

## Bohr (1913)

Bohr sviluppò un modello di atomo in grado di spiegare l'emissione delle righe spettrali dell'idrogeno.

### *Ipotesi del modello di Bohr*

- L'elettrone può muoversi soltanto su **un insieme discreto di orbite** che soddisfano certe condizioni quantistiche (momento angolare dell'elettrone quantizzato).
  - L'elettrone **non irradia mentre si muove sulle orbite premesse**. Questa condizione è in contrasto con l'elettromagnetismo classico.
  - **L'assorbimento e l'emissione** avvengono solamente quanto l'elettrone esegue una **transizione tra due orbite permesse** corrispondenti, quindi, a due diversi stati quantizzati.
- La differenza di energia tra i due stati è assorbita o emessa sotto forma di un quanto di luce di frequenza.**

$$\nu = \frac{1}{h} (E_{n_1} - E_{n_2}) \quad (\text{condizione di Bohr})$$

Imponendo l'equilibrio tra la forza di attrazione colombiana e quella centrifuga nel caso di un elettrone che si muova su un'orbita circolare di raggio  $r$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$$

Ricavando il raggio, si ottiene

$$r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{mv^2}$$

Il quale, sulla base della fisica classica, può assumere qualsiasi valore.

Bohr postulò che le uniche orbite possibili fossero quelle per cui il **momento angolare è un multiplo intero di  $\hbar$**  ( $h/2\pi$ )

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

dove  $n$  è detto **numero quantico principale**.

*Di conseguenza, il raggio e l'energia totale sono quantizzati*

$$r_n = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{mZe^2} n^2 \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{m}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, 3 \dots$$

Ponendo  $n = 1$  e  $Z = 1$  si ottiene il raggio dell'orbita più piccola nell'atomo di idrogeno (raggio di Bohr)

$$a_H = r_{n=1} = 4\pi\epsilon_0 \frac{\hbar^2}{me^2} = 5,292 \times 10^{-11} m$$

a cui corrisponde la minima energia possibile (stato fondamentale).

Il raggio di Bohr è spesso utilizzato come **unità di lunghezza** in fisica atomica, nel sistema denominato **Unità atomiche**.

La differenza tra due livelli energetici è

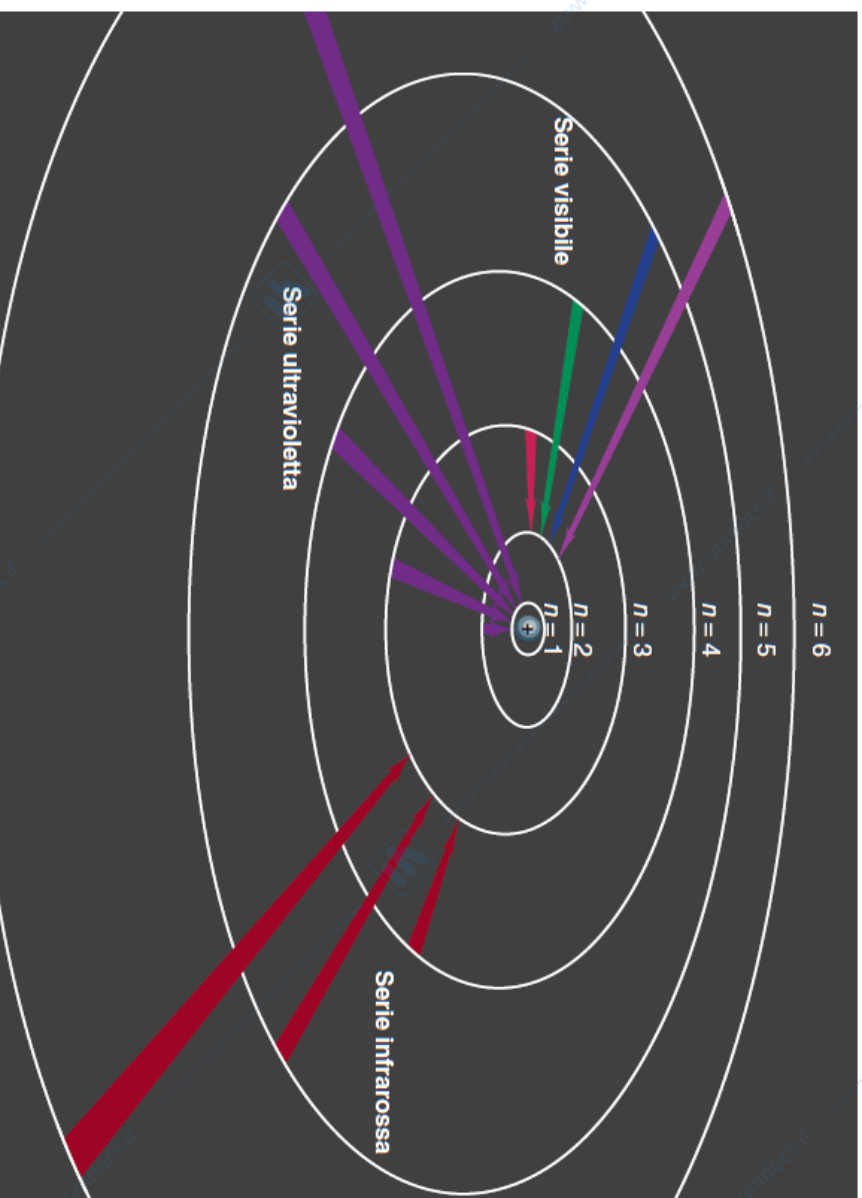
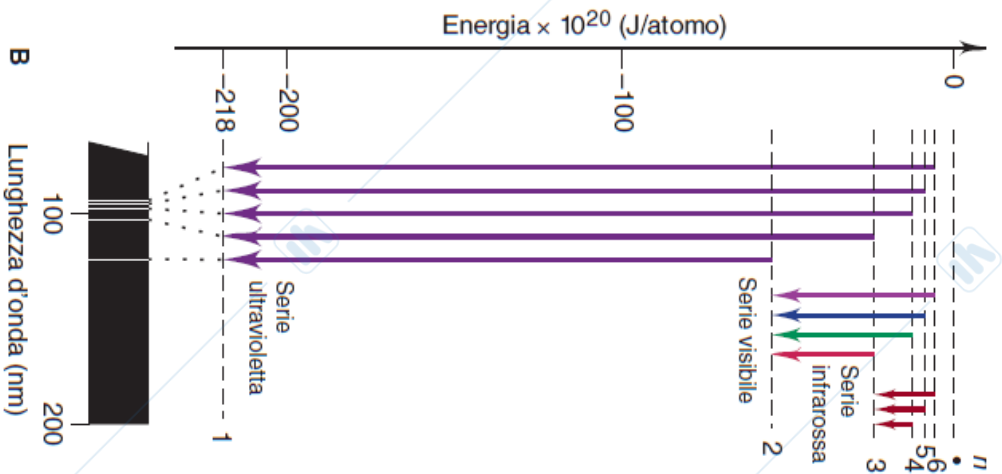
$$E_{n_2} - E_{n_1} = -\frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{m}{2\hbar^2} \cdot \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

da cui

$$\nu = \frac{1}{h} (E_{n_2} - E_{n_1}) = -\frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{2\pi^2 m}{h^3} \cdot \left( \frac{1}{n_2^2} - \frac{1}{n_1^2} \right)$$

$$\sigma = \frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{2\pi^2 m}{ch^3} \cdot \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

# La spiegazione di Bohr delle serie di righe spettrali dell'atomo di H



$$\sigma = R_H Z^2 \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{con} \quad R_H = \frac{e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} \cdot \frac{2\pi^2 m}{ch^3}$$

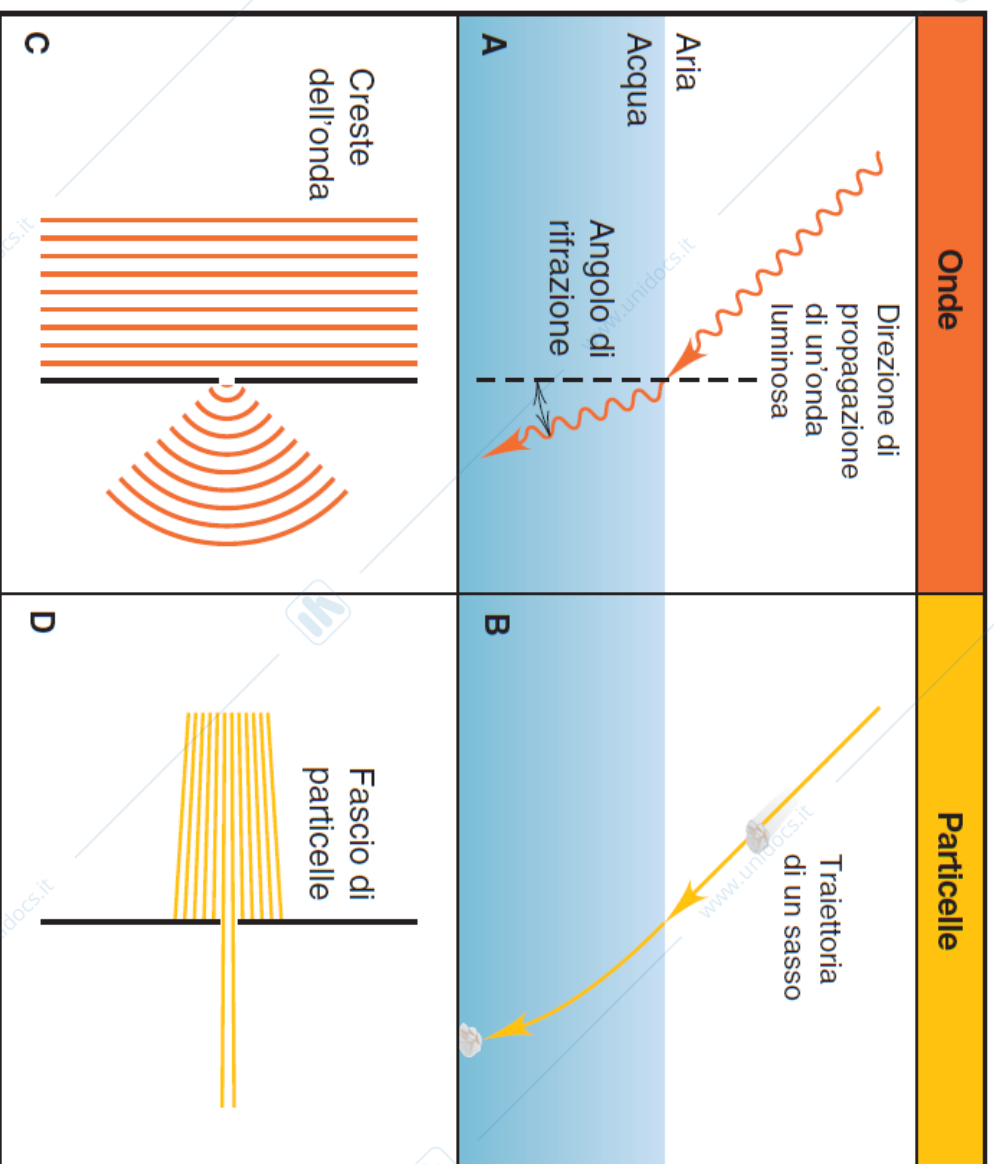
Inserendo i valori noti delle costanti fondamentali e  $Z = 1$  (idrogeno), la costante di Rydberg così ottenuta è molto vicina al valore sperimentale.

$$R_H = 10\,973\,731,568\,160(21)m^{-1}$$

$$\text{incertezza} = \pm 0,000\,021\,m^{-1}$$

La relazione vale anche per tutti gli atomi idrogenoidi, cioè che hanno un solo elettrone orbitante ( $He^+$ ,  $Li^{2+}$ ,  $Be^{3+}$ , ...).

# Differenze di comportamento di onde e particelle



## Dualismo onda-particella

Le radiazioni elettromagnetiche danno fenomeni quali la diffrazione che manifestano una **natura ondulatoria**.

L'effetto **fotoelettrico** è interpretabile assumendo la radiazione elettromagnetica come costituita da **fotoni**, il cui comportamento è quello di **particelle**.

**Le radiazioni elettromagnetiche hanno carattere duale (onda-particella).**

Nella rappresentazione ondulatoria, l'intensità della radiazione è proporzionale al quadrato dell'ampiezza dell'onda.

Nella rappresentazione particellare, l'intensità è proporzionale al numero di fotoni presente istante per istante.

Poiché le radiazioni elettromagnetiche, ritenute di natura ondulatoria, manifestano anche un comportamento particellare.

La materia, ritenuta di natura particellare, può avere anch'essa carattere duale e quindi manifestare anche una natura ondulatoria?

### **De Broglie (1924)**

Louis de Broglie avanzò l'ipotesi (ipotesi di de Broglie) che tutte particelle avessero associate anche proprietà ondulatorie.

La lunghezza d'onda era inversamente proporzionale alla quantità di moto lineare (impulso)

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

Einstein nell'ambito della teoria relatività ristretta (1905) aveva trovato una relazione tra l'energia e la massa

$$E = mc^2$$

Nel caso di un fotone

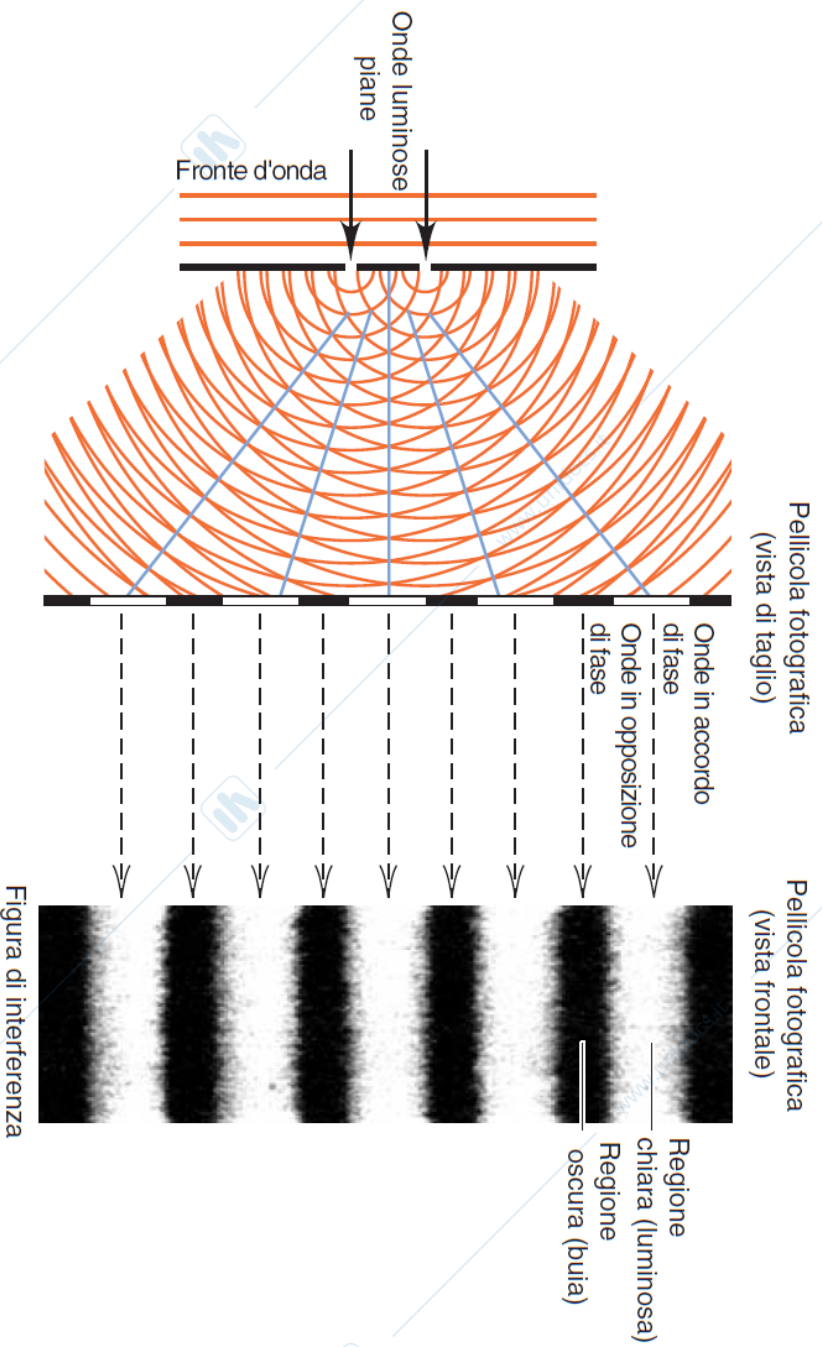
$$E = mc^2 = h\nu = h\frac{c}{\lambda} \quad \Rightarrow \quad \lambda = \frac{h}{mc}$$

Applicandola per analogia a una particella, si ottiene la relazione di de Broglie.

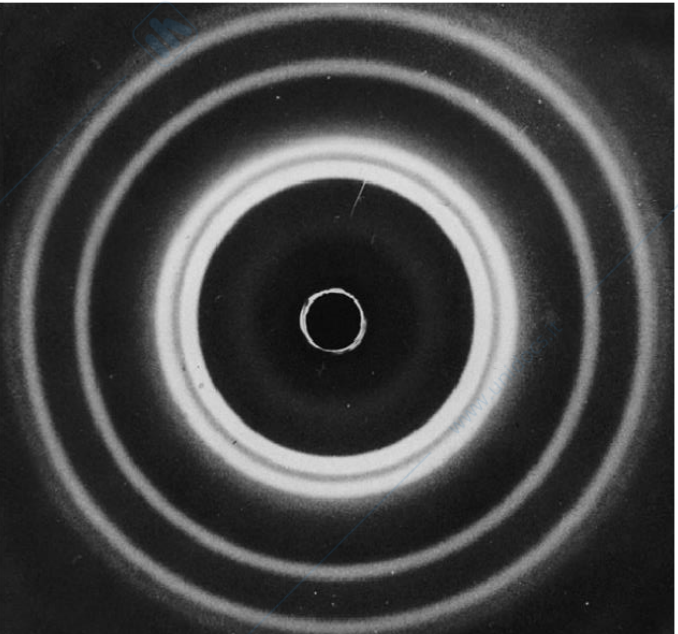
## Lunghezze d'onda di de Broglie

Corpo	Massa (g)	Velocità (m/s)	$\lambda$ (m)
elettrone lento	$9 \times 10^{-28}$	1,0	$7 \times 10^{-4}$
elettrone veloce	$9 \times 10^{-28}$	$5,9 \times 10^6$	$1 \times 10^{-10}$
particella $\alpha$	$6,6 \times 10^{-24}$	$1,5 \times 10^7$	$7 \times 10^{-15}$
massa di 1 g	1.0	0,01	$7 \times 10^{-29}$
palla da baseball	142	25,0	$2 \times 10^{-34}$
Terra	$6,0 \times 10^{27}$	$3,0 \times 10^4$	$4 \times 10^{-63}$

# Formazione di una figura di diffrazione

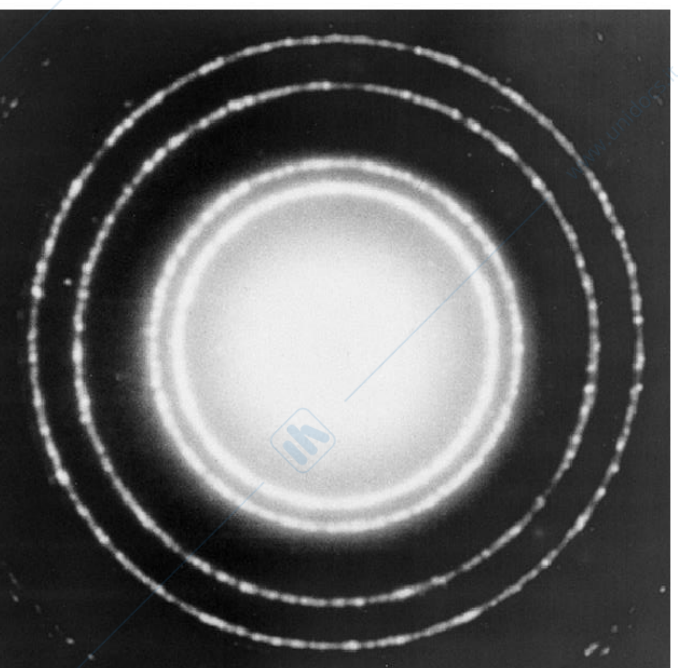


Clinton Davisson e Lester Germer (1925), figura di diffrazione inviando un fascio di **elettroni veloci** contro un cristallo isolato di nichel.  
**Diffrazione dei raggi X e degli elettroni di una lamina di alluminio**



PSSC Physics © 1985, Education Development Center, Inc

raggi X



D. C. Heath & Company/Education Development Center, Inc

elettroni

## Principio di indeterminazione di Heisenberg (1927)

La **posizione** e il **momento lineare** di una particella sono **complementari**, risulta impossibile conoscere simultaneamente con accuratezza arbitraria posizione e momento lineare.

La relazione tra l'incertezza intrinseca dell'una e dell'altra misura è data dal principio di indeterminazione di Heisenberg.

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}$$

$\Delta x$ : *incertezza nella posizione*

$\Delta p_x$ : *incertezza nel momento lineare*

L'incertezza tende a diventare trascurabile all'aumentare della massa della particella.

$$\Delta x \cdot \Delta v_x \geq \frac{\hbar}{2m}$$

Nei sistemi macroscopici, l'incertezza è trascurabile. Si hanno **traiettorie** (determinismo-meccanica classica).

Nei sistemi microscopici, l'incertezza intrinseca non è trascurabile. Si hanno regioni dello spazio dove è più probabile la presenza della particella (irriducibilità statistica - meccanica quantistica).

Le particelle presentano due aspetti complementari:

- aspetto ondulatorio (fenomeni di interferenza e diffrazione)
- aspetto corpuscolare (entità indivisibile)

Si tratta di **situazioni limite** che non vanno estrapolate al di là delle **specifiche situazioni**.

La **particella non è rappresentabile** con un modello preso **dall'esperienza ordinaria** (descrizione intuitiva).

Una **particella** non va pensata né come onda né come corpuscolo.

Non si può prevedere quale sarà il risultato di una certa osservazione.

Si possono solo assegnare delle probabilità per i vari possibili risultati.

Una particella necessita di una **descrizione astratta in termini puramente probabilistici**.

## **Fisica classica**

La meccanica statistica descrive il comportamento medio di sistemi composti da un grande numero di particelle.

La probabilità è introdotta a causa dell'ignoranza dello stato preciso del sistema studiato.

Il comportamento è sempre teoricamente prevedibile con esattezza in presenza di informazioni sufficienti.

## **Fisica moderna**

In meccanica quantistica, la descrizione probabilistica ha carattere fondamentale e non è riconducibile a mancanza di informazioni.

La meccanica quantistica è irriducibilmente statistica.

## **Funzione d'onda ed equazione di Schrödinger (1926)**

L'equazione di Schrödinger ha come soluzione un funzione  $\Psi(\vec{r}, t)$ , detta funzione d'onda, che rappresenta il moto della particella.

**La funzione d'onda  $\Psi$  è una funzione a valori complessi della posizione e del tempo a cui corrisponde uno stato di moto univoco della particella.**

## Equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial \vec{r}^2} - V(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

Introducendo il seguente operatore

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial \vec{r}^2} + V(\vec{r}, t) \quad \text{operatore hamiltoniano}$$

diventa

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} - \hat{H} \Psi(\vec{r}, t) = 0$$

## Interpretazione di Born

La **probabilità** di osservare la particella al tempo  $t$  entro l'elemento di volume  $dV$  attorno al punto  $\vec{r}$  è **proporzionale al modulo quadro della sua funzione d'onda**

$$dP \propto |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) dV$$

La proporzionalità diventa uguaglianza se la **funzione d'onda è normalizzata**, cioè se:

$$\int_V |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV = 1$$

L'integrale è esteso a tutto la regione dello spazio in cui è definita la funzione. Questa regione può essere uguale a tutto lo spazio euclideo.

Il modulo quadro della **funzione d'onda normalizzata** in un punto rappresenta la **densità di probabilità** di trovare la particella in quel punto.

$$dP = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$$

Poiché il termine  $|\Psi(\vec{r}, t)|^2 dV$  è adimensionato (probabilità) allora:

$$[|\Psi(\vec{r}, t)|^2] = \text{lunghezza}^{-3}$$

**La funzione d'onda è dimensionata.**

## Funzione potenziale non funzione del tempo

Quando la funzione potenziale non dipende dal tempo ( $V(\vec{r})$ ), la funzione d'onda può essere espressa come il prodotto di due funzioni, una dipendente dal tempo l'altra dallo spazio:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \phi(t)\psi(\vec{r})$$

Sostituendo si ottengono due equazioni indipendenti.

La prima equazione è

$$i\hbar \frac{\partial \phi(t)}{\partial t} = E\phi(t) \quad \Rightarrow \quad \phi(t) = \exp\left(-i\frac{Et}{\hbar}\right)$$

$\phi(t)$  è una funzione complessa

La seconda equazione è detta

**equazione di Schrödinger stazionaria**

$$\hat{H} \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad \Rightarrow \quad \psi(\vec{r})$$

è un problema agli autovalori ( $\Omega f = \alpha f$ )

dove

$\psi(\vec{r})$ : *autofunzione reale (funzione d'onda stazionaria)*

$E$ : *autovalore (energia totale: cinetica + potenziale)*

Per questi sistemi, il modulo quadro della funzione d'onda è uguale al quadrato della funzione d'onda stazionaria

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \cdot \Psi(\vec{r}, t) = e^{i\frac{Et}{\hbar}} \psi(\vec{r}) e^{-i\frac{Et}{\hbar}} \psi(\vec{r}) = \psi(\vec{r})^2$$

Il quadrato della funzione d'onda stazionaria normalizzata rappresenta la densità di probabilità di trovare la particella in quel punto.

$$dP = \psi(\vec{r})^2 dV$$

La funzione d'onda stazionaria è dimensionata

$$[\psi(\vec{r})^2] = \text{lunghezza}^{-3}$$