente non palline ma onde elettromagnetiche, ovvero radiazione.



Figura 12: Onde elettromagnetiche in una scatola

La meccanica statistica di una corda vibrante

 ν

- Per affrontare questo problema, cominciamo con considerare, invece del campo e.m., una corda vibrante.
- Una corda di lunghezza *L* ed estremi fissi vibra in modi le cui frequenze sono multipli interi di una frequenza fondamentale:

$$n = n \frac{c}{2L} \qquad A_n(x) = A_0 \sin \frac{\pi n}{L} x$$

Figura 13: Le frequenze di vibrazione in una scatola, $\lambda = \frac{c}{\nu}$

La densità dei modi di vibrazione della corda

 Il numero Δn di armoniche di una corda vibrante compreso tra una frequenza ν ed una frequenza ν + Δν è pertanto

$$\Delta n = \frac{\Delta \nu}{\frac{c}{2L}} = \frac{2L}{c} \Delta \nu$$

 La densità spettrale dei modi di vibrazione della corda è quindi

$$\frac{\Delta n}{\Delta \nu} = \frac{2L}{c}$$

 Il campo elettromagnetico in una scatola di lato L vibra in modi che sono identificati da 3 numeri interi n
 in e (n_x, n_y, n_z) positivi:

$$E_{\vec{n}}(x,y,z) = E_{\vec{n}}^{(0)} \sin \frac{\pi n_x}{L} x \sin \frac{\pi n_y}{L} y \sin \frac{\pi n_z}{L} z$$

La frequenza di questa onda è

$$\nu_{\vec{n}} = \frac{c}{2L} |\vec{n}| = \frac{c}{2L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}$$

164/253

La densità dei modi di vibrazione dell'onda e.m. in una scatola

• Il numero N_{ν} di modi di vibrazione con frequenza $\nu_{\vec{n}}$ minore di ν sono pertano uguali al numero di punti del reticolo degli interi $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$ positivi compresi in una sfera di raggio $\frac{2L}{c}\nu$:

$$\vec{n}| = \frac{2L}{c} \nu_{\vec{n}} \le \frac{2L}{c} \nu$$

Il volume di questo spicchio di sfera è

$$\mathcal{V}_{
u} = rac{1}{8} rac{4 \, \pi}{3} \, (rac{2 \, L}{c})^3 \,
u^3$$

I numeri d'onda e.m. in una scatola

$$N_{\nu} = \mathcal{V}_{\nu} = \frac{4\pi}{3} \left(\frac{L}{c}\right)^3 \nu^3$$

• Il numero di modi di vibrazione compreso tra $\nu e \nu + \Delta \nu \dot{e}$ invece pari al volume dello spicchio di guscio sferico di raggio $\frac{2L}{c} \nu$ e spessore $\frac{2L}{c} \Delta \nu$

$$\Delta N_{\nu} = 4 \pi \left(\frac{L}{c}\right)^3 \nu^2 \, \Delta \nu$$

・ロト () 、 () , (

Un numero di oscillatori infinito

- Ognuno di questi modi di vibrazione si comporta come un oscillatore armonico di frequenza ν_k.
- Il campo e.m. nella scatola può essere pensato come un sistema composto da un numero infinito di oscillatori aromonici di frequenze $\nu_{\vec{k}}$
- Il teorema di equipartizione ci dice che se il campo e.m. in una scatola è in equilibrio termico con della materia a temperatura *T*, ognuno di questi oscillatori avrà energia uguale a *kT*.

• Pertanto, la meccanica statistica classica prevede per l' energia interna associata ai modi vibrazione e.m. con frequenza compresa tra $\nu e \nu + \Delta \nu$

$$\Delta U = 2 \Delta N_{\nu} k T = \frac{8 \pi L^3}{c^3} \nu^2 \Delta \nu k T$$

- Il fattore 2 è stato introdotto perchè per ogni fissata frequenza di vibrazione ci sono due polarizzazioni dell'onda.
- Questa è la formula di Rayleigh-Jeans per la distribuzione in frequenza della energia della radiazione di corpo nero.

Ancora un conflitto con l'esperimento...

- Questo calcolo classico implica che l'energia media delle onde di frequenza ν, cresca come il quadrato della frequenza: tanto più è alta la frequenza tanta più energia elettromagnetica dovrebbe essere contenuta nella scatola.
- Questo non è lo spettro sperimentalmente osservato di un corpo nero!

- Secondo questa predizione della fisica classica l'energia elettromagnetica totale contenuta nella scatola sarebbe dunque infinita perché ci sono armoniche con frequenze arbitrariamente alte.
- A questo problema viene dato il nome di catastrofe ultravioletta.
- È un problema irresolubile nella fisica classica.

La catastrofe ultravioletta



Figura 14: La catastrofe ultravioletta e lo spettro osservato

La meccanica statistica quantistica del campo e.m.

- In meccanica quantistica la formula di Rayleigh-Jeans non è corretta per lo stesso motivo per cui i calori specifici classici non sono corretti.
- Abbiamo visto che l'energia media di un oscillatore quantistico in equilibrio termico a temperatura T non è k T.

La soluzione della catastrofe UV

L'energia media di un oscillatore quantistico è

 $\frac{h\nu}{\mathrm{e}^{\frac{h\nu}{kT}}-1}$

- Per $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$ ovvero per basse frequenze questa energia è pari al valore classico kT.
- Per ^{hν}/_{kT} ≫ 1 ovvero per alte frequenze questa energia è invece esponenzialmente piccola.
- Il contributo all'energia interna delle alte frequenze è pertanto soppresso. E questo risolve la catastrofe ultravioletta.

 Pertanto la meccanica statistica quantistica prevede per lo spettro della radiazione e.m.

$$\Delta U = \Delta \nu \, \frac{8 \, \pi \, L^3}{c^3} \, \nu^2 \, \frac{h \nu}{e^{\frac{h \nu}{k \, \tau}} - 1}$$

che è la formula per lo spettro di corpo nero di Planck.

- Lo spettro di un corpo nero dipende solo dalla temperatura del corpo. Questa è una conseguenza del secondo principio della termodinamica.
- Per questa ragione una misura dello spettro della radiazione di corpo nero permette di determinare la temperatura di quel corpo. È per questo che possiamo parlare di temperatura della radiazione.

Lo spettro di corpo nero



Figura 15: Spettro di un corpo nero ideale. $\lambda = \frac{c}{\nu}$ è la lunghezza d'onda

- Il corpo nero è una astrazione: è definito come un oggetto posto ad una temperatura costante che assorbe tutta la radiazione che lo colpisce — ovvero un oggetto perfettamente opaco e non riflettente.
- In laboratorio un corpo nero è approssimato da una cavità con un piccolo buco: la radiazione che entra nella cavità attraverso il foro sarà riflessa molte volte dalle pareti prima di fuoriuscire. Quindi anche se le pareti non sono perfettamente assorbenti, il buco apparirà pressoché nero.

Il corpo nero in laboratorio



Figura 16: I raggi blu entranti sono assorbiti completamente mentre quelli rossi indicano la radiazione termica che fuoriesce dal foro.

- L'aspetto problematico della derivazione della formula di Planck presentata è aver dovuto considerare un sistema fisico — il campo e.m. in una scatola — equivalente ad un numero infinito di oscillatori armonici (ovvero i modi normali nella scatola).
- La fisica (classica e quantistica) di sistemi con un numero infinito di gradi di libertà va sotto il norme di teoria dei campi (classica e quantistica). Una sua discussione soddisfacente non realistica in un corso a livello delle secondarie.

La decomposizione del campo e.m. in modi

 Nella nostra trattazione il punto più insoddisfacente e motivato in maniera soltanto euristica è stata l'affermazione:

Un campo e.m. in una scatola è equivalente ad un numero infinito di oscillatori armonici

 Una giustificazione più precisa di questa affermazione richiede la teoria della decomposizione in modi di Fourier di una funzione.
Modi diversi di derivare la formula di Planck

- Esistono strade alternative che si possono seguire per presentare la formula di Planck in un contesto più elmentare.
- Ciascuna di esse in qualche modo deve affrontare il problema di descrivere un campo, e quindi di un sistema fisico più complesso di quelli con cui gli studenti delle secondarie sono ragionevolmente familiari — palline, pendoli, oscillatori, etc.

Materia in equilibrio con la radiazione

- Una alternativa (cfr. Feynmann, Vol 1) è considerare della materia, per esempio degli oscillatori armonici carichi, nella scatola, contenente la radiazione, in equilibrio termico con essa.
- Questi oscillatori carichi emettono ed assorbono radiazione. All'equilibrio queste due radiazioni si devono bilanciare.

Energia assorbita ed emessa

- L'energia assorbita da un oscillatore armonico carico sottoposto ad un campo elettrico variabile è calcolabile con metodi elementari.
- Per calcolare l'energia emessa, si deve fare uso della formula $\frac{dU}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \vec{a}^2$ per la potenza irraggiata da un carica accelerata, che abbiamo già menzionato a proposito dell'instabilità dell'atomo classico di Rutherford.
- Eguagliando l' energia assorbita ed emessa da un oscillatore armonico carico in equilibrio termico con la radiazione di corpo nero è possibile arrivare alla formula di Planck.
- Il passaggio non elementare in questa derivazione è l'uso della formula per la potenza emessa da una carica accelerata.

Fine della terza lezione

Quarta lezione

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

Una teoria di successo ma insoddisfacente

- Nonostante il successo della teoria di Bohr-Sommerfeld nello spiegare un gran numero di fatti sperimentali, la teoria non sembra completamente soddisfacente sul piano logico.
- Quello che abbiamo visto nelle sezioni precedenti è che ci sono alcune situazioni fisiche in cui le onde elettromagnetiche manifestano un comportamento corpuscolare (effetto fotoelettrico, effetto Compton) ed altre situazioni fisiche in cui le particelle come gli elettroni esibiscono una natura ondulatoria (esperimento di Davisson e Germer).

Il dualismo onda-corpuscolo

- Ma i due concetti fisici quello di onda e quello di particella — sembrano, a prima vista, essere non soltanto molto diversi tra loro, ma per certi versi, incompatibili.
- Vogliamo approfondire questo apparente conflitto fra comportamento ondulatorio e comportamento corpuscolare per capire in che modo la meccanica quantistica evita una potenziale contraddizione logica ¹³.

¹³La discussione che segue è largamente inspirata da quella in *La Fisica di Feynman*, Vol. 3, di R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands,(1975) Inter European Editions, B.V.

- Il fenomeno caratteristico delle onde, che più chiaramente ne evidenzia la differenza con le particelle, è quello della diffrazione.
- Consideriamo pertanto uno schermo con due fenditure A e B ed una sorgente posta da un lato dello schermo ed un rivelatore costituito da un piano posto ad una distanza L dall'altro lato dello schermo con le due fenditure.

L'esperimento con le due fenditure per palline classiche



Figura 17: Un esperimento con palline classiche.

L'esperimento con le due fenditure per delle onde classiche



Figura 18: Un esperimento con onde.

- Confronteremo tra loro le due situazioni in Fig. 17 in cui la sorgente emette palline e quella in Fig. 18 in cui la sorgente emette onde.
- Il rivelatore misurerà il flusso il numero di particelle o l'intensità dell'onda in arrivo sullo schermo, come funzione della posizione x lungo il piano.

Energia ed impulso a blocchi

- Consideriamo dapprima il caso in cui la sorgente emette in tutte le direzioni, in modo casuale, ma ad un ritmo uniforme nel tempo, particelle classiche (proiettili di un fucile, per esempio) tutte uguali tra loro ed indistruttibili
- Parte di queste particelle passeranno attraverso le fenditure nello schermo per essere rivelate sul piano posto a distanza L dallo schermo con le due fenditure.
- Il rivelatore misurerà l'arrivo di particelle a blocchi, ovvero, o rivelerà ad un dato istante l'arrivo di una particella (sotto forma di energia e impulso) o non rivelerà nulla.

Il flusso di palline sullo schermo

- Indichiamo con N_A(x) (N_B(x)) il numero di particelle che arrivano nel punto x in un certo intervallo di tempo, quando la fenditura A (rispettivamente B) è aperta mentre la fenditura B (rispettivamente, A) è chiusa.
- Indichiamo con N_{AB}(x) il numero di particelle in arrivo nello stesso intervallo di tempo nella posizione x quando ambedue le fenditure sono aperte. Ci aspettiamo, per palline classiche del genere descritto, che

 $N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$

Le palline passano o da A o da B

- Infatti le N_{AB}(x) particelle che arrivano in x quando ambedue le fenditure sono aperte possono essere divise tra le particelle che sono passate attraverso la fenditura A e quelle che sono passate attraverso B.
- Ma il numero di particelle che sono passate attraverso A è uguale (in media) al numero di palline che passano attraverso A quando la fenditura B è chiusa, che abbiamo denotato con N_A(x).
- Analogamente il numero di particelle che arrivano in x essendo passate per B quando le due fenditure sono aperte è (in media) uguale a N_B(x).

Da questo consegue che

 $N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$

- Un modo di esprimere questa relazione è di dire che il flusso di particelle classiche attraverso le due fenditure non mostra interferenza.
- Si noti che la possibilità di distinguere, in linea di principio, le palline passate da A e da B poggia sul fatto che le palline seguono delle traiettorie nello spazio, anche se non sempre siamo interessati o in grado di calcolarle.

- Consideriamo ora il caso in cui la sorgente emette delle onde, che supponiamo essere monocromatiche ovvero di lunghezza d'onda λ fissata.
- Il rivelatore misurerà in questo caso l'intensità del flusso ondoso in arrivo in *x*.
- Questa grandezza è una grandezza continua e non discreta, diversamente dal caso delle particelle.

- Indichiamo con *I_A(x)* (rispettivamente *I_B(x)*) l'intensità del flusso ondoso in arrivo nel punto *x*, quando la fenditura *A* (rispettivamente *B*) è aperta mentre la fenditura *B* (*A*) è chiusa.
- Indichiamo con I_{AB}(x) l'intensità del flusso ondoso in arrivo nel punto x quando ambedue le fenditure sono aperte.
- È caratteristico dei fenomeni ondosi che

 $I_{AB}(x) \neq I_A(x) + I_B(x)$

- Benché il comportamento ondulatorio differisca marcatamente da quello corpuscolare la matematica che lo governa non è molto più complicata.
- La formula per $I_{AB}(x)$ è

 $I_{AB}(x) = I_A(x) + I_B(x) + 2\sqrt{I_A(x) I_B(x)} \cos \delta_{AB}(x)$

- L'angolo $\delta_{AB}(x)$ è determinato dalla differenza tra i percorsi delle onde emesse da *A* e da *B* per arrivare in *x*.
- Se chiamiamo L_A(x) e L_B(x) rispettivamente le lunghezze dei percorsi delle onde che partono da A e da B ed arrivano in x, allora

$$\delta_{AB}(x) = 2\pi \frac{(L_A(x) - L_B(x))}{\lambda}$$

- La formula per l'intensità I_{AB}(x) può essere riscritta in un modo molto conveniente facendo uso dei numeri complessi.
- Associamo alle onde che passano rispettivamente per A e per B i due numeri complessi

 $\psi_A(x) = \sqrt{I_A(x)} e^{i \,\delta_A(x)} \qquad \psi_B(x) = \sqrt{I_B(x)} e^{i \,\delta_B(x)}$

dove

$$\delta_A(x) = 2 \pi \frac{L_A(x)}{\lambda} \qquad \delta_B(x) = 2 \pi \frac{L_B(x)}{\lambda}$$

< □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □ > < □

- $\psi_{A,B}(x)$ sono chiamate le ampiezze (complesse) delle onde passanti per *A* e per *B* rispettivamente.
- Le intensità corrispondenti si ottengono dalle ampiezze prendendo i moduli quadri delle ampiezze:

$$I_{A}(x) = |\psi_{A}(x)|^{2}$$
 $I_{B}(x) = |\psi_{B}(x)|^{2}$

 La relazione di interferenza si riscrive in modo semplice in termini delle ampiezze complesse

$$I_{AB}(x) = |\psi_A(x) + \psi_B(x)|^2$$

Le ampiezze delle onde si sommano

• Quindi, se $\psi_A(x)$ (rispettivamente $\psi_B(x)$) è l'ampiezza dell'onda che arriva in *x* quando solo la fenditura *A* (rispettivamente *B*) è aperta, l'ampiezza dell'onda che arriva in *x* quando ambedue le fenditure sono aperte è

 $\psi_{AB}(x) = \psi_A(x) + \psi_B(x)$

 Possiamo sintetizzare questa discussione dicendo che, per le onde, non si sommano le intensità ma si sommano le ampiezze (complesse).

Una variante dell'esperimento di Davisson e Germer

 Discutiamo ora quello che succede quando nell'esperimento delle due fenditure descritto nella sottosezione precedente la sorgente emette particelle quantistiche: elettroni, protoni, neutroni, fotoni etc.



Figura 19: Un esperimento con particelle quantistiche.

- Da un lato risulta sperimentalmente che il rivelatore di particelle quantistiche misura l'arrivo di energia ed impulso a "blocchi", come per le particelle classiche.
- Ogni particella risulterà uguale ad un altra (rilascerà la stessa energia e lo stesso impulso) e il rivelatore non misurerà mai l'arrivo di una frazione o di un multiplo di particella.
- Da questo punto di vista le particelle quantistiche trasportano energia ed impulso in maniera discreta, in unità tutte identiche tra loro: sono corpuscoli, come le palline classiche considerate nella sottosezione precedente.

Le particelle quantistiche interferiscono

- D'altro lato, sperimentalmente (esperimento di Davisson e Germer e tutta una serie di esperimenti successivi simili a questo che stiamo descrivendo), risulta anche che la formula per il numero medio di particelle $N_{AB}(x)$ che arrivano in x quando ambedue le fenditure sono aperte non è la somma di $N_A(x)$ e $N_B(x)$.
- Piuttosto vale una relazione come la seguente

 $N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x) + 2\sqrt{N_A(x) N_B(x)} \cos \delta_{AB}(x)$

- Per esempio, ci sono punti *x* dello schermo quelli per i quali $\delta_{AB}(x) = \pi$ — dove, quando ambedue le fenditure sono aperte, arrivano meno particelle di quando è aperta una sola fenditura!
- A prima vista questo fatto sperimentale sembra essere logicamente incoerente.

- Visto che le particelle quantistiche sono, come abbiamo detto, discrete e che non si dividono in due sembra intuitivo pensare che le particelle che arrivano in x, quando sia A che B sono aperte, passino o per A o per B.
- Ma se così fosse, per lo stesso ragionamento che abbiamo fatto nel caso delle particelle classiche, dovrebbe necessariamente risultare che

 $N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$

Un flusso di particelle rarefatto

- Per esseri sicuri che il numero di particelle che arriva in x passando per A quando B è aperta è lo stesso (in media) di quello che arriva in x quando B è chiusa, possiamo usare un flusso di particelle molto rarefatto in modo che le particelle passino attraverso lo schermo, in media, una alla volta.
- Anche questa variante dell'esperimento è fisicamente realizzabile (ed è stata realizzata).
- Il risultato è che, se aspettiamo un tempo sufficientemente lungo, risulta che la formula valida, per le particelle quantistiche, è ancora quella che mostra interferenza.

 La conclusione di questo è che, per le particelle quantistiche, non può essere vero che, quando ambedue le fenditure sono aperte, le particelle passino o per A o per B.

Quando ambedue le fenditure sono aperte non si può dire esattamente per dove le particelle passino.

Le ampiezze per particelle

- Possiamo però dire precisamente in che modo la "situazione fisica"¹⁴ delle particelle che arrivano in x quando ambedue le fenditure sono aperte sia collegata alle "situazione fisiche" in cui solo una fenditura è aperta.
- Anche in questo caso possiamo introdurre dei numeri complessi definiti da

$$\psi_{A}(x) = \sqrt{N_{A}(x)} e^{i \delta_{A}(x)} \qquad \psi_{B}(x) = \sqrt{N_{B}(x)} e^{i \delta_{B}(x)}$$
$$\delta_{A}(x) = 2 \pi \frac{L_{A}(x)}{\lambda} \qquad \delta_{B}(x) = 2 \pi \frac{L_{B}(x)}{\lambda}$$
$$\lambda = \frac{h}{p}$$

che chiameremo ampiezze.

¹⁴In meccanica quantistica questa viene indicata col nome di *stato fisico* o semplicemente *stato*.

- ψ_A(x) e ψ_B(x) sono le ampiezze che descrivono la situazione fisica in cui solo una delle fenditure è aperta.
- Le ampiezze sono collegate alle grandezze misurabili, i numeri di particelle $N_A(x)$, $N_B(x)$ e $N_{AB}(x)$, dalle relazioni analoghe a quelle valide per le onde

$$N_A(x) = |\psi_A(x)|^2$$
 $N_B(x) = |\psi_B(x)|^2$

 La "situazione fisica" — lo stato — delle particelle che arrivano in x quando ambedue le fenditure sono aperte è descritta dalla ampiezza data da

 $\psi_{AB}(\mathbf{x}) = \psi_{A}(\mathbf{x}) + \psi_{B}(\mathbf{x})$

Il flusso corrispondente è

 $N_{AB}(x) = |\psi_{AB}(x)|^2 = |\psi_A(x) + \psi_B(x)|^2$

 Il fatto che le ampiezze della meccanica quantistica si sommino, cioè che le ampiezze siano elementi di uno spazio lineare, è la proprietà fondamentale sulla quale è costruito tutto l'edificio matematico della meccanica quantistica.

Un problema di principio o pratico?

- Siamo arrivati alla conclusione che nella situazione fisica (nello stato) in cui le due fenditure sono ambedue aperte non possiamo dire che le particelle che arrivano in x passano o da A o da B.
- Può sembrare però che questa impossibilità abbia a che fare con il modo in cui abbiamo costruito l'esperimento e possa essere facilmente superata.

Un esperimento modificato

- Supponiamo infatti di porre un rivelatore nelle vicinanze dello schermo forato, posto tra le due fenditure.
- Supponiamo che questo rivelatore sia una specie di macchina fotografica, in grado di stabilire attraverso un flash luminoso, al passaggio di una particella attraverso lo schermo, la fenditura attraverso la quale la particella è passata.
- Uno strumento di questo tipo è fisicamente realizzabile.

L'esperimento con particelle quantistiche e rivelatore



Figura 20: L'esperimento quantistico modificato.

- Immaginando di modificare l'esperimento in questo modo, saremmo quindi in grado di stabilire, per ogni particella che arriva in *x*, per quale delle due fenditure essa sia passata.
- Come abbiamo già argomentato, ne consegue per mera logica che in questo esperimento modificato dovrà valere

 $N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$

 E questo è proprio quello che si verifica sperimentalmente: modificando nel modo descritto l'esperimento, non si osservano più frange di interferenza!
Un esperimento troppo distruttivo

- La macchina fotografica che abbiamo utilizzato per osservare attraverso quale fenditura passano le particella ha disturbato, con il suo flash, le particelle al punto da cambiare il risultato dell'esperimento.
- La domanda che si pone è se sia possibile, in linea di principio, utilizzando una macchina fotografica con un flash meno forte, osservare il passaggio delle particelle attraverso lo schermo in modo sufficientemente delicato da non distruggere le frange di interferenza.

- Se la luce necessaria per far funzionare la nostra macchina fotografica fosse una onda elettromagnetica classica questo sarebbe certamente possibile.
- Per poter osservare da quale apertura una particella passi abbiamo bisogno di una luce con lunghezza d'onda λ_{luce} minore della separazione *d* tra le due fenditure:

$\lambda_{\it luce} \lesssim {\it d}$

• Per una onda elettromagnetica classica è possibile ridurre l'intensità, ovvero l'ampiezza dell' onda, in modo arbitrario, mantenendo fissa λ_{luce} .

Anche i rivelatori sono quantistici

- Pertanto, se la luce fosse descritta dalla fisica classica, potremmo disturbare la particella in modo arbitrariamente piccolo, pur preservando la possibilità di determinare per quale fenditura essa passi.
- Se avessimo a nostra disposizione una onda elettromagnetica classica saremmo quindi in grado di osservare le frange di interferenza e, allo stesso tempo, determinare attraverso quale fenditura le particelle che arrivano in *x* sono passate, una cosa logicamente impossibile.
- Ma (fortunatamente per la coerenza della teoria quantistica) la luce non è una onda elettromagnetica classica.

Anche i rivelatori sono quantistici

 Abbiamo visto, nell'analisi dell'effetto fotoelettrico, che la luce è essa stessa composta da particelle quantistiche, i fotoni, il cui impulso è dato dalla formula di Einstein

$$p_{fotone} = rac{h}{\lambda_{luce}}$$

 Pertanto se λ_{luce} ≤ d, così da essere in grado di determinare la fenditura attraverso la quale è passata la particella, l'impulso del fotone non può essere arbitrariamente piccolo:

$$p_{fotone} \gtrsim \frac{h}{d}$$

Un impulso minimo

- Per poter osservare la particella con la nostra macchina fotografica è necessario che essa diffonda un fotone.
- Per la conservazione del momento, il momento della particella quantistica subirà una perturbazione Δp_{particella} che sarà dello stesso ordine di grandezza dell'impuso del fotone diffuso:



Una perturbazione minima all'angolo

• Pertanto, affinché la nostra macchina fotografica sia in grado di determinare per quale fenditura passa la particella, essa dovrà perturbare la direzione di moto della particella di un angolo $\Delta \theta_{pert}$ che non può essere arbitrariamente piccolo

$$\Delta heta_{pert} = rac{\Delta p_{particella}}{p_{particella}} \gtrsim rac{h}{d \, p_{particella}} = rac{\lambda_{particella}}{d}$$

dove $\lambda_{particella}$ è la lunghezza d'onda di De Broglie della particella.

• Dimostreremo ora che questa perturbazione è esattamente quella sufficiente a distruggere le frange di interferenza.

 Determiniamo preliminarmente dove si troverebbero le frange di interferenza se l'esperimento fosse effettuato senza la macchina fotografica, ovvero senza poter osservare attaverso quale fenditura passa ciascuna particella. La situazione è descritta in Fig. 21.

Diffrazione attraverso due fenditure



Figura 21: Diffrazione attraverso due fenditure.

- L è la distanza tra lo schermo dove riveliamo le frange e lo schermo con le due fenditure. x è la posizione del punto dello schermo dove misuriamo l'interferenza.
- La differenza tra le lunghezze dei percorsi di due onde che arrivano nello stesso punto dello schermo passando attraverso due fenditure poste a distanza d è

$$\Delta L = d \sin \theta \qquad \frac{x}{L} \equiv \tan \theta$$

(日)

 I massimi delle frange di interferenza sono determinati quindi dalla condizione che ΔL sia uguale ad un numero intero n di lunghezze d'onda:

 $d \sin \theta_n = n \lambda_{particella}$

Un'approssimazione per schermi lontani

 Per L grande e θ piccolo otteniamo la seguente relazione approssimata per gli angoli corrispondenti ai massimi di interferenza

$$heta_{\it n} \sim {\it n} \, rac{\lambda_{\it particella}}{\it d}$$

 La differenza Δθ_{frange} tra gli angoli corrispondenti a due frange di interferenza contigue è pertanto pari a

$$\Delta heta_{\mathit{frange}} \sim rac{\lambda_{\mathit{particella}}}{\mathit{d}}$$

< 日 > < 同 > < 回 > < 回 > < □ > <

• Ricordando la perturbazione minima $\Delta \theta_{pert} \sim \frac{\lambda_{particella}}{d}$ necessaria per determinare per dove è passata la particella, notiamo che

$\Delta heta_{pert} \gtrsim \Delta heta_{frange}$

• Questo significa che per poter determinare da quale fenditura è passata una particella dobbiamo perturbare la sua direzione di un angolo $\Delta \theta_{pert}$ che è almeno dello stesso ordine di grandezza dell'angolo $\Delta \theta_{frange}$ che separa due frange di intereferenza.

Il principio di indeterminazione

- Concludiamo che per poter osservare da che fenditura passa la particella dobbiamo necessariamente perturbarla in maniera tale da distruggere le frange di interferenza.
- La conclusione è che non è possibile osservare le frange di interferenza e, allo stesso tempo, determinare attraverso quale fenditura passano le particelle.
- Questa impossibilità è conosciuta come principio di indeterminazione di Heisenberg (1927).
- Come abbiamo visto essa è una conseguenza diretta del fatto che la luce che usiamo per determinare la posizione di una particella, è essa stessa composta da particelle quantistiche e soddisfa la relazione di Einstein.

Una formulazione diversa

- Il principio di indeterminazione è equivalentemente formulato come l'impossibilità di misurare simultaneamente posizione e momento di una particella con precisione arbitraria.
- Si consideri infatti di nuovo la relazione

 $\Delta p_{particella} \geq \frac{h}{d}$

- In questa relazione *d* rappresenta la risoluzione Δx con cui misuriamo la posizione della particella.
- Δp_{particella} è l'indeterminazione Δp_x nella conoscenza del momento della particella lungo la stessa direzione di Δx.

Pertanto pertanto riscrivere la relazione precedente come

 $\Delta p_x \Delta x \gtrsim h$

- Questa relazione dice che non possiamo misurare con precisione arbitraria la coordinata di una particella senza ridurre la precisione con cui possiamo misurare il corrispondente momento.
- E viceversa che non possiamo determinare il momento di una particella con precisione arbitraria senza perdere precisione nella determinazione della sua posizione.

- Si dice che momento e posizione sono osservabili non compatibili in meccanica quantistica.
- In meccanica quantistica quindi il concetto di traiettoria perde senso.
- Esso viene sostituito dal concetto di ampiezza, quei numeri complessi $\psi(x)$ che abbiamo introdotto nella discussione precedente.

Un dualismo coerente

- Un'altra implicazione del principio di indeterminazione è il carattere inerentemente probabilistico della descrizione dei fenomeni fisici della meccanica quantistica. Questa circostanza è uno dei punti di partenza per la formulazione della teoria quantistica "completa".
- In definitiva il principio di indeterminazione è il fatto fisico che risolve la apparente contraddizione tra l'aspetto corpuscolare e quello ondulatorio delle particelle quantistiche, e che quindi, in definitiva, garantisce la coerenza logica della teoria quantistica.

La funzione d'onda

 Nella descrizione dell'esperimento delle due fenditure abbiamo visto che lo stato di una particella quantistica è descritto da una ampiezza complessa

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{N(\mathbf{x})} e^{\frac{2\pi i L(\mathbf{x})}{\lambda}} = \sqrt{N(\mathbf{x})} e^{\frac{2\pi i L(\mathbf{x})p}{h}}$$

dove L(x) era il cammino percorso dalla particella e λ è la lunghezza d'onda di De Broglie.

- Questo numero complesso come funzione del punto *x* è chiamata la funzione d'onda della particella.
- Abbiamo visto che il modulo quadro della funzione d'onda

$|\psi(x)|^2$

ha il significato fisico di (densità) di probabilità che la particella si trovi in un dato punto x.

La funzione d'onda di una particella libera

 Possiamo riscrivere il fattore che compare nell'esponente della funzione d'onda in notazione vettoriale

 $pL(x) = \vec{p} \cdot \vec{x}$

il vettore \vec{x} indica il punto nel spazio.

- Per una particella che si muove liberamente nello spazio, senza incontrare schermi o altro, ci aspettiamo che N(x) sia una costante.
- In definitiva la funzione d'onda di una particella libera nello spazio che si muove con impulso p
 è

 $\psi(\vec{\mathbf{x}}) = \psi_0 \,\mathrm{e}^{\frac{i\vec{p}\cdot\vec{\mathbf{x}}}{\hbar}}$

La dipendenza temporale della funzione d'onda

- La funzione $\psi(x)$ descrive quindi l'onda associata alla particella ad un dato istante di tempo.
- Ma la nostra esperienza con le onde è che queste si propagano nel tempo oltre che nello spazio: la dipendenza temporale dell'onda dal tempo è detta la frequenza dell'onda:

$$\psi(\mathbf{x},t) = \psi(\mathbf{x}) \,\mathrm{e}^{-i\,\omega\,t}$$

 Quale frequenza quindi dobbiamo associare ad una funzione d'onda, per descriverne la sua evoluzione temporale? Sappiamo la risposta a questa domanda nel caso dei fotoni: è contenuta nella relazione di Einstein

$$\omega = rac{E}{\hbar}$$

- Abbiamo visto che fotoni e particelle come elettroni, protoni etc. si comportano nello stesso modo.
- Possiamo quindi supporre che questa relazione abbia validità generale e che in definitiva la funzione d'onda dipendente dal tempo di una particella che si muove con momento p
 ed energia E sia

$$\psi(\mathbf{x},t) = \psi_0 \,\mathrm{e}^{i \,\frac{(\vec{p}\cdot\vec{x}-E\,t)}{\hbar}}$$

Le derivate della funzione d'onda

 Confrontiamo le derivate della funzione d'onda appena scritta rispetto a x e rispetto al temp

$$\vec{\nabla}^2 \psi(\mathbf{x}, t) = -\frac{\vec{p}^2}{\hbar^2} e^{i \frac{(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}{\hbar}} \psi_0$$
$$\frac{\partial \psi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -i \frac{E}{\hbar} e^{i \frac{(\vec{p} \cdot \vec{x} - Et)}{\hbar}} \psi_0$$

238/253

Per una particella non-relativistica

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2 m}$$

 La funzione d'onda di una particella di momento p
 ed energia E soddisfa pertanto l' equazione differenziale:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi(\mathbf{x},t)$$

• Questa equazione cattura sia la relazione di De Broglie per la lunghezza d'onda associata ad una particella di momento \vec{p} che la relazione di Einstein tra frequenza e energia.

- Come nel caso della regola di Bohr-Sommerfeld siamo interessati a generalizzare questa equazione al caso di una particella non-libera. Per esempio una particella che si muove in un potenziale V(x).
- Per una particella libera il secondo membro dell'equazione ottenuta è uguale a

$$-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} \psi(x,t) = \frac{\vec{p}^2}{2m} \psi(x,t)$$

L'equazione di Schrödinger

• Osserviamo che nel caso libero $\frac{\vec{p}^2}{2m} = E$, mentre nel caso non-libero

$$E = \frac{\vec{p}^2}{2\,m} + V(\vec{x})$$

 Questa osservazione suggerisce quindi che l'equazione che determina la funzione d'onda nel caso di una particella che si muove in un potenziale sia

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{x},t)}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{x})\right] \psi(\mathbf{x},t)$$

Le funzioni d'onda con energia definita

• Abbiamo detto che la relazione di Einstein $\omega = \frac{E}{\hbar}$ dice che una particella di energia determinata *E* ha anche una frequenza determinata:

$$\psi_{\mathsf{E}}(\mathsf{x},t) = \mathrm{e}^{-i\frac{\mathsf{E}\,t}{\hbar}}\psi_{\mathsf{E}}(\mathsf{x})$$

dove $\psi_E(x)$ non è il semplice esponenziale di De Broglie quando la particella non è libera.

Per questi stati quindi, l'equazione di Schrödinger diventa

$$E\psi_E(x) = \left[-\frac{\hbar^2 \vec{\nabla}^2}{2m} + V(\vec{x})\right]\psi_E(x)$$

- L'equazione di Schrödinger per le funzioni d'onda di energia fissata è un'equazione differenziale per $\psi_E(x)$.
- Risulta che questa equazione non ha in generale soluzioni fisicamente accettabili per tutti i valori dell'energia *E*.
- Solo per dei valori discreti dell'energia *E* esistono effettivamente delle soluzioni accettabili.
- Questo è il modo in cui nella teoria quantistica "completa" emerge — e viene corretta — la condizione di quantizzazione dei livelli di Bohr-Sommerfeld.

Particella nella scatola

 Nel caso di una particella in una scatola uni-dimensionale l'equazione di Schrödinger per le funzioni d'onda con energia fissata diventa

$$\frac{\hbar^2 \,\psi_E''(x)}{2\,m} + E\,\psi_E(x) = 0$$

La soluzione generale di questa equazione è

$$\psi_E(x) = A\sin\frac{px}{\hbar} + B\cos\frac{px}{\hbar}$$

dove

$$p = \sqrt{2 m E}$$

Le condizioni al contorno

- La particella è confinata nella scatola: la probabilità di trovarla fuori dalla scatola è nulla.
- La probabilità di trovare la particella è proporzionale al modulo quadro della funzione d'onda.
- Quindi la funzione d'onda si deve annullare sul bordo della scatola

$$\psi_{\mathsf{E}}(\mathsf{0}) = \mathsf{0} \qquad \psi_{\mathsf{E}}(\mathsf{L}) = \mathsf{0}$$

245/253

La prima condizione dà

 $\psi_E(0)=B=0$

La seconda quindi si riduce a

$$A\sinrac{p\,L}{\hbar}=0$$

La soluzione di questa equazione è

$$p_n = \sqrt{2 m E_n} = \frac{n \pi}{L} \qquad n = 1, 2, \dots$$

4 ロ ト 4 回 ト 4 亘 ト 4 亘 ト 5 9 0 0 0
246/253

 Ritroviamo così i livelli della scatola che avevamo ottenuto dalla regola di BS

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2}{2 m L^2}$$
 $n = 1, 2, ...$

- Si noti che abbiamo anche determinato che *n* parte da 1, in quanto per n = 0 la funzione d'onda sarebbe identicamente nulla.
- Contrariamente al caso classico, lo stato di energia minima pertanto non ha energia nulla: questo è un risultato generale conseguenza del principio di indeterminazione. (Cfr. Problema di autovalutazione).

La distribuzione spaziale

- L'equazione di Schrödinger non si limita a darci i livelli energetici. Abbiamo visto che $|\psi(x)|^2$ è proporzionale alla densità di probabilità spaziale.
- Una particella con energia *E_n*, ha pertanto una probabilità Δ*P_n(x)* di trovarsi in un intervallo Δ*x* intorno al punto *x* del segmento pari a

$$\Delta P_n(x) = \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi \, n \, x}{L} \, \Delta x$$

• Il fattore di normalizzazione $\frac{2}{L}$ è fissato dalla richiesta che $\int_0^L \Delta x \frac{\Delta P_n(x)}{\Delta x} = 1.$

Gli stati di energia determinata in una scatola



Figura 22: Le funzioni d'onda di energia determinata, le densità di probabilità spaziale ed i livelli energetici di una particella in una scatola.

- Interferenza.
- Numeri complessi: fase e modulo di un numero complesso.
- Equazioni differenziali di una funzione dipendente da 1 variabile a coefficienti costanti.

- Un fascio di elettroni di energia cinetica E = 50 eV viene diviso in due raggi paralleli posti a differenze altezze rispetto alla superficie della terra. Se la differenza tra le altezze è di d = 1m, e se si fanno interferire i due fasci dopo un percorso di lunghezza *L*, per quali valori di *L* ci sarà interferenza distruttiva?
- Si usi il principio di indeterminazione per avere una stima dello stato di energia minima per un potenziale V(x) = σ |x|.

- La Fisica di Feynman, Vol. 3, R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, (1975) Inter European Editions, B.V.
- Lezioni di Meccanica Quantistica, L.E. Picasso, Edizioni ETS, (2000) Pisa.
Fine della quarta lezione

<ロ ▶ < □ ▶ < □ ▶ < □ ▶ < □ ▶ < □ ▶ 253/253