

# 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/>

- **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 indeterminazione
  - La funzione d'onda
  - L'equazione di Schrödinger

## 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

$$E_n = -\frac{hcR_H}{n^2} \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

# 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

$$\nu_{n,m} = \frac{E_m - E_n}{h} = c R_H \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

riproducendo la regola di Rydberg.

# I raggi delle orbite “permesse”

- 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:

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

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

$$\begin{aligned}r_1 &= \frac{1}{2} \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 h c R_H} = \\&= \frac{1}{4 \pi} \frac{1}{137} \frac{1}{1.0967760 \times 10^7} m = \\&= 0.53 \times 10^{-10} m\end{aligned}$$

- 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  $E_n = -\frac{hcR_H}{n^2}$  ?
- 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.

# Il momento angolare delle orbite “permesse”

- La scoperta della “regola” generale che individuava fra tutte le orbite classiche quelle “permesse” richiedeva un salto d’immaginazione.
- Un modo di motivare<sup>1</sup> tale salto d’immaginazione è quello di calcolare il momento angolare  $L$  per le orbite permesse.

---

<sup>1</sup>Questo 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  $L = r m_e v = \sqrt{\frac{e^2 m_e r}{4 \pi \epsilon_0}}$ ,

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

- 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  $2\pi$ ) :

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

# Una predizione teorica accurata

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

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

- Inserendo i valori numerici di  $e$ ,  $m_e$ ,  $c$ ,  $\hbar$  otteniamo

$$R_H^{\text{teorico}} = 1.0973700 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

in eccellente accordo col valore sperimentale osservato

$$R_H^{\text{sperim}} = 1.0967760 \times 10^7 \text{ m}^{-1} !$$

- 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.

- 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+elettrone<sup>2</sup>:

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} = m_e \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}}$$

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

$$R_H = \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\mu}{\hbar^3 c} \frac{1}{4\pi}$$

---

<sup>2</sup>Questo 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

$$R_H^{teo} = 1.096776 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

in accordo spettacolare col valore sperimentale osservato

$$R_H^{sperim} = 1.0967760 \times 10^7 \text{ m}^{-1} !$$



# La quantizzazione del momento angolare

- Le orbite “permesse” sono dunque caratterizzate da una condizione molto semplice

$$L_n = n \hbar \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

- 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**

$$r_1 \equiv a_{Bohr} = \frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2}$$
$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \frac{e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2} \frac{m_e}{\hbar^2} \quad n = 1, 2, \dots$$

# 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:

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

- 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.

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

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

- 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  $n \gg 1$

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

- Questa frequenza in funzione del raggio è quindi

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

# Lo spettro classico

- Classicamente, una carica che ruota su una orbita circolare con frequenza orbitale  $\nu$  emette radiazione elettromagnetica con frequenza (che è un *multiplo intero* di)  $\nu^3$
- 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  $\nu$  ha la stessa dipendenza da  $r$  — è proporzionale a  $r^{-\frac{3}{2}}$  — di quella quantistica nel limite  $n \gg 1$ .

---

<sup>3</sup>Sulla 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  $m = 100 \text{ kg}$  orbitante circolarmente intorno alla Terra. Si supponga che il satellite si trovi su un'orbita circolare di raggio vicino a quello della Terra  $R_t = 6400 \text{ km}$ , con un dato numero intero  $\bar{n}$ . Di quanto varia il raggio dell'orbita se il satellite si sposta su una orbita successiva con  $n = \bar{n} + 1$ ?



# Soluzione Problema 1.

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

$$m r v = m \sqrt{GM r} = n \hbar \Rightarrow r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{GM m^2}$$

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

$$\begin{aligned}\bar{n}^2 &\approx \frac{GM R_t m^2}{\hbar^2} = \frac{g m^2 R_t^3}{\hbar^2} \approx \\ &\approx \frac{9.8 \times 10^4 \times 6.4^3 \times 10^{18}}{1.05^2 \times 10^{-68}} = 24 \times 10^{92} \\ \bar{n} &\approx 5 \times 10^{46}\end{aligned}$$

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

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

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 costanti 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.

- $V(r) = -\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{r}$ : potenziale per idrogenoidi.
- $E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \frac{Z^2 e^4}{(4 \pi \epsilon_0)^2} \frac{\mu}{\hbar^2} \equiv -Z^2 \frac{R(M) h c}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots$ : 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

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

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

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

- La lunghezza d'onda di De Broglie associata ad un elettrone di energia  $E = 100 \text{ eV}$  è dunque di circa  $1.2 \text{ \AA}$ : ovvero una lunghezza dello stesso ordine di grandezza di quella dei raggi X.
- Secondo De Broglie, quindi, **la natura ondulatoria** degli elettroni con  $E = 100 \text{ eV}$  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  $\lambda$  può essere studiata usando reticoli atomici con passo reticolare  $d$  dello stesso ordine di grandezza di  $\lambda$ .

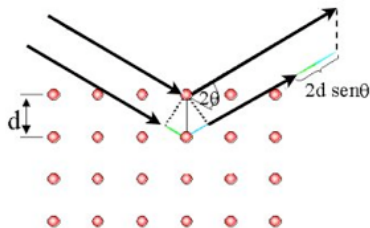


Figura 1: Diffrazione di Bragg

- Diffondendo dei raggi X di lunghezza d'onda  $\lambda$  su un reticolo cristallino di passo  $d$  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  $\lambda$ , 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

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

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  $V = 54 \text{ Volt}$ . Il reticolo di nichel aveva un passo  $d = 0.92 \text{ \AA}$ . A che angolo  $\theta_1$  fu osservato il primo picco di diffusione?
- **Problema 2.** Nella stessa serie di esperimenti, Davisson e Germer mantennero fisso  $\theta_1$  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  $L = \hbar n$  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

$$\text{Lunghezza dell' orbita} = n \lambda \quad n = 1, 2, \dots$$

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

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

# 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.

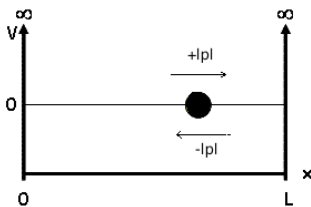


Figura 2: Buca uni-dimensionale

# La quantizzazione degli impulsi in una scatola

- La particella si muove all'interno della scatola con impulso  $\pm p$  che cambia di segno ogni volta che la particella urta le pareti della scatola.
- La lunghezza dell'orbita è quindi uguale a  $2L$
- 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

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

- 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  $n^2$  e non  $n^{-2}$  come era nel caso dell'idrogeno.

# La necessità di una generalizzazione

- 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**

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

- 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

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

# Una riscrittura apparentemente banale

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

$$|p| \times \text{Lunghezza dell'orbita} = n h$$

- Dividiamo l'orbita in piccoli tratti di lunghezza  $\Delta x$ , ognuno centrato in un punto  $x_i$  lungo l'orbita, con  $i = 1, \dots, N$  e  $N$  molto grande:

$$\text{Lunghezza dell'orbita} = \sum_i \Delta x$$

- Quindi la regola di De Broglie si riscrive:

$$\sum_i |p| \Delta x = n h$$

# La generalizzazione

- 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  $\Delta x$  sono sempre più piccole la somma diventa un integrale:

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

# L'integrale lungo l'orbita

- Dobbiamo precisare come vada inteso l'integrale  $\int_{\text{orbita}}$  “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:  $\pm|p|$ .

# 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  $\Delta x = L$  **positivo**, ma quando  $p$  è **negativo** dobbiamo prendere  $\Delta x = L$  **negativo**.
- In altre parole dobbiamo intendere il prodotto  $p(x_i) \Delta x$  **sempre positivo**.

# La regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld

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

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

- Questa formula è nota come regola di quantizzazione di **Bohr-Sommerfeld**<sup>4</sup>.

---

<sup>4</sup>Originalmente 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:

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

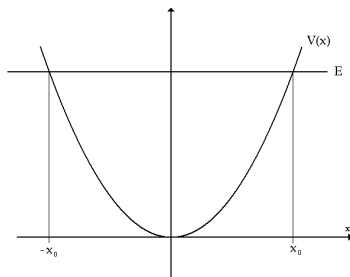


Figura 3: Il potenziale dell'oscillatore armonico.

# L'oscillatore armonico classico

- 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

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

# 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  $-x_0$  a  $x_0$  con  $p$  positivo ed il tratto da  $x_0$  a  $-x_0$  con  $p$  negativo. Pertanto

$$\begin{aligned} n h &= \int_{\text{orbita}} dx \sqrt{2 m E - m^2 \omega^2 x^2} = \\ &= 2 \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{2 m E - m^2 \omega^2 x^2} = \\ &= 2 m \omega \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{x_0^2 - x^2} \end{aligned}$$

# I livelli dell'oscillatore armonico

- L'integrale che appare nel membro di destra è l'area di un semicerchio di raggio  $x_0$ , pari a  $\frac{\pi}{2} x_0^2$ . Pertanto

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

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

$$E_n = n \hbar \omega \quad n = 1, 2, \dots$$

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

# La “vecchia” teoria dei quanti

- Quella che abbiamo descritto finora costituisce, 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 costituiscono 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 **chiuse**<sup>5</sup> 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.

---

<sup>5</sup>Si 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 comportano come **corpuscoli**?

- 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

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

- Questa formula mostra da un lato che non esistono “orbite” dell'oscillatore armonico con energia nulla; dall'altro mostra che per  $n \gg 1$  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 <sup>6</sup> 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.

---

<sup>6</sup>Anche i livelli della particella in una scatola derivati dalla regola di BS sono quelli corretti purché si prenda  $n \geq 1$ .

- 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