Una introduzione alla meccanica quantistica per le secondarie

TFA 2015

Camillo Imbimbo

Dipartimento di Fisica dell'Università di Genova Via Dodecaneso, I-16136, Genova, Italia

Indice

1	Le orbite degli elettroni	3
2	L'effetto fotoelettrico	5
3	L'effetto Compton	9
4	L'atomo di Bohr	11
5	Il principio di corrispondenza ed il limite semi-classico	15
6	La relazione di De Broglie	19
7	Onde e particelle7.1Particelle classiche e onde classiche7.2Particelle quantistiche	26 27 29
8	Il principio di indeterminazione	32
9	Letture consigliate	36

1 Le orbite degli elettroni

Il concetto di atomo e l'idea che ad ogni elemento chimico corrisponde un atomo furono originalmente introdotte per spiegare i fenomeni chimici. Altri fenomeni (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)) essere

$$e = -1.6 \times 10^{-19} C$$
 $m_e = 0.9 \times 10^{-30} kg$ (1.1)

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

$$m_H = 1.7 \times 10^{-27} \, kg \approx 1836 \, m_e \tag{1.2}$$

L'ordine di grandezza delle dimensioni atomiche risulta essere

$$r_0 \sim 10^{-10} \, m = 1 \, \text{\AA} \tag{1.3}$$

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.

Consideriamo l'atomo più semplice: quello di idrogeno, con 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

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r^2} = \frac{m_e v^2}{r}$$
(1.4)

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

$$v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \frac{1}{r} \tag{1.5}$$

¹ Un 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'energia E dell'elettrone è

$$E = \frac{1}{2}m_e v^2 - \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2}m_e v^2 = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{2r}$$
(1.6)

o equivalentemente

$$r = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 |E|} \tag{1.7}$$

Il (modulo del) momento angolare L è

$$L = r m_e v = \sqrt{\frac{e^2 m_e r}{4 \pi \epsilon_0}}$$
(1.8)

Vediamo quindi che l'energia, il momento angolare, la velocità dell'elettrone sono determinati solo quando si assegna il raggio dell'orbita: un fatto che conosciamo bene dalla discussione del moto dei pianeti. Sappiamo che esistono un numero infinito di orbite (circolari) possibili, che sono determinate una volta assegnata l'energia, o il momento angolare.

Questo pone un problema molto serio per il modello di Rutherford. 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 (1.3). Nel modello planetario questo vorrebbe dire quindi che gli elettroni di tutti gli atomi di idrogeno ruotano intorno al nucleo con la stessa energia (o equivalentemente su orbite dello stesso raggio). Ma cosa determina questa energia o questo raggio "preferiti"? L'esistenza di una energia (o di un raggio) "speciale" certamente sembra qualcosa che non ha nessun equivalente nel caso delle orbite dei pianeti.

Esiste un ulteriore problema. Gli elettroni che ruotano intorno al nucleo sono accelerati, con accelerazione pari, in modulo, a

$$a = \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e} \frac{1}{r^2}$$
(1.9)

Ma, l'elettromagnetismo prevede che una carica accelerata emette radiazione elettromagnetica. Questo vuol dire che gli elettroni che ruotano intorno al nucleo dovrebbero perdere energia per radiazione. Dalla (1.6) consegue che il raggio dell'orbita dovrebbe progressivamente diminuire fino a quando

l'elettrone non casca sul nucleo². Ma questo non è quello che si osserva: gli atomi sembrano avere tutti le stesse dimensioni e queste dimensioni non descrescono col tempo. Perché? È il problema della "stabilità" delle dimensioni atomiche.

• **Problema:** Si dimostri che non è possibile costruire una lunghezza a partire da $e, \epsilon_0 \in m_e$.

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.

2 L'effetto fotoelettrico

L'effetto fotoelettrico fu osservato per la prima volta da H. Hertz nel 1887 e studiato in seguito da molti fisici sperimentali negli anni seguenti³: 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

$$T_{max} = h \left(\nu - \nu_0 \right) \qquad h = 6.6 \times 10^{-34} \, J \times sec$$
 (2.10)

²Un calcolo di elettromagnetismo dimostra che un elettrone che ruota su una orbita circolare di $r_0 \sim 10^{-10}m$ dal nucleo cadrebbe sul nucleo in un tempo dell'ordine di $\tau \sim 10^{-8} sec$.

³Tra gli altri, J.J. Thomson nel 1899, P. Lennard nel 1900.

dove h è una costante indipendente dal materiale.

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

Innanzitutto consideriamo i numeri rilevanti. Le frequenze delle onde elettromagnetiche per le quali si manifesta l'effetto sono quelle dello spettro visibile:

$$\nu_{visibile} \approx (0.40 - 0.750) \times 10^{15} Hz$$
 (2.11)

Le energie dei foto-elettroni emessi sono dell'ordine di grandezze dell'elettronvolt:

$$E_{elettrone} \sim h \nu_0 \sim (1 - 10) \times 10^{-19} J$$
 (2.12)

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

$$\Phi \sim (10 - 10^2) \, watt/m^2 \tag{2.13}$$

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

$$\tau \sim 10^{-8} sec \tag{2.14}$$

Questi dati numerici sembrano, di per se stessi, difficili da capire. Sappiamo che gli elettroni sono legati ad atomi la cui dimensione r_0 è dell'ordine di $10^{-10} m$: la potenza energetica che colpisce una superficie di dimensione atomiche posta ortogonalmente al flusso è pertanto

$$W \sim \Phi \times r_0^2 \sim 10^{-19} watt \tag{2.15}$$

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

$$au imes W \sim 10^{-27} J$$
 (2.16)

Ecco quindi il primo puzzle: le energie (2.12) dei foto-elettroni emessi sono 7-8 ordini di grandezza superiori all'energia elettromagnetica trasportata dalla radiazione che colpisce un atomo nel tempo rilevante τ .

Analizziamo un po' più in dettaglio il meccanismo attraverso il quale l'onda elettromagnetica può strappare un elettrone ad un atomo. Gli elettroni atomici investiti dall'onda elettromagnetica sono sottoposti ad una forza proporzionale al campo elettrico \vec{E} dell'onda. Tanto maggiore sarà questo campo elettrico tanto più sarà facile dovrebbe essere per l'onda "liberare" l'elettrone dall'attrazione atomica. In particolare, ci aspetteremmo che per campi elettrici troppo piccoli l'effetto non si manifesti. E che l'effetto diventi possibile per campi elettrici sufficientemente intensi. Inoltre, l'energia acquisita dall'elettrone strappato dovrebbe crescere all'aumentare del campo elettrico \vec{E} .

Ora, il flusso energetico dell'onda elettromagnetica dipende quadraticamente dal modulo del campo elettrico:

$$\Phi = c \epsilon_0 \, |\vec{E}|^2 \tag{2.17}$$

Quindi, per quanto appena detto, i modelli classici prevedono l'esistenza di una soglia nell' *intensità* Φ della radiazione elettrica. Inoltre i foto-elettroni emessi dovrebbero avere energie maggiori al crescere di \vec{E} , ovvero 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 dei foto-elettroni non dipende dalla intensità ma dalla frequenza, come risulta da (2.10). Inoltre, dal punto di vista quantitativo le energie osservate dei foto-elettroni emessi sono di molti ordini di grandezza più grandi di quelle che sarebbe ragionevole attendersi classicamente.

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

$$E_{\nu} = h \,\nu \tag{2.18}$$

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

$$T_{\max} = h \nu - W = h \left(\nu - \frac{W}{h}\right) \tag{2.19}$$

Questa equazione è identica con la formula sperimentale (2.10) se si pone

$$\nu_0 = \frac{W}{h} \tag{2.20}$$

Il modello di Einstein spiega anche la proporzionalità del numero dei fotoelettroni 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 (2.18) ha le dimensioni di un momento angolare ovvero di tempo×energia ed è nota come costante di Planck. In effetti, la stessa costante era già apparsa nella formula di Planck per lo spettro della radiazione di corpo nero, un argomento che non discuteremo in questa sede e per il quale rinviamo alla bibliografia.

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. Infatti abbiamo visto che se si suppone, secondo il modello classico, che l'energia della radiazione sia uniformemente "dispersa" nello spazio, essa non sarebbe sufficiente, per le intensità (2.13) 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.

Valutiamo l'energia dei fotoni per luce nello spettro visibile (2.11):

$$E_{visible} \approx (2.6 - 5.0) \times 10^{-19} J \approx (1.6 - 3) \, eV$$
 (2.21)

che è l'energia tipica dei foto-elettroni. Ricordando la relazione tra la frequenza ν e la lunghezza d'onda λ valida per radiazione elettromagnetica che si propaga nel vuoto,

$$\nu = \frac{c}{\lambda} \tag{2.22}$$

otteniamo

$$E = \frac{h c}{\lambda} \tag{2.23}$$

In fisica atomica può essere utile tenere presente la formula numerica

$$E[eV] = \frac{12400}{\lambda[\text{Å}]}$$

dove λ è espresso in Angström, $1\text{\AA} = 10^{-10} m$ e l'energia E in eV.



Figura 1: Effetto Compton.

3 L'effetto Compton

L'aspetto "corpuscolare" della radiazione elettromagnetica che emerge dalla descrizione di Einstein dell'effetto fotoelettrico fornisce anche 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 soggiacente l'effetto Compton è il seguente. Si consideri un elettrone a riposo, colpito da radiazione di frequenza ν . Nell'ipotesi fotonica, questo processo è descritto dall'urto elastico di un fotone incidente di energia E ed impulso \vec{p} con l'elettrone a riposo. (Fig. 1).

Ricordiamo la relazione tra energia ed impulso di una particella di massa ${\cal M}$ in meccanica relativistica

$$E = c \sqrt{\vec{p}^2 + M^2 c^2} \tag{3.24}$$

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

$$E = c \left| \vec{p} \right| \tag{3.25}$$

Siano $\vec{p'}$ and E' il momento e l'energia del fotone diffuso e \vec{P} il momento dell'elettrone dopo il processo di diffusione. La conservazione del momento e

dell'energia impongono che

$$\vec{p} = \vec{p'} + \vec{P}$$
 $E + m_e c^2 = E' + \sqrt{c^2 \vec{P}^2 + m_e^2 c^4}$ (3.26)

dove m_e è la massa dell'elettrone. Pertanto

$$(E - E' + m_e c^2)^2 = m_e^2 c^4 + c^2 (\vec{p}^2 + \vec{p'}^2 - 2 \vec{p} \cdot \vec{p'}) =$$

= $m_e^2 c^4 + E^2 + (E')^2 - 2 E E' \cos \theta$ (3.27)

dove θ è l'angolo di diffusione, cioè l'angolo formato da $\vec{p'}$ e $\vec{p}.$ Otteniamo quindi

$$(E - E') m_e c^2 = E E' (1 - \cos \theta)$$
(3.28)

La relazione di Einstein (2.23) implica che

$$E = \frac{ch}{\lambda} \qquad E' = \frac{ch}{\lambda'} \tag{3.29}$$

dove λ e λ' sono le lunghezze d'onda del fotone incidente e di quello diffuso. In definitiva

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \theta) \tag{3.30}$$

Concludiamo che 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

$$\lambda_{Compton} \equiv \frac{h}{m_e c} = 2.43 \times 10^{-12} \, m \tag{3.31}$$

Classicamente, la radiazione diffusa dovrebbe invece avere la stessa frequenza di quella incidente. 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.

4 L'atomo di Bohr

Un ingrediente essenziale nel processo che portò alla scoperta della meccanica quantistica fu l'osservazione sperimentale degli spettri di emissione e di assorbimento degli atomi. Si constatò che gli atomi non emettono o assorbono luce di frequenza arbitraria, ma solo in corrispondenza a certe frequenze discrete. Nel caso dell'idrogeno, per esempio, diventò chiaro che le frequenze $\nu_{n,m}$ della luce assorbita o emessa erano organizzate in righe spettrali catturate da una formula del tipo

$$\nu_{n,m} = c R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \qquad n, m = 1, 2, 3, \dots$$
 (4.32)

dove R_H è una costante, detta costante di Rydberg per l'idrogeno, che fu possibile misurare con notevole precisione

$$R_H = 1.0967760 \times 10^7 \, m^{-1} \tag{4.33}$$

Formule analoghe alla (4.32) furono trovate per gli spettri di altri elementi chimici, anche se non erano così semplici e così accurate come quella per l'idrogeno.

N. Bohr (1885-1962) capì che l'ipotesi dei fotoni di Einstein poteva spiegare il carattere discreto degli spettri di assorbimento ed emissioni atomici (4.32) se si fosse ulteriormente postulato che non tutte le orbite degli elettroni sono permesse, ma solo quelle con energie discrete

$$E_n = -\frac{h c R_H}{n^2}$$
 $n = 1, 2, 3, \dots$ (4.34)

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

$$\nu_{n,m} = \frac{E_m - E_n}{h} = c \, R_H \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2}\right) \tag{4.35}$$

in accordo con il risultato sperimentale (4.32).

L'ipotesi che le energie "permesse" degli elettroni fossero date dalla (4.34) spiegava anche la stabilità delle dimensioni dell'atomo di idrogeno. Infatti la relazione (1.7) implica che anche i raggi delle orbite "permesse" sono discreti

$$r_n = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 h c R_H} n^2 \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$
(4.36)

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 × 10⁻¹⁰ m (4.37)

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.

L'ipotesi di Bohr sembrava dunque andare nella giusta direzione. Ma cosa c'era di così speciale nelle orbite con energie E_n in Eq. (4.34)? Perché queste erano permesse e non altre? Capire questo era essenziale per poter fare ulteriori progressi: la formula spettroscopica (4.32) 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 motivare tale salto d'immaginazione è quello di calcolare il momento angolare L per le orbite permesse. Dalla Eq. (1.8) si ottiene

$$L_n = \sqrt{\frac{e^2 m_e r_n}{4 \pi \epsilon_0}} = n \frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0} \sqrt{\frac{m_e}{2 h c R_H}}$$
(4.38)

Il momento angolare delle orbite permesse è dunque un multiplo intero di un momento angolare fondamentale: il fatto che la nuova costante fisica h (introdotta da Einstein e, prima ancora, da Planck) avesse proprio le dimensioni di un momento angolare, suggerì a Bohr l'idea che questo momento angolare fondamentale dovesse essere identificato con un multiplo di h. Il valore numerico della costante di Rydberg indica che questo multiplo sia precisamente $\frac{h}{2\pi}^4$.:

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\sqrt{\frac{m_e}{2h\,c\,R_H}} = \frac{h}{2\pi} \equiv \hbar \tag{4.39}$$

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

$$R_H = \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{m_e}{\hbar^3 c} \frac{1}{4\pi}$$
(4.40)

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

$$R_H^{teorico} = 1.0973700 \times 10^7 \, m^{-1} \tag{4.41}$$

in eccellente accordo col valore (4.33) ottenuto dalle osservazioni spettroscopiche. Le orbite "permesse" sembravano dunque essere caratterizzate da una condizione molto semplice

$$L_n = n\,\hbar\tag{4.42}$$

Quest'unica *regola di quantizzazione*, valida per tutti gli atomi, permetteva di esprimere lo spettro dell'idrogeno ed il raggio di un atomo di idrogeno in termini di costanti fondamentali

$$r_{1} \equiv a_{Bohr} = \frac{4 \pi \epsilon_{0} \hbar^{2}}{m_{e} e^{2}}$$

$$E_{n} = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^{2}} \frac{e^{4}}{(4 \pi \epsilon_{0})^{2}} \frac{m_{e}}{\hbar^{2}} \qquad n = 1, 2, \dots$$
(4.43)

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.

• **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: l'idrogeno H, il deuterio

 $^{^{4}}$ È probabile che Bohr sia arrivato alla determinazione "teorica" del coefficiente $\frac{1}{2\pi}$ e alla condizione di quantizzazione del momento angolare attraverso considerazioni basate sulla corrispondenza col risultato classico, che verrano discusse nella sezione seguente.

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^{++} . Per gli stessi elementi si calcolino le lunghezze d'onda delle linee spettrali corripondenti alle transizioni tra il primo livello eccitato ed il livello fondamentale.

Soluzione:

Il valore (4.40) per la constante di Rydberg è stato derivato schematizzando l'atomo come un elettrone che ruota intorno ad un nucleo fermo. Questa approssimazione è valida solo nel limite in cui il nucleo ha massa infinita. Per una massa M del nucleo, il problema a due corpi elettrone-nucleo è riconducibile a quello di una massa⁵

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} \tag{4.44}$$

che ruota intorno ad un centro di potenziale fisso. Se consideriamo inoltre un nucleo che ha carica Ze, con Z intero, il potenziale diventa

$$V(r) = -\frac{Z e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{r}$$
(4.45)

In definitiva per un idrogenoide con un nucleo di carica Z ed una massa M la formula di Bohr (4.43) va modificata rimpiazzando e^2 con $Z e^2$ e m_e con μ :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2} \frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \frac{\mu}{\hbar^2} \equiv -Z^2 \frac{R(M) h c}{n^2} \qquad n = 1, 2, \dots \quad (4.46)$$

Abbiamo introdotto R(M), la costante di Rydberg corrispondente ad un nucleo di massa M. Se denotiamo con R_{∞} la constante di Rydberg per un nucleo di massa infinita:

$$R_{\infty} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 \frac{1}{4\pi} \frac{m_e}{\hbar^3 c} \tag{4.47}$$

la costante di Rydberg per un nucleo di massa M è

$$R(M) = R_{\infty} \frac{1}{1 + \frac{m_e}{M}} \approx R_{\infty} \left(1 - \frac{m_e}{M}\right)$$
(4.48)

 $^{{}^{5}\}mu$ è detta la massa ridotta del sistema a due masse m_{e} e M.

Ricordando che

$$\frac{m_p}{m_e} = 1836.15\tag{4.49}$$

otteniamo

$$R_{H} = R(m_{p}) \approx R_{\infty} \left(1 - \frac{m_{e}}{m_{p}}\right) = 1.096776 \times 10^{7} m^{-1}$$

$$R_{D} = R(2 m_{p}) \approx R_{\infty} \left(1 - \frac{m_{e}}{2 m_{p}}\right) = 1.097074 \times 10^{7} m^{-1}$$

$$R_{He^{+}} = R(4 m_{p}) \approx R_{\infty} \left(1 - \frac{m_{e}}{4 m_{p}}\right) = 1.097224 \times 10^{7} m^{-1}$$

$$R_{Li^{++}} = R(7 m_{p}) \approx R_{\infty} \left(1 - \frac{m_{e}}{7 m_{p}}\right) = 1.097288 \times 10^{7} m^{-1} \quad (4.50)$$

Si osservi come tener conto della massa finita del protone migliori in maniera spettacolare l'accordo tra il valore della costante di Rydberg per l'idrogeno prevista dal modello di Bohr e quello ottenuto dalle misure sperimentali spettroscopiche (4.33).

Le lunghezze d'onda delle prime righe spettrali corripondenti alle transizioni tra le orbite con n = 1 e n = 2 sono

$$\lambda_{H} = \frac{4}{3} \frac{1}{R_{H}} = 1215.69 \text{ Å}$$

$$\lambda_{D} = \frac{4}{3} \frac{1}{R_{D}} = 1215.36 \text{ Å}$$

$$\lambda_{He^{+}} = \frac{4}{3} \frac{1}{4R_{He^{+}}} = 303.798 \text{ Å}$$

$$\lambda_{Li^{++}} = \frac{4}{3} \frac{1}{9R_{Li^{++}}} = 135.013 \text{ Å}$$
(4.51)

5 Il principio di corrispondenza ed il limite semi-classico

Un ulteriore modo per motivare la formula (4.40) che esprime la costante di Rydberg per l'idrogeno in termini di costanti fisiche fondamentali fa uso del cosidetto *principio di corrispondenza* (introdotto da Bohr).

Ripartiamo dalla formula (4.34) per i livelli di energia dell'atomo di idrogeno. Se n è grande (molto maggiore di 1) la distanza tra due livelli

contigui $E_{n+1} \in E_n$ diventa molto piccola:

$$E_{n+1} - E_n = \frac{c R_H h}{n^2} - \frac{c R_H h}{(n+1)^2} = c R_H h \frac{2n+1}{n^2 (n+1)^2} = \\\approx \frac{2 c R_H h}{n^3} \quad \text{per } n \gg 1$$
(5.52)

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 da E_{n+1} a E_n è, dalla (4.36),

$$r_{n+1} - r_n \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 h c R_H} n \qquad \text{per } n \gg 1$$
(5.53)

da cui

$$\frac{\Delta r}{r_n} = \frac{r_{n+1} - r_n}{r_n} \approx \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 h c R_H n} \ll 1 \qquad \text{per } n \gg 1 \tag{5.54}$$

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.

La frequenza della radiazione emessa quando un elettrone passa da una orbita di energia E_{n+1} ad una orbita contigua di energia E_n , è, per $n \gg 1$,

$$\nu_{n+1,n} \approx \frac{2 c R_H}{n^3} \qquad \text{per } n \gg 1 \tag{5.55}$$

Facendo uso della (4.36), possiamo esprimer
e $\nu_{n+1,n}$ in termini del raggio dell'orbit
a r_n

$$\nu_{n+1,n} \approx \frac{2 c R_H}{\left(\frac{8 \pi \epsilon_0 h c R_H}{e^2}\right)^{\frac{3}{2}}} \frac{1}{r_n^{\frac{3}{2}}} \quad \text{per } n \gg 1$$
(5.56)

Si noti che, per *n* molto grandi, le transizioni dall'orbita E_{n+1} ad orbite non necessariamente contingue ma *vicine* (con energie E_{n+1-k} e k = 1, 2... piccolo) corrispondono tutte, nella stessa approximazione, a frequenze di emissione che sono multipli *interi* della frequenza fondamentale $\nu_{n+1,n}$ (5.55)

$$\nu_{n+1,n+1-k} \approx \frac{2 c R_H}{n^3} k \quad \text{per } n \gg 1 \ \text{e} \ k = 1, 2 \dots \ll n \quad (5.57)$$

In altre parole, per n grande fissato, le righe di emissione corrispondenti a transizioni su orbite vicine sono (approssimativamente) equi-spaziate.

Classicamente, una carica che ruota su una orbita circolare con frequenza orbitale ν emette radiazione elettromagnetica con frequenze che sono *multipli interi* di ν . Per un elettrone su una orbita circolare di raggio r la frequenza orbitale dipende da r secondo la formula seguente

$$\nu = \frac{\nu}{2\pi r} = \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 m_e}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2\pi} \frac{1}{r^{\frac{3}{2}}}$$
(5.58)

dove abbiamo tenuto conto della relazione (1.5) tra velocità e raggio per una orbita circolare. Pertanto le frequenze di emissione classiche sono

$$\nu_{classiche} = k \,\nu = k \, \left(\frac{e^2}{4 \,\pi \,\epsilon_0 \,m_e}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2 \,\pi} \, \frac{1}{r^{\frac{3}{2}}} \qquad k = 1, 2, \dots \tag{5.59}$$

Vediamo quindi che sia le frequenze di emissione quantistiche (5.57) per n grandi che quelle classiche sono multipli interi di una frequenza fondamentale, come richiesto dal principio di corrispondenza. Inoltre la frequenza classica ν ha la stessa dipendenza da r — è proporzionale a $r^{-\frac{3}{2}}$ — di quella quantistica (5.56), nel limite $n \to \infty$. 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 (5.58) e nella (5.55)

$$\frac{2 c R_H}{\left(\frac{8 \pi \epsilon_0 h c R_H}{e^2}\right)^{\frac{3}{2}}} = \left(\frac{e^2}{4 \pi \epsilon_0 m_e}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{2 \pi}$$
(5.60)

Otteniamo così una equazione per la costante di Rydberg

$$h c R_{H} = \frac{1}{2} \frac{m_{e}}{\hbar^{2}} \left(\frac{e^{2}}{4\pi\epsilon_{0}}\right)^{2}$$
(5.61)

che coincide con la (4.40) ed è equivalente alla quantizzazione del momento angolare (4.42).

• Problema: Si applichi la condizione di quantizzazione di Bohr (4.42) ad un satellite di massa m = 1 kg orbitante circolarmente intorno alla Terra. Si determinino i raggi permessi in termini della massa della terra $M_t \in G$. 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 \bar{n} . Di quanto varia il raggio dell'orbita se il satellite si sposta su una orbita con $n = \bar{n} + 1$?

Soluzione: Sappiamo che le equazioni di Newton danno

$$v^2 = \frac{GM}{r} \tag{5.62}$$

La condizione di quantizzazione di Bohr dà

$$mrv = m\sqrt{GMr} = n\hbar \tag{5.63}$$

ovvero

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{G M m^2} \tag{5.64}$$

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

$$\Delta r_n = r_{n+1} - r_n \approx \frac{2 n \,\Delta n \,\hbar^2}{G \,M \,m^2} = \frac{2 \,\Delta n \,r_n}{n} = \frac{2 \,r_n}{n} \tag{5.65}$$

Pertanto

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{G M m^2} \approx R \Leftrightarrow n^2 \approx \frac{G M R m^2}{\hbar^2} = \frac{g m^2 R^3}{\hbar^2}$$
(5.66)

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

$$n^{2} \approx \frac{9.8 \times 1^{2} \times 6.4^{3} \times 10^{18}}{1.05^{2} \times 10^{-68}} \approx 24 \times 10^{88} \Rightarrow n \approx 5 \times 10^{44}$$
(5.67)

е

$$\Delta r_n \approx \frac{2}{5 \times 10^{44}} \times 6.4 \times 10^6 \, m \approx 2.6 \times 10^{-38} \, m \tag{5.68}$$

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.

6 La relazione di De Broglie

La formula di Einstein $E = h \nu$, che esprime l'aspetto *corpuscolare* delle onde elettromagnetiche, coinvolge la stessa costante di Planck che appare nella condizione di quantizzazione di Bohr (4.42), applicabile invece alle *particelle*. Questo suggerì a L. De Broglie che le particelle potessero a loro volta esibire una natura *ondulatoria*.

Riscriviamo la relazione di Einstein in termini della lunghezza d'onda

$$E = \frac{h c}{\lambda} \tag{6.69}$$

Questa relazione, valida per i fotoni, coinvolge c e quindi non si presta ad essere direttamente generalizzata a particelle con massa non nulla che, come gli elettroni negli atomi, possono essere non-relativistiche. Possiamo però riscrivere la relazione (6.69) in termini del momento del fotone $|\vec{p}| = \frac{E}{c}$, ottenendo

$$|\vec{p}| = \frac{h}{\lambda} \tag{6.70}$$

ovvero

$$\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|} \tag{6.71}$$

Questa formula non coinvolge c ed è quindi sensata anche per particelle nonrelativistiche. De Broglie (1923) propose che, in questa forma, la relazione sia valida, oltre che per le onde elettromagnetiche, anche per le particelle: ad una particella di impulso \vec{p} , andrebbe dunque associata, secondo De Broglie, una onda di lunghezza d'onda $\lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$.

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

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2 m E}} = \frac{12.26 \text{ \AA}}{\sqrt{E[eV]}} \tag{6.72}$$

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. Pertanto la natura "ondulatoria" degli elettroni di queste energie dovrebbe manifestarsi in contesti sperimentali simili a quelli richiesti per lo studio della diffrazione dei raggi X.



Figura 2: Diffrazione di Bragg

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 . 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 100 eV, 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 (vedi Fig. 2)

$$2\,d\,\sin\theta = n\,\lambda\tag{6.73}$$

Misurando la dipendenza dei picchi di diffrazione dall'energia degli elettroni Davisson and Germer furono in grado di verificare direttamente la relazione di De Broglie (6.71).

La condizione di quantizzazione di Bohr (4.42) può essere riformulata in termini della lunghezza d'onda di De Broglie in modo molto semplice ed intuitivo: le orbite degli elettroni atomici quantisticamente "permesse" sono quelle la cui lunghezza dell'orbita è pari ad un numero *intero* di lunghezze d'onda di De Broglie:

Lunghezza dell'orbita =
$$n\lambda$$
 $n = 1, 2, \cdots$ (6.74)

Infatti per un elettrone in una una orbita circolare intorno al nucleo, la relazione precedente diventa

$$2\pi r = n\lambda = n\frac{h}{p} \Rightarrow L = rp = n\hbar$$
(6.75)



Figura 3: Buca uni-dimensionale

che è proprio la regola di quantizzazione di Bohr (4.42).

Nella formulazione (6.74) la regola di quantizzazione può applicarsi anche a situazioni diverse da quelle 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. (Vedi Fig. 3).

La particella si muove all'interno della scatola, con energia $E = \frac{p^2}{2m}$ costante, 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 2*L*: infatti se, per esempio, la particella parte da un lato della scatola essa percorrerà la lunghezza *L* prima di rimbalzare sul lato opposto, per poi percorrere lo stesso percorso in senso inverso fino a ritornare nella posizione originale. La condizione di quantizzazione nella nuova formulazione (6.74) implica pertanto che

$$\frac{h}{|p|}n = 2L \Rightarrow |p| = \frac{nh}{2L} \tag{6.76}$$

Anche le energie di questo sistema sono pertanto quantizzate

$$E_n = \frac{p^2}{2m} = \frac{h^2 n^2}{8m L^2} \qquad n = 1, 2, \dots$$
(6.77)

Sorge a questo punto il problema di capire come estendere la regola di quantizzazione (6.74) ad altri sistemi. A questo scopo consideriamo una

particella che si muove in un potenziale unidimensionale

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(x) \tag{6.78}$$

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

$$p(x) = \pm \sqrt{2 m (E - V(x))}$$
 (6.79)

D'altra parte la relazione (6.74) è valida solo se |p| è costante. Riscriviamola nella forma

$$|p| (Lunghezza dell' orbita) = n h$$
(6.80)

Pensiamo di dividere l'orbita in piccoli tratti di lunghezza Δx , ognuno centrato in un punto x_i lungo l'orbita, con $i = 1, \dots N$ e N molto grande. Naturalmente

Lunghezza dell'orbita =
$$\sum_{i} \Delta x$$
 (6.81)

In ognuno di questi tratti, l'impulso p(x) è approssimativamente costante. Questo suggerisce pertanto di generalizzare la (6.80) al caso di p(x) dipendente da x nel modo seguente

$$\sum_{i} p(x_i) \,\Delta x = n \,h \tag{6.82}$$

dove la somma è estesa a tutti gli intervalli in cui abbiamo suddiviso l'orbita. Ovviamente se p è costante, la nuova formula (6.82) è equivalente a quella originale (6.80). Nel limite in cui le lunghezze Δx sono sempre più piccole la somma in (6.82) si riduce alla definizione di integrale:

$$\int_{\text{orbita}} dx \, p(x) = n \, h \tag{6.83}$$

Per precisare in che senso vada inteso l'integrale "lungo l'orbita" in (6.83)riconsideriamo di nuovo il caso della particella nella scatola a pareti riflettenti: in questo caso p non è costante ma assume solo due valori: $\pm |p|$. Possiamo dividere l'orbita in due tratti ambedue 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 in (6.82) (o l'integrale in (6.83)) si riduce quindi a due soli termini

$$|p|L + (-|p|)(-L) = nh$$
(6.84)

Si osservi il punto importante: per ottenere il risultato corretto (6.76), abbiamo posto $\Delta x = -L$ lungo il tratto dell'orbita in cui il momento è negativo poiché quel tratto viene percorso dalla particella in senso opposto al primo. Questo ci dice che dobbiamo intendere il prodotto $p(x_i) \Delta x$ nella (6.82) nel senso di prodotto scalare tra vettori $\vec{p}(x) \cdot \Delta \vec{x}$, dove $\Delta \vec{x}$ è definito come un vettore di lunghezza Δx , orientato lungo la tangente all'orbita e avente come direzione quella del moto della particella. Una volta chiarito questo punto, possiamo riscrivere la (6.83) nella forma

$$\int_{\text{orbita}} \vec{p}(x) \cdot d\vec{x} = n h \qquad n = 1, 2, \dots$$
(6.85)

Questa formulazione della regola di quantizzazione è valida anche in 3dimensioni, nel qual caso $\vec{x} \in \vec{p}$ sono vettori tri-dimensionali, e perfino per problemi con più particelle. Essa è nota come regola di quantizzazione di *Bohr-Sommerfeld*⁶.

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

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\,\omega^2 x^2 \tag{6.86}$$

Classicamente, tutte le energie E > 0 sono permesse (vedi Fig.4). L'orbita di energia E giace sul segmento $[-x_0, x_0]$ dove

$$x_0 = \sqrt{\frac{2E}{m\,\omega^2}}\tag{6.87}$$

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

$$\int_{\text{orbita}} \sqrt{2 m \left(E - \frac{1}{2} m \omega^2 x^2\right)} \, dx = n h \tag{6.88}$$

 $^{^6 {\}rm Originalmente}$ Bohr aveva ottenuto la sua regola di quantizzazione per sistemi uni-dimensionali. Sommerfeld estese la regola a sistemi più generali con molti gradi di libertà.



Figura 4: Il potenziale dell'oscillatore armonico.

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 l'integrale lungo l'orbita che appare nel membro di sinistra della (6.88) è

$$\int_{\text{orbita}} dx \sqrt{2 \, m \, E - m^2 \, \omega^2 \, x^2} = 2 \, \int_{-x_0}^{x_0} dx \sqrt{2 \, m \, E - m^2 \, \omega^2 \, x^2} =$$
$$= 2 \, m \, \omega \, \int_{-x_0}^{x_0} dx \, \sqrt{x_0^2 - x^2} \tag{6.89}$$

L'integrale che appare nel membro di destra è l'area di un semicerchio di raggio x_0 , ovvero $\frac{\pi}{2} x_0^2$. In definitiva le orbite permesse sono quelle per cui

$$m\,\omega\,\pi\,x_0^2 = n\,h\tag{6.90}$$

Ricordando la (6.87), otteniamo la condizione di quantizzazione per le energie di un oscillatore armonico

$$E_n = n \hbar \omega \qquad n = 1, 2, \dots \tag{6.91}$$

Proviamo a riassumere ed a trarre delle conclusioni generali da questo esempio.

Le orbite classiche dipendono con continuità dall'energia E e da altri integrali del moto. La regola di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld è un nuovo principio che seleziona tra tutte le orbite classiche *chiuse* un sottoinsieme discreto per il quale l'integrale in (6.85) è un multiplo intero della costante di Planck *h*. Questo porta ad uno spettro discreto per i valori dell'energia, di cui abbiamo dato diversi esempi: i livelli (4.43) dell'atomo di Bohr, i livelli (6.77) di una particella in una scatola, i livelli (6.91) dell'oscillatore armonico. Si noti che nella teoria di Bohr-Sommerfeld le orbite aperte (infinite) non sono affette da nessuna condizione di quantizzazione.

Concludiamo questa sezione con una osservazione. 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 per l'energia quando sostituito nella formula per i livelli (4.43). D'altra parte il valore n = 0 darebbe un risultato accettabile se sostituito nelle formule (6.77) per i livelli di una particella nella scatola o (6.91) per quelli di un oscillatore armonico: in ambedue i casi n = 0 corrisponderebbe 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? Nulla di quanto discusso fino ad ora permette di decidere in un senso o nell'altro: la teoria di Bohr-Sommerfeld è vaga su questo punto.

La risposta a questa domanda verrà dalla teoria quantistica "completa", una teoria che va molto al di là di quella di Bohr-Sommerfeld. La risposta della teoria quantistica "completa", sarà — grosso modo — che non esistono, per i due esempi fatti, orbite con energia nulla. Ma all'interno di questa teoria "completa" il concetto stesso di orbita non sarà più veramente applicabile. E la formula di Bohr-Sommerfeld emergerà, nella teoria "vera", come una approssimazione applicabile, di norma, solo quando n è molto grande. Risulterà in particolare che la formula (6.91) non è esatta, ma deve essere corretta nel modo seguente

$$E_n = n \hbar \omega + \frac{1}{2} \hbar \omega \qquad n = 0, 1, 2, \dots$$
 (6.92)

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

Benché la formula di Bohr-Sommerfeld sia, nella teoria "completa", in generale, solo una formula approssimata, i livelli degli idrogenoidi (4.43) (come quelli della particella in una scatola (6.77) per $n \ge 1$), calcolati con la teoria di Bohr-Sommerfeld coincidono esattamente con quelli ottenuti nella

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 l'*esattezza* della formula di Bohr-Sommerfeld in questo caso particolare sia stata una benevola ed un po' "fortunosa" casualità.

7 Onde e particelle

Nonostante il successo della teoria di Bohr-Sommerfeld nello spiegare un gran numero di fatti sperimentali, alcuni dei quali sono stati ricordati nelle sezioni precedenti⁷, 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). 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. In questa sezione vogliamo approfondire questo apparente conflitto fra comportamento ondulatorio e comportamento corpuscolare per capire in che modo la meccanica quantistica evita una potenziale contraddizione logica⁸.

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 $A \in B$ 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; confronteremo tra loro le due situazioni:

- quella in cui la sorgente emette particelle;
- quella in cui la sorgente emette onde.

⁷Fra i fenomeni che non abbiamo avuto spazio per discutere e che la teoria di Bohr-Sommerfeld, contrariamente alla fisica classica, spiega con successo, ricordiamo lo spettro di corpo nero e l'andamento con la temperatura dei calori specifici.

⁸La discussione in questa sezione 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.



Figura 5: Un esperimento con pallottole classiche.

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.

7.1 Particelle classiche e onde classiche

Consideriamo 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 o palline, per esempio) tutte uguali tra loro ed indistruttibili, vedi Fig. 5.

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. 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 particelle "classiche" del genere descritto, che

$$N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$$
(7.93)

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



Figura 6: Un esperimento con onde.

particelle che sono passate attraverso A è lo stesso (in media) di quelle che passano attraverso A quando la fenditura B è chiusa. Ovvero sono $N_A(x)$. Analogamente il numero di particelle che arrivano in x essendo passate per Bquando le due fenditure sono aperte è (in media) uguale a $N_B(x)$. Da questo consegue la (7.93). Un modo di esprimere la (7.93) è di dire che il flusso di particelle classiche attraverso le due fenditure non mostra interferenza.

Consideriamo ora il caso in cui la sorgente emette delle onde, che supponiamo essere *monocromatiche* ovvero di lunghezza d'onda λ fissata (Fig. 6).

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

$$I_{AB}(x) \neq I_A(x) + I_B(x) \tag{7.94}$$

Si dice che le onde "interferiscono". Benché il comportamento ondulatorio differisca marcatamente da quello "corpuscolare" (7.93), la matematica che lo governa non è molto più complicata. La formula per $I_{AB}(x)$ è

$$I_{AB}(x) = I_A(x) + I_B(x) + 2\sqrt{I_A(x)} I_B(x) \cos \delta_{AB}(x)$$
(7.95)

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

$$\delta_{AB}(x) = 2\pi \frac{(l_A(x) - l_B(x))}{\lambda} \tag{7.96}$$

La formula (7.95) 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

$$\psi_A(x) = \sqrt{I_A(x)} e^{i\delta_A(x)} \qquad \psi_B(x) = \sqrt{I_B(x)} e^{i\delta_B(x)}$$
(7.97)

dove

$$\delta_A(x) = 2\pi \frac{l_A(x)}{\lambda} \qquad \delta_B(x) = 2\pi \frac{l_B(x)}{\lambda} \tag{7.98}$$

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

$$I_A(x) = |\psi_A(x)|^2$$
 $I_B(x) = |\psi_B(x)|^2$ (7.99)

La relazione di interferenza (7.95) si può riscrivere allora come

$$I_{AB}(x) = |\psi_A(x) + \psi_B(x)|^2$$
(7.100)

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

$$\psi_{AB}(x) = \psi_A(x) + \psi_B(x)$$
 (7.101)

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

7.2 Particelle quantistiche

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. (Fig. 7).



Figura 7: Un esperimento con particelle quantistiche.

In sostanza stiamo discutendo di una variante dell'esperimento di diffrazione di elettroni di Davisson e Germer.

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 particelle classiche considerate nella sottosezione precedente.

D'altro lato, sperimentalmente 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 collegato a $N_A(x)$ e $N_B(x)$ dalla relazione (7.93) ma da una relazione esattamente analoga alla (7.95):

$$N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x) + 2\sqrt{N_A(x)N_B(x)}\cos\delta_{AB}(x)$$
(7.102)

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

$$N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$$
(7.103)

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 arrivano 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. Se aspettiamo un tempo sufficientemente lungo risulta sperimentalmente che la formula valida, per le particelle quantistiche, è la (7.102) e non la (7.103).

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. Non si può dire esattamente per dove le particelle passino. Poiché vale la formula (7.102) possiamo però dire precisamente in che modo la "situazione fisica"⁹ 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

$$\psi_A(x) = \sqrt{N_A(x)} e^{i\delta_A(x)} \qquad \psi_B(x) = \sqrt{N_B(x)} e^{i\delta_B(x)}$$
(7.104)

che chiameremo ampiezze. $\psi_A(x) \in \psi_B(x)$ sono le ampiezze che descrivono la situazione fisica in cui solo una delle fenditure è aperta. La "situazione fisica" delle particelle che arrivano in x quando ambedue le fenditure sono aperte è descritta dalla ampiezza data da

$$\psi_{AB}(x) = \psi_A(x) + \psi_B(x)$$
 (7.105)

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

$$N_A(x) = |\psi_A(x)|^2 \qquad N_B(x) = |\psi_B(x)|^2 \qquad N_{AB}(x) = |\psi_{AB}(x)|^2$$
(7.106)

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. Una costruzione che non è possibile naturalmente illustrare in dettaglio in una introduzione elementare come questa e per l'approfondimento del quale rimandiamo a testi più avanzati.

 $^{^{9}}$ In meccanica quantistica questa viene indicata col nome di stato fisico o semplicemente stato.

8 Il principio di indeterminazione

Siamo arrivati alla conclusione che nella situazione fisica 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. 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. 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, necessariamente, in questo esperimento modificato, dovrà essere che

$$N_{AB}(x) = N_A(x) + N_B(x)$$
(8.107)

E questo è proprio quello che si osserva: modificando nel modo descritto l'esperimento, non si osservano più frange di interferenza! 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 distanza d tra le due fenditure:

$$\lambda_{luce} \lesssim d \tag{8.108}$$

D'altronde, per una onda elettromagnetica classica potremmo ridurre l'intensità, ovvero l'ampiezza dell' onda, in modo arbitrario, mantenendo fissa λ_{luce} . 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. Ma abbiamo visto più volte che questo sarebbe logicamente impossibile.

In realtà (e fortunatamente per la coerenza della teoria quantistica) la luce non è una onda elettromagnetica classica. La luce è essa stessa composta da particelle quantistiche, i fotoni, il cui impulso è dato dalla formula di Einstein

$$p_{fotone} = \frac{h}{\lambda_{luce}} \tag{8.109}$$

Pertanto se $\lambda_{luce} \lesssim d$, 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:

$$p_{fotone} \gtrsim \frac{h}{d}$$
 (8.110)

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 $\Delta p_{particella}$ che sarà dello stesso ordine di grandezza dell'impuso del fotone diffuso

$$\Delta p_{particella} \gtrsim \frac{h}{d} \tag{8.111}$$

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

$$\Delta \theta_{pert} = \frac{\Delta p_{particella}}{p_{particella}} \gtrsim \frac{h}{d \, p_{particella}} = \frac{\lambda_{particella}}{d} \tag{8.112}$$

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

Determiniamo ora 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. 8.



Figura 8: Diffrazione attraverso due fenditure.

La differenza tra le lunghezze dei percorsi di due onde che arrivano nello stesso punto dello schermo passando attraverso due fenditure poste a distanza dè

$$\Delta l = d \, \sin \theta \qquad \frac{x}{L} \equiv \tan \theta \tag{8.113}$$

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

$$d\,\sin\theta = n\,\lambda_{particella} \tag{8.114}$$

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

$$\theta_n \sim n \, \frac{\lambda_{particella}}{d}$$
(8.115)

La differenza $\Delta \theta_{frange}$ tra gli angoli corrispondenti a due frange di interferenza contigue è pertanto pari a

$$\Delta \theta_{frange} \sim \frac{\lambda_{particella}}{d} \tag{8.116}$$

Confrontando con la (8.112) concludiamo che

$$\Delta \theta_{pert} \gtrsim \Delta \theta_{frange} \tag{8.117}$$

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. In altre parole 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 del fatto che la luce che usiamo per determinare la posizione di una particella, è essa stessa composta da particelle quantistiche. Il principio di indeterminazione è equivalentemente formulato come l'impossibilità di misurare posizione e momento di una particella con precisione simultaneamente arbitraria. Si consideri infatti di nuovo (8.111): in questa relazione d rappresenta la risoluzione Δx con cui misuriamo la posizione della particella. $\Delta p_{particella}$ è l'indeterminazione Δp_x nella conoscenza del momento della particella lungo la stessa direzione di Δx . Pertanto la (8.111) si riscrive

$$\Delta p_x \,\Delta x \gtrsim h \tag{8.118}$$

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 quantisitca quindi il concetto di traiettoria perde senso. Esso viene sostituito dal concetto di ampiezza, quei numeri complessi $\psi(x)$, definiti (7.104), che abbiamo introdotto nella discussione precedente. 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.

9 Letture consigliate

- La Fisica di Feynman, Vol. 3, R. P. Feynman, R. B. Leighton e M. Sands, (1975) Inter European Editions, B.V.
- Fisica Generale, J. Orear, Zanichelli, (1970) Bologna.
- Lezioni di Meccanica Quantistica, L.E. Picasso, Edizioni ETS, (2000) Pisa.