

# 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

## Terza lezione

# Una scatola con tante palline

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

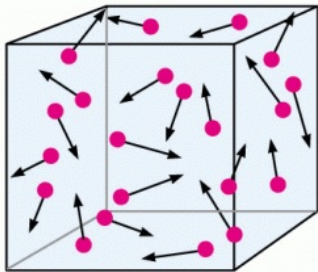


Figura 1: Una scatola con tante palline

- 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  $x$



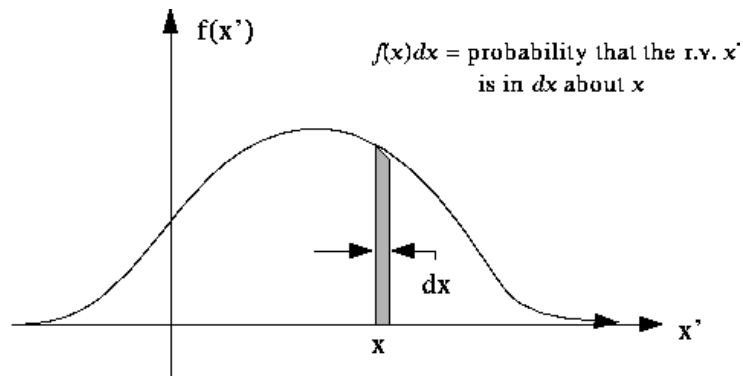


Figure 4. Typical Probability Distribution Function (*pdf*)

Figura 2: Probability distribution.

# La distribuzione delle energie

- 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 più dal tempo e, **all'equilibrio**

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

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 Boltzmann, (1844-1906).

# La costante di normalizzazione

- La costante di normalizzazione  $C$  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

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

# La distribuzione di Boltzmann

- In definitiva la distribuzione di Boltzmann si scrive

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

- Per conoscerla, dato un sistema, è necessario quindi determinare preliminarmente il fattore  $\rho(E)$ .

# La distribuzione di Boltzmann

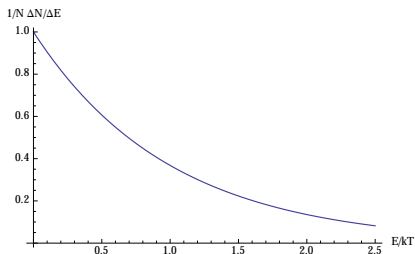


Figura 3: La distribuzione delle energie di Boltzmann ( $\rho(E) = 1$ )

- 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  $\sim kT$ .

# Lo spazio delle fasi

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

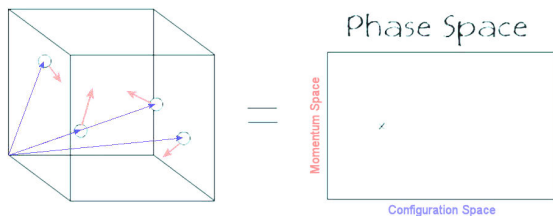


Figura 4: Lo spazio delle fasi di una particella in una scatola

# La densità delle orbite

- Il fattore  $\Delta E \rho(E)$  che appare nella formula di Boltzmann è il volume  $\Delta \mathcal{V}$  della regione dello spazio delle fasi che include tutte le orbite con energie comprese tra  $E$  e  $E + \Delta E$

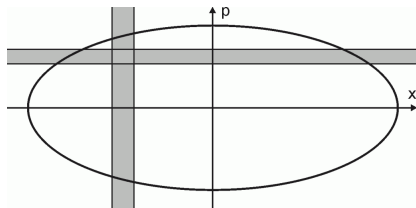


Figura 5: La densità delle orbite



# 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  $p = \pm\sqrt{2mE}$  nel piano  $(x, p)$ .
- Quindi

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

- Poiché

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

otteniamo

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

# La densità delle orbite di un oscillatore armonico

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

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}}$$

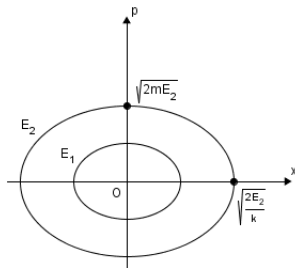


Figura 6: Le orbite dell'oscillatore armonico nello spazio delle fasi

# La densità delle orbite di un oscillatore armonico

- Poichè l'area dell'ellisse che include tutte le orbite con energia  $\leq E$  è

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

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

$$\Delta\mathcal{V} = \rho(E) \Delta E = \frac{2\pi \Delta E}{\omega}$$

# La distribuzione di energia di un gas in una scatola

- Ragionando analogamente, otteniamo 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

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

# La distribuzione di energia di un gas in una scatola

- La costante  $C$  è determinata dalla condizione di **normalizzazione**

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

- 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

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

- 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

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

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

$$\langle E \rangle = \int_0^{\infty} dE \frac{1}{kT} e^{-\frac{E}{kT}} \times E = kT$$

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

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

- Il **calore specifico** a volume costante

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

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

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

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

$$U = g \times \frac{1}{2} k T N$$

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 funzione di partizione

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

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

- L'utilità della funzione di partizione poggia su questa identità

$$-\frac{\partial Z(T)}{\partial \beta} = \int_0^{\infty} dE \rho(E) E e^{-\beta E} \quad \beta \equiv \frac{1}{kT}$$

# L'energia interna e la funzione di partizione

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

$$\begin{aligned}U &= N \langle E \rangle = \\&= N \frac{\int_0^\infty dE \rho(E) e^{-\beta E} E}{\int_0^\infty dE \rho(E) e^{-\beta E}} = \\&= - \frac{N}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial \beta}\end{aligned}$$

# La funzione di partizione come integrale sullo spazio delle fasi

- Poiché, come abbiamo detto, la densità delle orbite  $\rho(E)$  è il volume nello spazio delle fasi

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

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

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

# 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  $a = 1, \dots, g$ , sono coordinate o impulsi è pertanto

$$\begin{aligned} Z(T) &= K \int \prod_a dq_a e^{-\beta \sum_{a=1}^g c_a q_a^2} = \\ &= K \prod_{a=1}^g \int_{-\infty}^{\infty} dq_a e^{-\beta c_a q_a^2} \end{aligned}$$

- $K$  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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-cx^2} = \sqrt{\frac{\pi}{c}} \quad c > 0$$

- Quindi

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



# Il teorema di equipartizione dimostrato

- In definitiva

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

# Un gas bi-atomico

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

$$g = 3 + 2 = 5$$

- Quindi

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

# Un gas bi-atomico più realistico

- 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

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

# Il confronto con l'esperimento

- 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  $T \approx 300K$ .

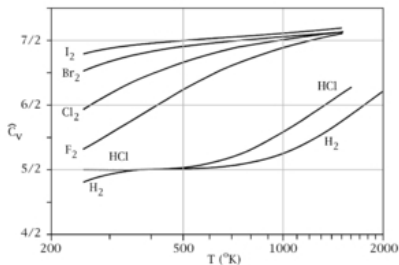


Figura 7: I calori specifici dei gas diatomici

# Un conflitto con la logica

- 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 c'è una schematizzazione più raffinata — quella che tiene conto dei piccoli movimenti vibratorii longitudinali 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  $c_V$ ?  
 $5/2, 7/2, 9/2, \dots$ ?
- 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  $g$  !

# $g$ dipende dalla temperatura?

- 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.
- Nonostante 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.

- 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 probabilità** rilevanti saranno pertanto in meccanica statistica quantistica quelle **discrete**. E queste sono più semplici da trattare.

# La distribuzione di Boltzmann per i livelli discreti

- Supponiamo di avere un ensemble quantistico, composto da un numero grande di sistemi identici i cui livelli di energia sono  $E_0, E_1, E_2, \dots$ .
- La legge di Boltzmann, nel caso quantistico, dice allora che la probabilità che uno dei sistemi dell'ensemble si trovi in un livello  $E_j$  è

$$P_j = C e^{-\frac{E_j}{kT}}$$

# La distribuzione di Boltzmann per i livelli discreti

- La costante  $C$  è fissata dalla condizione

$$\sum_i P_i = 1$$

per cui<sup>1</sup>

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

---

<sup>1</sup>Nella teoria quantistica completa, in questa formula il fattore esponenziale  $e^{-\frac{E_j}{kT}}$  è rimpiazzato da  $g_j e^{-\frac{E_j}{kT}}$  dove i fattori  $g_j$  sono **interi** positivi che possono essere diversi da 1, associati alla **degenerazione** del livello  $E_j$ . 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

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= \sum_i E_i P_i = \frac{\sum_i E_i e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_j e^{-\frac{E_j}{kT}}} = \\ &= -\frac{1}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial \beta}\end{aligned}$$

dove abbiamo introdotto la **funzione di partizione quantistica**

$$Z(T) = \sum_j e^{-\beta E_j} \quad \beta \equiv \frac{1}{kT}$$

# 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

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

dove

$$q \equiv e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} = e^{-\beta \hbar \omega}$$

- Possiamo allora calcolare l'energia media dell'oscillatore

$$\begin{aligned}\langle E \rangle &= -\frac{1}{Z(T)} \frac{\partial Z(T)}{\partial \beta} = \\ &= -(1-q) \frac{1}{(1-q)^2} (-\hbar\omega) q = \\ &= \frac{q}{(1-q)} \hbar\omega = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}\end{aligned}$$

# L'energia media per alte temperature

- L'energia media  $\langle E \rangle$  dell'oscillatore armonico per **grandi temperature**  $T \gg \hbar\omega$  diventa

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \approx \frac{\hbar\omega}{\beta\hbar\omega} = \frac{1}{\beta} = kT \quad kT \gg \hbar\omega$$

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

$$c_V = \frac{\partial U}{\partial T} = N \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \approx Nk$$



# L'energia media per basse temperature

- Per **basse** temperature però

$$\langle E \rangle = \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \approx \hbar\omega e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} \quad kT \ll \hbar\omega$$

l'energia media va esponenzialmente a zero.

- Il contributo al calore specifico diventa

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

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  $\Delta E$  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  $kT \gg \Delta E$  quel grado di libertà si comporterà classicamente e darà contributo  $\frac{1}{2} kN$  al calore specifico.
- Ma quando le temperature scendono e diventano  $kT \ll \Delta E$ , 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  $x \leq h$ , conoscendo la densità  $\rho_0$  all'altezza  $x = 0$ .
- Un pendolo di lunghezza  $l = 1\text{ m}$  e massa  $m = 1\text{ kg}$  sulla superficie terrestre è in equilibrio termico a temperatura  $T = 300\text{ K}$ . 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  $m = 10^{-27}\text{ kg}$ , posto in una scatola 3-dimensionale di lato  $L = 10^{-2}\text{ m}$ . Fino a quali temperature  $T$  ci si aspetta che valga il risultato classico  $c_V = \frac{3}{2} k T$ ?

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

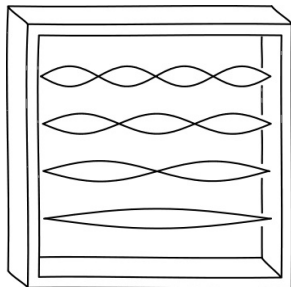


Figura 8: Onde elettromagnetiche in una scatola

# La meccanica statistica di una corda vibrante

- 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:

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

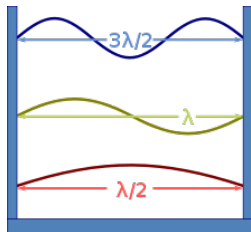


Figura 9: Le frequenze di vibrazione in una scatola,  $\lambda = \frac{c}{\nu}$

# La densità dei modi di vibrazione della corda

- Il numero  $\Delta n$  di **armoniche** di una corda vibrante compreso tra una frequenza  $\nu$  ed una frequenza  $\nu + \Delta\nu$  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

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



# I modi di vibrazione del campo e.m. in una scatola

- Il campo elettromagnetico in una scatola di lato  $L$  vibra in modi che sono identificati da 3 numeri interi  $\vec{n} = (n_x, n_y, n_z)$  **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

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

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

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

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

- Il volume di questo **spicchio** di sfera è

$$\mathcal{V}_\nu = \frac{1}{8} \frac{4\pi}{3} \left(\frac{2L}{c}\right)^3 \nu^3$$

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

- Poiché nel reticolo definito dagli interi  $\vec{n}$  c'è **1 punto** per **unità di volume**, il numero di punti del reticolo compresi nello spicchio di sfera è

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

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

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

# Un numero di oscillatori infinito

- Ognuno di questi modi di vibrazione si comporta come un **oscillatore armonico** di frequenza  $\nu_{\vec{k}}$ .
- Il campo e.m. nella scatola può essere pensato come un sistema composto da un numero **infinito** di oscillatori armonici 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  $kT$ .

# La formula di Rayleigh-Jeans

- 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  $\nu$ , 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 irrisolvibile nella fisica classica.

# La catastrofe ultravioletta

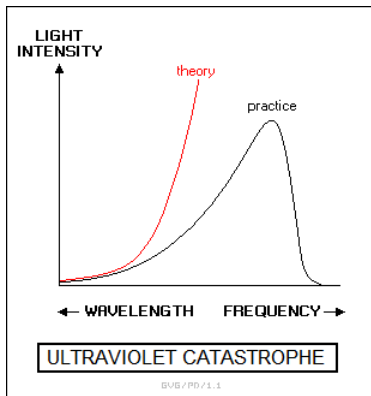


Figura 10: La catastrofe ultravioletta e lo spettro osservato



- 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

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

- Per  $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$  — ovvero per **basse frequenze** — questa energia è pari al valore classico  $kT$ .
- Per  $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$  — 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.

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

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

# La temperatura della radiazione

- 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

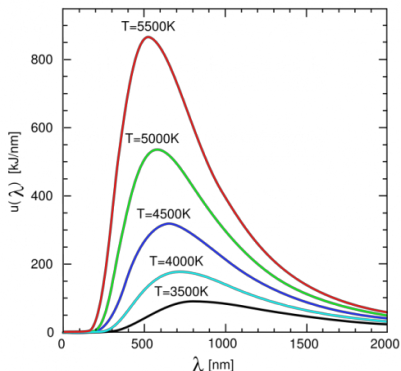


Figura 11: Spettro di un corpo nero ideale.  $\lambda = \frac{c}{\nu}$  è la lunghezza d'onda

- 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.

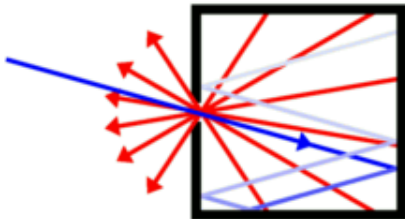


Figura 12: I raggi blu entranti sono assorbiti completamente mentre quelli rossi indicano la radiazione termica che fuoriesce dal foro.

# Una derivazione problematica

- 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 nome 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 elementare.
- 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  $\frac{dU}{dt} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 c^3} \ddot{\vec{a}}^2$  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