Crisi della Fisica Classica e Meccanica Quantistica

Stefano Ranfone *

Abstract

Keywords: Fisica Quantistica, Corpo Nero, Quanti di luce, Fisica Atomica, Meccanica Ondulatoria.

In queste brevi note si desidera fornire una introduzione informale ai concetti che hanno portato alla nascita della Teoria dei Quanti e alla Fisica Quantistica. Nella seconda parte si forniscono anche alcuni semplici esempi di applicazione dell'equazione di Schrödinger, arrivando a dimostrare una formula (approssimata) che descrive l'effetto Tunnel.

1 Introduzione

Nel periodo che va dalla fine del diciannovesimo secolo ai primi decenni del ventesimo secolo, una serie di risultati sperimentali, riguardanti fenomeni che avvengono su scala atomica, portarono alla **Crisi della Fisica Classica**. L'interpretazione di questi risultati richiese un cambiamento radicale nelle nostre concezioni del mondo e nelle leggi classiche fondamentali che lo descrivono. Discuteremo qui di seguito alcuni di questi risultati, ed in particolare quelli che evidenziarono le proprietà corpuscolari della radiazione e, per contro, le proprietà ondulatorie della materia.

2 Lo Spettro del Corpo Nero

Nel 1900, Max Planck derivò la sua famosa formula per la Radiazione di Corpo Nero mediante un'ingegnosa interpolazione tra la formula di Wien

$$u(\nu, T) \,=\, C\,\nu^3\, e^{-\beta\nu/T}\,, \tag{1}$$

che risultava valida per alte frequenze ν, e la formula di Rayleigh-Jeans:

$$u(\nu, T) \,=\, \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\,K\,T\,, \tag{2}$$

(dove K è la costante di Boltzmann, T è la temperatura assoluta e c è la velocità della luce). La formula suggerita da Planck:

$$u(\nu, T) \,=\, \frac{8\pi h}{c^3}\frac{\nu^3}{e^{h\nu/KT}\,-1}\,. \tag{3}$$

risultò essere in perfetto accordo con le misure sperimentali. Il valore ottenuto per la Costante di Planck è : $h \simeq 6.62 \times 10^{-34} Js$.

La formula classica di Rayleigh-Jeans era stata derivata semplicemente calcolando il numero di modi *normali* di oscillazione con frequenza compresa tra ν e $\nu + d\nu$, associando a ciascun modo un'energia media KT, in accordo con la legge classica di equipartizione dell'energia. La formula di Rayleigh-Jeans non poteva comunque in generale essere corretta poiché conduce ad una densità di energia totale (integrata su tutte le frequenze) infinita ! La cosiddetta "catastrofe ultravioletta".

Una deviazione dalle leggi di equipartizione dell'energia non peteva essere del resto totalmente inaspettata. Già nel 1872 ad esempio, nelle misure dei calori specifici dei solidi erano state osservate deviazioni dalla legge classica di Dulong e Petit, basata appunto sulla legge di equipartizione.

Il perfetto accordo della sua formula con i risultati sperimentali indusse Planck a cercare una spiegazione teorica. Egli trovò allora che la formula per lo spettro di corpo nero poteva essere derivata assumendo che l'energia associata con ciascun modo del campo elettromagnetico non potesse variare con continuità, ma dovesse bensì essere sempre un multiplo di un *"quanto"* minimo di energia E, direttamente proporzionale alla frequenza stessa del *modo normale*:

$$\epsilon \,=\, h\nu\,. \tag{4}$$

In questo caso infatti, come dimostreremo, l'energia media associata a ciascun *modo normale* a temperatura T risulta essere data proprio dalla formula di

*ITIS Marconi, Pontedera (PI); email: sranfone@alice.it

Planck (4).

La dimostrazione di questo risultato parte dal considerare il "corpo nero" come un insieme di oscillatori armonici (gli atomi) che emettono onde elettromagnetiche con lunghezze d'onda (e frequenze) che variano con continuità. Cerchiamo quindi il numero dei "treni d'onda" (o "gradi di libertà equivalenti") con lunghezze d'onda comprese tra λ e $\lambda - d\lambda$ (cioè con frequenze comprese tra ν e $\nu + d\nu$). L'energia che compete a ciascun grado di libertà, come è noto dalla Teoria Statistica (e dal Teorema di Equipartizione) è data da:

$$\begin{aligned} &\tfrac{1}{2}KT\,(\text{En. Cinetica}) + \tfrac{1}{2}KT\,(\text{En. Potenziale}) = \\ &\quad = KT \;\; \forall \text{ grado di libertà.} \end{aligned}$$

Supponiamo quindi che la radiazione di lunghezza d'onda λ formi onde stazionarie, essendo rinchiusa fra pareti perfettamente riflettenti separate da una distanza a. Per cui, se consideriamo una "scatola" cubica di lato a, si deve avere:

$$\begin{cases} \alpha\, a \;=\; n_1\, \lambda/2 \\ \beta\, a \;=\; n_2\, \lambda/2 \\ \gamma\, a \;=\; n_3\, \lambda/2 \end{cases} \tag{5}$$

dove $\alpha,\ \beta,\ \gamma$, sono i *coseni direttori* della direzione di propagazione della radiazione ($\alpha^2+\beta^2+\gamma^2 \;=\; 1$), e gli n_i $(i = 1, 2, 3)$ sono numeri interi positivi. Quadrando e sommando le tre equazioni (5) si ottiene quindi:

$$a^2 \;=\; (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2)\; \lambda^2/4\ ,$$

ovvero, essendo $\nu = c/\,\lambda$:

$$\nu \;=\; \sqrt{n_1^2 + n_2^2 + n_3^2}\; \left(\frac{c}{2\,a}\right)\ .$$

Essendo gli n_i numeri interi positivi, questa espressione può essere vista come un'*"ottante"* di sfera di raggio ν nello spazio delle frequenze. Il "volume" di un guscio sferico con frequenza tra ν e $\nu + d\nu$, che è $4\pi\nu^2\, d\nu$, va pertanto diviso per 8. Per ottenere allora il numero totale di vibrazioni indipendenti in un cubo di volume a^3 dobbiamo dividere il volume del guscio stesso per il volume del cubetto elementare nello spazio delle frequenze, che è $(c/2\,a)^3$, ottenendo:

$$\frac{\frac{4\pi\nu^2\, d\nu}{8}}{\left(\frac{c}{2\,a}\right)^3} \;=\; \frac{4\pi\nu^2\, d\nu\, a^3}{c^3}\ .$$

Per unità di volume, si ottiene pertanto:

$$\frac{4\pi\nu^2\, d\nu}{c^3}\ ,$$

ovvero, tenendo conto delle 2 diverse possibilità di polarizzazione della radiazione luminosa:

$$\frac{8\pi\nu^2\, d\nu}{c^3}\ . \tag{6}$$

L'energia totale irraggiata può allora essere ottenuta moltiplicando l'energia media, $\bar{E} = K\,T$, prevista dal Teorema di Equipartizione, per questo numero totale di modi di vibrazione indipendenti, e sommando su tutte le frequenze possibili da 0 a ∞:

$$\begin{aligned} U_e = \textstyle\int_0^\infty\, u(\nu)\, d\nu \;=\; \frac{8\pi}{c^3}\, \int_0^\infty \nu^2\, \bar{E}\, d\nu = \\ = \;\frac{8\pi}{c^3}\, \int_0^\infty \nu^2\, KT\, d\nu \to \infty\ \ ! \end{aligned} \tag{7}$$

Questo fatto è noto come "Catastrofe Ultravioletta", in evidente disaccordo col risultato sperimentale di un'energia irraggiata *finita* proporzionale alla quarta potenza della temperatura:

$$U_e = \sigma\, T^4\,, \tag{8}$$

(legge di Wien-Boltzmann) dove $\sigma \;\simeq\; 5.67 \times 10^{-8}\, W/m^2$ è la cosiddetta Costante di Stefan. In altre parole, le leggi classiche della Termodinamica Statistica e dell'Elettromagnetismo non sono in grado di spiegare il Fenomeno legato alla Radiazione Termica emessa da un corpo Nero. Nel paragrafo 4 vedremo come la Teoria Quantistica di Planck è in grado di risolvere il problema.

3 La legge di Dulong-Petit

Un'altra diretta conseguenza del Teorema di Equipartizione dell'energia, derivato dalla Fisica Statistica Classica, è la legge di Dulong-Petit per il calore specifico dei solidi: considerando i solidi come costituiti da atomi-*oscillatori*, ciascuno dei quali avente 3 gradi di libertà (in corrispondenza alle tre dimensioni dello spazio), si ottiene un'energia *media*:

$$\bar{\mathcal{E}} = \bar{\mathcal{E}}_c + \bar{U} = 3 \cdot \frac{KT}{2} + 3 \cdot \frac{KT}{2} = 3KT\,,$$

per ogni atomo-*oscillatore*, ovvero $\bar{E} = \mathcal{N}_A\, 3KT = 3RT$ per mole, essendo $\mathcal{N}_A \simeq 6.023 \times 10^{23}$ il Numero di Avogadro. Il Calore Specifico (molare) risulta quindi costante e uguale a $C = \frac{\partial \bar{E}}{\partial T} = 3R \simeq 3 \times 1.98$ Kcal/mol K $\simeq 6$ Kcal/mol K, indipendentemente dal solido e dalla sua temperatura, in accordo con la legge empirica verificata in molti casi. Tuttavia era noto che tale legge fallisce completamente quando si considerino solidi *"leggeri"* (cioè, a "basso" numero atomico), come il carbonio, e viene comunque meno in generale a basse temperature, dove risulta che i calori specifici tendono a zero:

$$\lim_{T \to 0} C(T) = 0\,. \tag{9}$$

Anche questo fallimento non può essere spiegato dalla Teoria Classica dell'assorbimento termico, la quale richiede che un corpo possa assorbire calore con continuità, cioè in quantità arbitrariamente piccole. È proprio qui che la Teoria di Planck si allontana dalla Teoria Classica.

4 La Teoria Quantistica dell'Irraggiamento

La soluzione ad entrambi i problemi visti nelle due sezioni precedenti sta proprio nell'assumere che l'energia scambiata o trasmessa attraverso la radiazione possa variare solo *a salti*, in modo *"discreto"* e non "continuo", attraverso *pacchetti* di energia, detti QUANTI. Più in dettaglio, Planck propose le seguenti quattro ipotesi:

- Un corpo nero contiene degli oscillatori armonici semplici che possono vibrare con tutte le frequenze possibili;
- la frequenza irradiata da un oscillatore è uguale alla frequenza meccanica;
- l'emissione della radiazione ha luogo a intervalli discreti, e l'ampiezza rimane costante nei periodi di emissione;
- un oscillatore che emette ad una frequenza ν può irradiare solamente in unità, o QUANTI (di energia) $h\nu \equiv \hbar\omega$, dove h è una costante universale (e $\hbar = h/2\pi$ è la cosiddetta "costante di Planck *ridotta*").

L'ultima *ipotesi* è la più rivoluzionaria; essa suppone infatti che l'energia possa essere irradiata solamente in quantità discrete, o pacchetti, e non in quantità variabili con continuità.

Ma vediamo più da vicino come l'ipotesi dei quanti di Planck risolve il problema della radiazione di Corpo Nero. Come già detto al paragrafo 2, si suppone che questo sia costituito da una gran quantità di oscillatori lineari, detti "atomi", ai quali tuttavia si possono adesso assegnare valori dell'energia di vibrazione solo multipli interi di $h\nu$, cioè: $0,\ h\nu,\ 2h\nu,\ 3h\nu, \ldots$. Siano quindi presenti N_0 oscillatori aventi energia uguale a zero. Dalla Teoria Cinetica dell'equipartizione dell'energia, sappiamo che il numero di oscillatori con energia ϵ è proporzionale al "fattore di Boltzmann":

$$N_0\ e^{-\epsilon/KT}\,,$$

per cui il numero di oscillatori con energia $h\nu,\ 2\,h\nu,\ 3\,h\nu, \ldots, nh\nu, \ldots$ è, rispettivamente, uguale a $N_0\, e^{-x},\ N_0\, e^{-2x}\ ,\ N_0\, e^{-3x}, \ldots,\ N_0\, e^{-nx}, \ldots$, dove si è posto per semplicità: $x = h\nu/KT$. La somma di tutti questi numeri deve ovviamente essere uguale al numero totale di atomi-oscillatori N; abbiamo così:

$$N = N_0 + N_0\, e^{-x} + N_0\, e^{-2x} + \ldots + N_0\, e^{-nx} + \ldots =$$

$$= N_0\,(1 + y + y^2 + \ldots + y^n + \ldots) = \frac{N_0}{1-y} =$$

$$= \frac{N_0}{1 - e^{-x}}\,,$$

(dove si è posto $y = e^{-x} \equiv e^{-h\nu/KT}$). La quantità totale di energia associata agli $N_0 e^{-x}$ *risuonatori*, ciascuno con energia $h\nu$, è quindi $h\nu \cdot N_0 e^{-x}$, quella associata agli $N_0 e^{-2x}$ oscillatori con energia $2h\nu$, è $2h\nu \cdot N_0 e^{-2x}$, e così via; cosicchè, sommando l'energia di tutti i risuonatori presenti aventi frequenza di oscillazione ν si ottiene:

$$E = 0 \cdot N_0 + h\nu \cdot N_0\, e^{-x} + 2h\nu \cdot N_0\, e^{-2x} + \ldots + \\ + nh\nu \cdot N_0\, e^{-nx} + \ldots =$$

$$= h\nu N_0\, e^{-x} \left(1 + 2e^{-x} + 3e^{-2x} + \ldots + ne^{-(n-1)x} + \ldots\right)$$

$$= h\nu N_0 e^{-x}(1 + 2y + 3y^2 + \ldots + ny^{n-1} + \ldots) =$$

$$= \frac{h\nu N_0 e^{-x}}{(1-y)^2} = \frac{h\nu N_0 e^{-x}}{(1-e^{-x})^2}\,,$$

dove si sono usati i seguenti risultati:

$$\sum_{k=0}^{\infty} y^k = \frac{1}{1-y}\,,$$

e, per derivazione membro a membro:

$$\sum_{k=0}^{\infty} k\, y^{k-1} = 1 + 2y + 3y^2 + \ldots + ny^{n-1} + \ldots =$$

$$= \frac{d}{dy}\left(\frac{1}{1-y}\right) = \frac{1}{(1-y)^2}\,.$$

Quindi, essendo: $N = N_0/(1-e^{-x})$, si ottiene la Formula di Planck:

$$E = \frac{h\nu N(1-e^{-x})\, e^{-x}}{(1-e^{-x})^2} = \frac{Nh\nu}{e^x - 1} = \frac{Nh\nu}{e^{h\nu/KT} - 1}\,,$$

da cui deduciamo che l'energia media per ogni atomo-risuonatore di frequenza ν è:

$$\bar{E} = \frac{E}{N} = \frac{h\nu}{e^{h\nu/KT} - 1}\,. \qquad (10)$$

Notare che nel limite in cui la costante di Planck tende a zero, ovvero a temperature "elevate": $KT \gg h\nu$, ritroviamo il risultato *classico*:

$$\lim_{\frac{h\nu}{KT} \to 0} \bar{E} \simeq \frac{h\nu}{1 + \frac{h\nu}{KT} + \ldots - 1} \simeq KT\ !!$$

(dove si è usato lo sviluppo in serie della funzione esponenziale: $e^x \simeq 1 + x + x^2/2! + x^3/3! + \ldots$).

Per ottenere quindi la formula definitiva relativa alla "legge di distribuzione" dell'energia di Planck si deve moltiplicare l'energia media (10) di ogni oscillatore per il numero effettivo di oscillatori con una data frequenza contenuti nell'unità di volume, eq.(6):

$$dE = \frac{8\pi\nu^2}{c^3}\, d\nu \cdot \bar{E} = \frac{8\pi h\nu^3 d\nu}{c^3\,(e^{h\nu/KT} - 1)} = u_\nu\, d\nu\,. \quad (11)$$

Questa volta non si ottiene l'assurdo risultato della "catastrofe ultravioletta", eq.(7), e l'energia totale non diverge, dando un risultato finito, perfettamente in accordo coi dati sperimentali e con la legge di Wien-Boltzmann data nell'eq.(8):

$$E = \tfrac{8\pi h}{c^3} \int_0^\infty \tfrac{\nu^3\, d\nu}{e^{h\nu/KT} - 1} =$$

$$= \tfrac{8\pi (KT)^4}{c^3 h^3} \underbrace{\int_0^\infty \frac{x^3 dx}{e^x - 1}}_{\pi^4/15} = \tfrac{8\pi K^4 T^4}{c^3 h^3} \cdot \tfrac{\pi^4}{15}\,, \qquad (12)$$

ovvero:

$$E = \left(\frac{8\pi^5 K^4}{15\, c^3 h^3}\right) T^4 = \sigma\, T^4\,, \qquad (13)$$

fornendo quindi una spiegazione per il valore osservato della costante di Stefan $\sigma \simeq 5.67 \cdot 10^{-8}\ W/m^2K^4$, esprimibile in termini delle costanti fondamentali della natura (K, c, h).

Si potrebbe anche mostrare come la formula di Planck per la distribuzione dell'energia, eq.(11), spiega anche la "legge di Spostamento" di Wien, secondo la quale il massimo di emissione della radiazione emessa da un Corpo Nero si ha in corrispondenza di una lunghezza d'onda che è inversamente proporzionale alla temperatura assoluta:

$$\lambda_{max}\, T = 0.2898\ \mathrm{K\,cm}\,.$$

5 Teoria dei Quanti e Calore Specifico dei solidi

Altra difficoltà della Fisica Classica, come si è visto nella sezione (3), fu quella relativa al Calore Specifico dei solidi, che secondo la legge di Dulong-Petit sarebbe

dovuto essere indipendente dalla temperatura (oltre che dal particolare solido !) e uguale a $C = 3R \simeq 5.98$ kcal/K mol. In realtà, come già detto, ciò si verifica abbastanza bene solo a temperature piuttosto alte e per solidi "pesanti". Infatti, a temperature molto basse si osserva che i calori specifici tendono a zero, eq.(9), un risultato che è inspiegabile nel contesto della fisica classica. Vediamo quindi come la teoria dei quanti di Planck, anche in questo caso, fornisce una soddisfacente spiegazione.

Supponiamo che il singolo atomo possa oscillare con una frequenza propria ν; allora il quanto di energia è $h\nu$ e l'energia media alla temperatura T è data dall'eq.(10), cosicché l'energia interna molare del cristallo può essere espressa come:

$$U = \frac{3\mathcal{N}_A\, h\nu}{e^{h\nu/KT} - 1}\,,$$

(per i tre gradi di libertà degli $\mathcal{N}_A$ atomi contenuti in una mole). Pertanto il Calore molare è:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V = \frac{3\mathcal{N}_A\, h\nu}{\left(e^{h\nu/KT} - 1\right)^2}\left(e^{h\nu/KT}\,\frac{h\nu}{KT^2}\right) =$$
$$= 3\mathcal{N}_A K\,\frac{\left(\frac{h\nu}{KT}\right)^2 e^{h\nu/KT}}{\left(e^{h\nu/KT} - 1\right)^2}\,. \tag{14}$$

Come ci si dovrebbe aspettare, per alte temperature: $KT \gg h\nu$, (cioè $x = h\nu/KT \ll 1$), ci si riduce alla legge di Dulong-Petit:

$$C_V = 3\mathcal{N}_A K\,\frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \simeq$$
$$= 3R\,\frac{x^2(1 + x + \ldots)}{(1 + x + \ldots - 1)^2} \simeq 3R\,; \tag{15}$$

d'altra parte, a basse temperature $KT \ll h\nu$, (cioè $x = h\nu/KT \gg 1$), si ha:

$$C_V \simeq 3R\,\frac{x^2\, e^x}{e^{2x}} = 3R\, x^2\, e^{-x} \to 0 \;\; !! \tag{16}$$

Questa è la ben nota "Formula di Einstein".

Una più attenta analisi dei dati sperimentali rivelò tuttavia che i calori specifici dei soldi tendono a zero alle basse temperature non esponenzialmente, come previsto dalla (16), ma come T^3 ! Quindi alle bassissime temperature la formula di Einstein risulta non corretta, dando valori di C_V più bassi di quelli osservati. L'errore commesso da Einstein per dedurre l'eq.(16) sta nell'aver considerato una sola frequenza ν, mentre sarebbe stato lecito aspettarsi che un corpo condensato possieda tutto uno spettro di frequenze. In altre parole, nel modello di Einstein si considerano i singoli atomi del solido (cristallo) come se vibrassero "indisturbati" con oscillazioni armoniche, l'uno indipendentemente dall'altro. Ma questa ipotesi non è evidentemente plausibile, a causa delle interazioni tra gli atomi stessi all'interno del reticolo cristallino. Si dovrebbe quindi non parlare di $\mathcal{N}$ atomi del cristallo vibranti con una stessa frequenza, ma piuttosto trattare il sistema *"accoppiato"* di $3\mathcal{N}$ vibrazioni (corrispondenti ai $3\mathcal{N}$ gradi di libertà degli $\mathcal{N}$ atomi per mole), e scrivere quindi l'energia nella forma:

$$U = \sum_{r=1}^{3\mathcal{N}} \frac{h\nu_r}{e^{h\nu_r/KT} - 1}\,,$$

dove ν_r è la frequenza corrispondente a una singola vibrazione. Sarebbe tuttavia piuttosto complicato calcolare questa somma, anche sulla base di qualche modello specifico. Debye riuscì comunque ad ottenere un'espressione approssimata, basandosi sull'osservazione che le vibrazioni proprie dei singoli atomi del reticolo cristallino che vengono effettivamente osservate sono solo quelle caratterizzate da una lunghezza d'onda molto maggiore della tipica distanza inter-atomica. Con ciò Debye riuscì a dare una valutazione approssimata della somma di cui sopra, sostituendo lo spettro delle vibrazioni proprie dei singoli atomi con lo spettro delle vibrazioni elastiche dell'intero cristallo. Il risultato finale fu un'espressione del calore specifico che aveva il corretto comportamento alle bassissime temperature, tendendo a zero come $\sim T^3$ come osservato sperimentalmente, anziché in modo esponenziale come previsto dalla formula di Einstein (16).

6 Stabilità atomica e Modelli Atomici di Thomson e Bohr

Tra tutte le difficoltà incontrate dalle leggi della Fisica Classica, un ruolo particolarmente importante lo ebbero quelle relative all'evidente stabilità della materia stessa. Il modello atomico in voga all'epoca

era il cosiddetto Modello "a *panettone*" (o "plum-cake", per gli inglesi !) dovuto al fisico britannico Thomson. Secondo tale modello l'atomo era essenzialmente costituito da una "pasta" di carica elettrica positiva distribuita uniformemente, disseminata però di un numero opportuno di cariche elettriche negative pressoché puntiformi, gli elettroni, che rendevano l'intero atomo elettricamente neutro. Come previsto dalle leggi dell'elettromagnetismo,essendo questi elettroni soggetti ad un campo elettrico linearmente crescente con la distanza dal centro dell'atomo, si sarebbero dovuti muovere quindi di moto armonico con frequenze calcolabili. Il problema è che a causa della loro accelerazione, gli elettroni avrebbero dovuto irraggiare con continuità onde elettromagnetiche, come previsto dalle eq. di Maxwell; la conseguente perdita di energia, alla fine, li avrebbe quindi fatti cadere sul nucleo stesso, rendendo instabile la materia, contrariamente a quanto viene osservato nella realtà ! Un semplice calcolo farebbe in effetti prevedere un tipico "tempo di decadimento" dell'atomo del'ordine di soli $10^{-10}\,s$! Vediamo i dettagli di questo problema: secondo l'elettrodinamica classica una carica elettrica e soggetta ad una certa accelerazione a irraggia con una potenza pari a:

$$\frac{dE}{dt} = \frac{2e^2}{3c^3}\,|a|^2\,,$$

per cui, essendo l'energia $E = \frac{1}{2}m\omega^2 r^2$ e l'accelerazione $a = \omega^2 r$, si può dedurre che il tipico "tempo di decadimento" atomico sia:

$$\tau = \frac{E}{dE/dt} = \frac{m\omega^2 r^2/2}{\frac{2e^2}{3c^3}(\omega^2 r)^2} = \frac{3}{4}\frac{mc^3}{e^2\omega^2} = \frac{3}{4}\frac{m^2c^3}{K_c e^4}r^3\,,$$

dove si è sfruttata la condizione di equilibrio tra la forza elettrica di Coulomb e quella centrifuga: $m\omega^2 r = K_c e^2/r^2$, ($K_c$ essendo la costante di Coulomb). Sostituendo i valori numerici per la massa dell'elettrone $m \simeq 9\times 10^{-31}kg$, la sua carica elettrica $e = 1.6\times 10^{-19}C$, la velocità della luce $c = 3\times 10^8 m/s$, e il tipico raggio atomico $r \sim 10^{-10}m$, si ottiene il risultato preannunciato di $\tau \sim 10^{-10}s$! Evidentemente, il modello atomico "a panettone"...*fa acqua* da tutte le parti !

Altro serio indizio di quanto fosse sbagliato tale modello arrivò dagli esperimenti effettuati in quegli stessi anni da un altro fisico britannico, Ernest Rutherford, che dette poi il nome al modello atomico che soppiantò quello di Thomson. Rutherford fece incidere un fascio collimato di particelle α (nuclei di elio) su un sottile foglio di oro. Secondo il vecchio modello di Thomson, a causa della repulsione elettrostatica tra queste particelle e la carica positiva distribuita uniformemente all'interno dell'atomo, si sarebbero dovuti osservare solo piccoli angoli di deflessione (angoli tra la direzione del fascio emergente e quella del fascio incidente). Ciò che invece Rutherford osservò è che, occasionalmente, qualche particella α subiva grandi deflessioni, anzi, talvolta arrivava addirittura a tornare *indietro*! Un fatto assolutamente inspiegabile nel contesto del Modello atomico di Thomson. L'unica soluzione a questo dilemma fu di ipotizzare la presenza di un "nucleo" atomico positivo, piccolissimo (dell'ordine di 10^{-5} volte le dimensioni dell'atomo stesso), dove è concentrata la quasi totalità della massa atomica. Il risultato fu appunto il Modello di Rutherford, secondo il quale gli atomi sono pensabili come piccoli *"sistemi planetari"*, col nucleo circondato da elettroni in moto circolare uniforme, proprio come i pianeti attorno al Sole, rivelando un atomo essenzialmente vuoto, le cui dimensioni dipenderebbero quindi dal raggio delle orbite degli elettroni più esterni. Naturalmente però, questo non risolve di per sé il problema della stabilità atomica esposto sopra, visto che anche in questo modello gli elettroni sono accelerati e pertanto dovrebbero irraggiare continuamente, perdendo energia e cadendo quindi sul nucleo con un moto a spirale ! Tra l'altro, con il progressivo ridursi del raggio dell'orbita, varierebbe anche la frequenza stessa del moto, e quindi anche della radiazione emessa, rendendo impossibile la comprensione degli spettri di emissione costituiti da "righe spettrali" corrispondenti a frequenze ben definite, caratteristiche di ciascun elemento chimico. I tentativi di evitare queste difficoltà modificando la natura delle forze agenti nell'atomo o modificando il suo stesso modello risultarono vani. E non sarebbe potuto essere altrimenti, visto che le discrepanze tra teoria e quanto osservato sperimentalmente avevano la loro origine proprio nei principi fondamentali della meccanica atomica stessa. Il problema, pertanto, era quello di trovare nuove leggi meccaniche ed elettromagnetiche che potessero essere applicate a sistemi dinamici di dimensioni atomiche; leggi che costituiscono la cosiddetta "Meccanica Quantistica".

La costruzione di queste nuove teorie avvenne per gradi. La prima tappa fu la teoria di Bohr-Sommerfeld, esposta nel 1913, che pur ammettendo la validità nell'ambito atomico di alcune delle leggi classiche, ne escludeva altre, sostutuendole con opportuni "postulati", introdotti a priori. Questa teo-

ria *provvisoria*, nonostante l'insoddisfazione generata dalla mancanza di rigorose basi formali, ebbe un grande sviluppo negli anni che vanno dal 1913 al 1925, anno, quest'ultimo, che segnò la nascita della moderna "Meccanica Quantistica". Questa si sviluppò secondo due forme diverse ma equivalenti: la "Meccanica Ondulatoria" di Schrödinger e la "Meccanica Matriciale" di Heisenberg. Più avanti ci occuperemo, seppur brevemente, solo della prima.

Vediamo quindi più da vicino in cosa cosiste il semplice modello atomico di Bohr. Sperimentalmente era ben noto, come accennato sopra, che lo spettro dell'idrogeno atomico è costituito da *righe* situate parte nel visibile, parte nell'infrarosso, e parte nell'ultravioletto. Questo spettro è stato il primo a trovare spiegazione attraverso una semplice legge "empirica". Questa ci dice che le frequenze (e quindi i *numeri d'onda* $\tilde{\nu} = \nu/c = 1/\lambda$) corrispondenti alle suddette righe spettrali si possono tutte ottenere dalla formula (di Rydberg):

$$\tilde{\nu} = R_H \left(\frac{1}{n'^2} - \frac{1}{n^2} \right) \tag{17}$$

dove $R_H = 109678\ cm^{-1}$ è la "costante di Rydberg" ed n, n' sono numeri interi arbitari (con $n > n' > 0$). Le righe di questo spettro si raggruppano in *serie*, ciascuna corrispondente ad un certo valore di n'. Le prime sono le seguenti:

$n' = 1\,,\quad n = 2,\, 3,\, 4,\, \ldots$; serie di Lyman (ultravioletto),
$n' = 2\,,\quad n = 3,\, 4,\, 5,\, \ldots$; serie di Balmer (visibile),
$n' = 3\,,\quad n = 4,\, 5,\, 6,\, \ldots$; serie di Paschen (infrarosso),
$n' = 4\,,\quad n = 5,\, 6,\, 7,\, \ldots$; serie di Brackett (infrarosso) .

Dalla (17) risulta anche che al tendere all'infinito di n, ciascuna serie di righe tende ad addensarsi, con un numero d'onda "limite" uguale a R_H/n'^2 .

L'interpretazione teorica di questi risultati, data per la prima volta da Niels Bohr nel 1913, fu il primo passo verso la creazione di quella meccanica atomica adatta a spiegare il modello di atomo "planetario" risultato dall'analisi degli esperimenti di Rutherford.

Ispirandosi alla Teoria dei Quanti di luce di Planck, introdotti come si è visto per spiegare la radiazione di corpo nero, Bohr introdusse i seguenti due postulati:

- per un sistema atomico, e più in generale per un sistema capace di oscillazioni, c'è una serie di livelli energetici E_n, detti "stati stazionari", nei quali il sistema può esistere senza bisogno di irraggiare energia sotto forma di onde elettromagnetiche; l'irraggiamento (o l'assorbimento) è prodotto solo dalla transizione da uno di questi livelli ad un altro energeticamente *più basso* (o *più alto*).
- la frequenza della luce emessa o assorbita durante una transizione è determinata esclusivamente dalla differenza delle energie E_{n_1} ed E_{n_2} che caratterizzano i due livelli:

$$h\,\nu = E_{n_1} - E_{n_2}\,, \tag{18}$$

dove $h = 6.67 \times 10^{-34}\,J\,s$ è la "costante di Planck", della teoria di Planck.

A questi due postulati Bohr aggiunse una "condizione supplementare" e il cosiddetto "principio di corrispondenza":

- Condizione Supplementare: il modulo del momento angolare dell'elettrone nel suo moto attorno al nucleo deve essere un multiplo intero della costante universale $h/2\pi = \hbar$, detta h *"tagliato"*; (questa condizione avrà una semplice interpretazione nel contesto della meccanica ondulatoria, dove, allo scopo di avere "onde stazionarie", le *"onde"* associate all'elettrone devono essere tali che la circonfernza dell'orbita sia uguale ad un numero intero di lunghezze d'onda: $2\pi r_n = n\lambda = nh/mv$).
- Principio di Corrispondenza: la teoria quantistica deve ridursi a dare le stesse predizioni della corrispondente teoria classica nel limite $\hbar \to 0$, limite in cui dovremmo ritrovare le leggi ordinarie della "macrofisica".

Premesso ciò cominciamo a calcolare i raggi delle orbite (circolari) elettroniche per gli atomi idrogenoidi, cioè quelli costituiti da un nucleo di carica Ze circondati da un solo elettrone (gli altri $Z-1$ si presume siano stati precedentemente tolti). L'equilibrio tra la forza centrifuga cui è sottoposto l'elettrone nel suo moto circolare attorno al nucleo e quella attrattiva di Coulomb implica:

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{K_c Z e^2}{r^2}\,. \tag{19}$$

L'energia cinetica dell'elettrone risulta pertanto:

$$T = \frac{1}{2}\, mv^2 = \frac{K_c Z e^2}{2r}\,.$$

Quindi, poiché l'energia potenzale dovuta all'interazione coulombiana è

$$U = -\frac{K_c Z e^2}{r}\,,$$

per l'energia meccanica si ottiene:

$$E = T + U = -\frac{K_c Z e^2}{2r}\,; \tag{20}$$

il valore negativo dell'energia ci conferma semplicemente che si tratta di uno "stato legato", cioè che per *ionizzare* l'atomo, è necessario fornirgli energia.

A questo punto Bohr si distaccò dalla teoria classica applicando la sua "condizione supplementare", affermando cioè che le sole orbite elettroniche permesse sono quelle per le quali il momento angolare è un multiplo intero dell'unità $\hbar$:

$$m\, v\, r_n \;= n\,\hbar\,, \quad (n = 1,\, 2,\, 3, \ldots). \tag{21}$$

Usando questa relazione nella (19) si ottengono quindi i "raggi" delle orbite *permesse*:

$$m^2 v^2 = \frac{K_c m Z e^2}{r_n} = \frac{n^2\hbar^2}{r_n^2} \Rightarrow r_n = \frac{n^2\hbar^2}{K_c m Z e^2}\,. \tag{22}$$

Per l'atomo di idrogeno ($Z = 1$), per esempio, $r_n = n^2 \cdot 0.529 \cdot 10^{-8}$ cm; quindi, per $n = 1$: $r_1 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ cm, che rappresenta il raggio dell'orbita "fondamentale".

Calcoliamoci ora le energie che corrispondono a queste orbite permesse (22), i cosiddetti "livelli energetici" del modello di Bohr. Dalla (20) si ottiene:

$$E_n = -\frac{K_c^2 m Z^2 e^4}{2\hbar^2 n^2} = -\frac{Rhc}{n^2}\, Z^2\,, \quad (n = 1,\, 2,\, 3, \ldots), \tag{23}$$

dove si è posto

$$R = \frac{K_c^2 m e^4}{4\pi\hbar^3 c}\,. \tag{24}$$

Il risultato fondamentale di quanto si è visto è il fatto che la meccanica atomica di Bohr, a differenza della ordinaria meccanica classica (newtoniana), concede all'atomo soltanto determinati valori dell'energia: $E_1,\, E_2,\, \ldots, E_n,\, \ldots,$ detti *"livelli energetici"*. Quando l'elettrone dell'atomo (di idrogeno) passa dall'orbita quantica n-esima di energia E_n all'orbita n' di energia $E_{n'}$, l'atomo, come previsto dal secondo postulato di Bohr, emette (se $n > n'$) o assorbe (se $n' > n$) un "quanto di luce" (o *fotone*) di frequenza $\nu_{nn'}$ data dalla (18), ovvero:

$$\nu_{nn'} = \frac{|E_n - E_{n'}|}{h} = Rc\left|\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2}\right|\,,$$

che è esattamente quanto previsto dalla fomula (17). Sostituendo i valori numerici delle costanti fondamentali, si ottiene per R il valore:

$$R = 109761\ cm^{-1}\,,$$

in buon accordo col valore sperimentale della Costante di Rydberg R_H dato in precedenza.

Tale successo rese alla teoria di Bohr (e alla teoria dei quanti in generale) quel riconoscimento universale che si andò attenuando soltanto con gli sviluppi successivi e definitivi della Meccanica Quantistica. Da un punto di vista sperimentale la conferma definitiva dell'esistenza degli stati quantici di un atomo, ovvero dei suoi "livelli energetici" venne con gli esperimenti di Franck ed Hertz (1913). Essi studiarono l'eccitazione degli atomi di un gas causata da urti con elettroni di energia e velocità note. Osservando le conseguenti energie perse dagli elettroni, energie evidentemente assorbite dagli atomi stessi durante l'urto, si accorsero che queste variavano in modo "discreto", e che coincidevano proprio con le energie di eccitazione atomica già note dalla spettroscopia.

7 L'Effetto Fotoelettrico

L'effetto fotoelettrico, scoperto per caso da Hertz nel 1887, consiste nell'emissione di elettroni da parte di alcuni metalli e anche di qualche gas, quando questi sono investiti da una radiazione di frequenza sufficientemente elevata, tipicamente raggi UV, X o γ. Le leggi principali dell'effetto sono le seguenti:

- L'effetto stesso (e quindi l'emissione dei cosiddetti "foto-elettroni" si ha soltanto se la frequenza della radiazione incidente è maggiore di un valore ben definito, detta "frequenza di soglia" ν_0, dipendente solo dalla natura del corpo "illuminato";

- i foto-elettroni emessi hanno velocità che variano da zero ad un certo valore massimo v_m, corrispondente ad una energia cinetica ($\frac{1}{2}m{v_m}^2$) che è linearmente crescente con la frequenza stessa della radiazione incidente:

$$E_c(max) \equiv \frac{1}{2}m{v_m}^2 = h(\nu - \nu_0)\,,$$

  ("Legge di Einstein"), dove h è una costante uguale per tutti i corpi, che risulta essere proprio la "costante di Planck";

- la densità della corrente foto-elettronica, ovvero il numero di elettroni emessi al secondo per unità di superficie, è direttamente proporzionale all'intensità dell'illuminamento (a parità di frequenza); intensità che peraltro non influenza affatto la loro velocità.

Le leggi classiche dell'elettromagnetismo danno tuttavia un'interpretazione dell'effetto fotoelettrico che è in contrasto con quanto osservato sperimentalmente. In particolare, interpretando i fotoelettroni come elettroni estratti dagli atomi in conseguenza delle oscillazioni indotte dai campi elettrici della radiazione incidente, essi dovrebbero avere velocità (e quindi energie cinetiche) crescenti con l'intensità di quest'ultima (a parità di frequenza), contrariamente a quanto viene osservato. Come è ben noto la spiegazione fu trovata da Einstein nel 1905, lo stesso anno in cui propose la Teoria della Relatività Ristretta, osservando che la "costante" h caratteristica dell'effetto fotoelettrico coincideva proprio (entro l'errore sperimentale) con quella introdotta da Planck per spiegare la radiazione emessa da un corpo nero. In particolare, egli ipotizzò non solo che l'energia della radiazione fosse emessa in "quanti" discreti di energia $h\nu$, ma che si propagasse proprio in "corpuscoli", da lui definiti appunto "quanti di luce" e oggi noti come *"fotoni"*. Questi urterebbero anelasticamente con gli elettroni atomici, causandone l'estrazione e spiegando quindi la *fotoemissione* osservata, proprio come se fossero "particelle materiali" a tutti gli effetti. Ciò rivelò pertanto il ben noto *"dualismo"* ondulatorio-corpuscolare della luce! Dualismo che costituisce proprio uno dei principi fondanti della Nuova Meccanica (detta "Quantistica") e che risulta vero anche se considerato in senso inverso, visto che anche le cosiddette "particelle materiali", come gli elettroni, i protoni, etc., riflettono questo comportamento *"ibrido"*, interagendo a volte come "corpuscoli" e altre come "onde".

8 L'Effetto Compton

Per certi aspetti, simile a quello fotoelettrico è l'effetto Compton. Questo fenomeno, scoperto nel 1923 dall'omonimo scienziato inglese, costituisce ancora un esempio di effetto che può essere interpretato correttamente grazie all'ipotesi dei quanti di luce. Questa volta si tratta della diffusione di raggi-X e γ da parte di gas o liquidi. Ciò che si osserva è la variazione della lunghezza d'onda della radiazione diffusa rispetto a quella della radiazione incidente, secondo una legge quantitativa ben definita; legge che come vedremo, può essere dedotta e spiegata interpretando il fenomeno in termini di urti "elastici" tra i *fotoni* incidenti e gli elettroni atomici, assunti inizialmente in quiete. Questa volta il fotone non "scompare", ma viene diffuso ad un certo angolo θ rispetto alla direzione incidente (l'elettrone viene invece *"scatterato"* ad un altro angolo ϕ).

Vediamo come dedurre la legge dell'effetto Compton applicando gli usuali principi di conservazione della quantità di moto e dell'energia, esattamente come in un ordinario urto elastico tra corpuscoli. Assumendo una quantità di moto per il fotone pari a $p = E/c = h\nu/c = h/\lambda$, e utilizzando le formule relativistiche per l'energia e l'impulso dell'elettrone, possiamo scrivere il seguente sistema di equazioni:

$$\begin{cases} \frac{h\nu}{c} = \frac{h\nu'}{c}\cos\theta + \frac{mv}{\sqrt{1-\beta^2}}\cos\phi\,, \\ 0 = \frac{h\nu'}{c}\sin\theta - \frac{mv}{\sqrt{1-\beta^2}}\sin\phi\,, \\ h\nu + mc^2 = h\nu' + \frac{mc^2}{\sqrt{1-\beta^2}}\,. \end{cases} \tag{25}$$

Quadrando e sommando le prime due equazioni si ha:

$$\left(\frac{mv}{\sqrt{1-\beta^2}}\right)^2 = \left(\frac{h}{c}\right)^2 \left[(\nu - \nu'\cos\theta)^2 + (\nu'\sin\theta)^2\right]\,,$$

da cui:

$$\frac{m^2v^2c^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} = h^2\left(\nu^2+\nu'^2-2\nu\,\nu'\cos\theta\right)\,,$$

mentre dalla terza delle eq.(25) si ha:

$$\frac{m^2c^4}{1-\frac{v^2}{c^2}} = \left[h(\nu-\nu')+mc^2\,\right]^2 =$$

$$= h^2(\nu^2+\nu'^2-2\nu\nu')+m^2c^4+2mc^2h(\nu-\nu')\,. \tag{26}$$

Sottraendo quindi queste ultime due equazioni otteniamo, con un po' di algebra:

$$\frac{m^2c^4}{1-\frac{v^2}{c^2}} - \frac{m^2v^2c^2}{1-\frac{v^2}{c^2}} = m^2c^4 =$$

$$= h^2\left[-2\nu\nu'(1-\cos\theta)\,\right]+m^2c^4+2mc^2h(\nu-\nu') \tag{27}$$

ovvero:

$$h\nu\nu'(1-\cos\theta) = mc^2(\nu-\nu')\,,$$

ed in definitiva, essendo $\lambda = c/\nu$ e $\lambda' = c/\nu'$, le lunghezze d'onda del fotone incidente e di quello diffuso :

$$\Delta\lambda \equiv \lambda'-\lambda = \frac{h}{mc}\,(1-\cos\theta)\,. \tag{28}$$

La costante $\lambda_0 = h/(mc) = 0.02426$ Å è detta "lunghezza d'onda Compton". Notare che la massima variazione di lunghezza d'onda ($= 2h/mc$) si ha per i fotoni che tornano esattamente indietro ($\theta = \pi$). La formula (28) risulta essere in perfetto accordo coi risultati sperimentali, fornendo quindi un'ulteriore conferma della correttezza dell'ipotesi dei "quanti di luce" di Planck-Einstein.

9 Onde di de Broglie ed equazione di Schrödinger

Come abbiamo visto, le difficoltà connesse con la radiazione di corpo nero, il calore specifico dei solidi, gli effetti fotoelettrico e Compton e le righe spettrali degli atomi, portarono all'ipotesi dei "quanti" di luce. Secondo questa idea rivoluzionaria la luce, solitamente vista sotto forma di *onde* elettromagnetiche, si comporta talvolta come costituita da "corpuscoli": i cosiddetti *fotoni*, particelle che seppur con massa nulla, sono caratterizzati sia da un'energia $E = h\nu$ che da una quantità di moto $p = h\nu/c = h/\lambda \equiv E/c$, proprio come le usuali "particelle materiali".

Ancora più sorprendente fu l'osservazione della *diffrazione*, fenomeno tipicamente di carattere "ondulatorio", ottenuta facendo incidere su un cristallo un fascio di elettroni. Questa serie di esperimenti, effettuati da Davisson e Germer negli anni '20, rivelò che anche la cosiddetta materia si comporta talvolta come un'onda ! ...proprio come talvolta la luce si comporta come un corpuscolo. In altre parole, nel mondo microscopico tipico della fisica atomica e subatomica, non ha più senso parlare di "corpuscoli" e "onde" separatamente, ma, utilizzando uno sfortunato termine usato raramente, di *"particonde"*. Pertanto, così come si associa una quantità di moto ad un fotone, così dobbiamo associare un'*onda* ad un elettrone. In particolare, assumendo la stessa relazione tra la lunghezza d'onda e la quantità di moto (spesso detto "impulso") valida per i fotoni, il fisico francese Louis de Broglie ipotizzò quindi che ad ogni particella di massa m e velocità v corrispondesse un'onda di lunghezza d'onda:

$$\lambda = \frac{h}{p} \equiv \frac{h}{mv}\,; \tag{29}$$

fu l'inizio della cosiddetta "Meccanica Ondulatoria", i cui principali artefici furono proprio lo stesso de Broglie, insieme a Schroedinger, Born e Dirac.

In effetti, la vecchia teoria quantistica basata sui quanti di Planck e sui modelli atomici di Bohr-Rutherford era sempre stata ritenuta *provvisoria*, per la sua incongruenza logica, la sua incompletezza, per non dire della sua incapacità a spiegare fenomeni come l'effetto Zeeman e i momenti magnetici atomici. In realtà la nuova teoria, detta Meccanica Quantistica, nacque quasi simultaneamente sotto due forme distinte, la "meccanica ondulatoria" di cui ci occuperemo nel presente paragrafo, e la "Meccanica delle Matrici" sviluppata da Heisenberg e Jordan.

Ma prima di addentrarsi nei dettagli della meccanica ondulatoria vale la pena di sottolineare una delle principali conseguenze del suddetto dualismo ondulatorio-corpuscolare. Poiché in generale non è possibile localizzare un'onda, diciamo con un'incertezza inferiore alla sua lunghezza d'onda, la relazione di de Broglie può essere considerata equivalente al ben noto "Prin-

cipio di Indeterminazione" di Heisenberg, che, nella sua versione classica, afferma che il prodotto delle incertezze associate alla posizione spaziale e all'impulso di una qualsiasi particella non può mai essere inferiore alla costante di Planck; più esattamente, si può dimostrare che deve valere la seguente relazione tra le due incertezze:

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \,. \tag{30}$$

Questo "principio" ha conseguenze importanti, non solo "fisiche", ma anche "filosofiche", perché distrugge uno dei pilastri della fisica classica newtoniana: il "determinismo", cioè l'idea che, almeno in linea di principio, sia sempre possibile *misurare* e quindi conoscere simultaneamente e con assoluta certezza sia la posizione x che la relativa componente della quantità di moto $p_x = mv_x$ di una particella. A prima vista, si potrebbe pensare che ciò rifletta soltanto l'inadeguatezza dei nostri apparati strumentali, ma non è così. Secondo la corrente interpretazione delle leggi quanto-meccaniche, l'incertezza, o meglio l'indeterminazione, di queste grandezze fisiche (dette "coniugate") è una caratteristica intrinseca dei sistemi microscopici e non può essere eliminata o evitata perfezionando le nostre apparecchiature sperimentali.

Vediamo come possiamo ottenere in modo piuttosto informale l'equazione del moto di una particella secondo le leggi della meccanica quantistica. Come abbiamo visto nei precedenti paragrafi, i fotoni possono essere considerati gli "atomi" del campo elettromagnetico. Le equazioni fondamentali che descrivono questo campo sono le ben note equazioni di Maxwell. In assenza di cariche e correnti elettriche, cioè nel vuoto, queste equazioni implicano che sia il campo elettrico che quello magnetico soddisfino l'equazione caratteristica delle onde, l'eq. di D'Alembert:

$$\nabla^2 \vec{E} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0 \,,$$

dove $c = 1/\sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \simeq 3{\cdot}10^8$ m/s è la velocità della luce. La sua soluzione generale scritta in forma complessa è:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0\, e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \,,$$

dove $\vec{k}$ è il vettore d'onda, diretto nella direzione di propagazione e avente modulo $|\vec{k}| = k = 2\pi/\lambda$, e $\omega = 2\pi\nu$ ne è la pulsazione. Usando per l'energia e la quantità di moto del fotone le espressioni dedotte in precedenza: $\mathcal{E} = h\nu \equiv \hbar\omega$ e $\vec{p} = \hat{k}\mathcal{E}/c = \hat{k}h/\lambda = \vec{k}\,\hbar$, questa soluzione assume la forma:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{E}_0\, e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\mathcal{E}t)/\hbar} \,. \tag{31}$$

Seguendo de Broglie, supporremo che anche ad ogni particella di impulso $p = mv$ sia associata un'onda (come quella del fotone) di lunghezza $\lambda = h/mv = h/p$; onda di cui successivamente proveremo a dare un'interpretazione fisica. Detta ψ tale *"funzione d'onda"*, per una particella *libera* (cioè non soggetta a forze esterne) questa dovrà pertanto assumere la stessa forma dell'eq.(31):

$$\psi(\vec{r},t) = A\, e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\mathcal{E}t)/\hbar} \,. \tag{32}$$

Da questa soluzione, per derivazione rispetto alle coordinate spaziali e al tempo, troviamo che:

$$\vec{\nabla}\psi = i\frac{\vec{p}}{\hbar}\,\psi \;\Rightarrow\; \vec{p}\psi = -i\hbar\,\vec{\nabla}\psi \,, \tag{33}$$

come pure:

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = -i\frac{\mathcal{E}}{\hbar}\,\psi \;\Rightarrow\; \mathcal{E}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \,; \tag{34}$$

in altre parole, la *"moltiplicazione"* da sinistra dell'impulso $\vec{p}$ e dell'energia $\mathcal{E}$ sulla funzione d'onda ψ, è equivalente all'applicazione dei rispettivi "operatori derivata":

$$\vec{p} \to -i\hbar\,\vec{\nabla} \,, \tag{35}$$

$$\mathcal{E} \to i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t} \,. \tag{36}$$

A questo punto, usando la familiare relazione tra l'energia meccanica $\mathcal{E}$, la quantità di moto $\vec{p}$ e l'energia potenziale U di una particella (non relativistica): $\mathcal{E} = p^2/2m + U$, con le sostituzioni (35) e (36), si ottiene:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi + U\,\psi = \mathcal{E}\,\psi \,, \tag{37}$$

ovvero:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\,(\mathcal{E} - U)\,\psi = 0\,. \tag{38}$$

Queste sono le due forme più note dell'equazione di Schrödinger, detta *degli stati stazionari*, poiché non vi compare il tempo. Per ottenere quindi l'equazione completa, dipendente dal tempo, è sufficiente effettuare la sostituzione come in eq.(36):

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\nabla^2\psi + U\,\psi = i\hbar\,\frac{\partial\psi}{\partial t}\,. \tag{39}$$

Queste equazioni descrivono completamente il comportamento quanto-meccanico della particella, esattamente come fanno le equazioni di Newton nella meccanica *classica*.

Ma se nel caso del fotone il significato di "funzione d'onda" può essere compreso in termini di "vettore campo elettrico" o "magnetico" (in realtà del "4-vettore potenziale" A^μ), nel caso di una qualsiasi altra particella elementare, come l'elettrone o il protone, qual'è il significato fisico della sua funzione d'onda ? Come dimostreremo più avanti, e seguendo l'interpretazione dovuta al fisico Max Born, il "modulo quadro" $|\psi(\vec{r},t)|^2$ rappresenta la *"Densità di Probabilità"*, nel senso che:

$$|\psi(\vec{r},t)|^2\,dV \;\equiv \psi^*(\vec{r},t)\,\psi(\vec{r},t)\,dV\,, \tag{40}$$

è la "probabilità" che la particella sia nel volumetto dV (individuato dai raggi vettori $\vec{r}$ e $\vec{r}+d\vec{r}$) all'istante t. Questo significa, evidentemente, che la funzione d'onda stessa deve soddisfare la cosiddetta "condizione di normalizzazione", che ci assicura la certezza della presenza della particella su tutto lo spazio:

$$P_{\text{tot}} = \int_{V_\infty} |\psi(\vec{r},t)|^2\,dV \;= 1\,. \tag{41}$$

Cerchiamo di capire perché la quantità $|\psi(\vec{r},t)|^2$ è interpretabile come una "densità". Cominciamo col moltiplicare l'eq. di Schrödinger dipendente dal tempo, eq.(39), per la funzione d'onda complessa coniugata ψ^* e, analogamente, moltiplichiamo l'eq. complessa coniugata della (39) per ψ:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi^*\,\nabla^2\psi + U\,\psi^*\,\psi \quad = i\hbar\,\psi^*\,\tfrac{\partial\psi}{\partial t}\,, \tag{42}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\psi\,\nabla^2\psi^* + U\,\psi^*\,\psi \quad = -i\hbar\,\psi\,\tfrac{\partial\psi^*}{\partial t}\,; \tag{43}$$

facendo la differenza membro a membro di queste due equazioni si arriva a:

$$i\hbar\,\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) + \vec{\nabla}\cdot\left[\frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\,\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right)\right] = 0\,, \tag{44}$$

dove si è usata l'identità:

$$(\psi\,\nabla^2\psi^* - \psi^*\,\nabla^2\psi) = \vec{\nabla}\cdot(\psi\,\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi)\,.$$

L'eq.(44) è identica alla ben nota "equazione di continuità" dell'elettromagnetismo o della fluidodinamica:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0\;; \tag{45}$$

nel primo caso, per esempio, ρ è la densità volumica di carica elettrica e $\vec{J} = \rho\vec{v}$ è la "densità superficiale di corrente". L'eq.(45) non è altro che la diretta conseguenza della "Legge di Conservazione della Carica Elettrica":

$$Q = \int_{V_\infty} \rho\,dV = \text{costante}\,. \tag{46}$$

L'analogia tra la (44) e la (45) ci porta ad identificare $\rho = |\psi|^2 = \psi^*\psi$ con una *densità*, in particolare con la *"densità di probabilità"* di trovare la particella nell'elemento di volume unitario attorno al punto dello spazio considerato; allo stesso modo

$$\vec{J} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\psi\,\vec{\nabla}\psi^* - \psi^*\vec{\nabla}\psi\right) \tag{47}$$

va identificata con la corrispondente "densità di corrente".

La quantità conservata associata all'eq.(44) è allora la "Probabilità totale" di trovare la particella in tutto lo spazio, che deve essere evidentemente uguale a 1,

(come richiesto dall' eq.(41)), rappresentandone la *certezza*.

La correttezza della nostra interpretazione per la densità di corrente $\vec{J}$ può essere suggerita studiando la funzione d'onda di una particella libera. In questo caso l'eq. di Schrödinger degli stati stazionari, eq.(38), che si scrive:

$$\nabla^2\psi + \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}\,\psi = 0\,,$$

ha la seguente soluzione:

$$\psi(\vec{r}) = A\,e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}\,,$$

dove A è una costante ottenibile con la condizione di normalizzazione (41) e $\vec{p} = m\vec{v}$ è la quantità di moto della particella. Sostituendo questa espressione nell'eq.(47, ed essendo $\rho = |\psi|^2 \equiv |A|^2$ la "densità di probabilità"), si ottiene:

$$\begin{aligned}\vec{J} &= \tfrac{i\hbar}{2m}\,|A|^2\left(e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}\vec{\nabla}e^{-i(\vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar} - e^{-i(\vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}\vec{\nabla}e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r})/\hbar}\right)\\ &= \tfrac{i\hbar}{2m}\,|A|^2\left(-\tfrac{2i\vec{p}}{\hbar}\right) = |A|^2\,\tfrac{\vec{p}}{m} \equiv \rho\vec{v}\,,\end{aligned} \tag{48}$$

confermando per $\vec{J}$ l'interpretazione di "densità di corrente" associata alla particella.

10 Applicazioni dell'equazione di Schrödinger

In questo paragrafo daremo qualche semplice esempio di applicazione dell'equazione di Schrödinger, derivando anche una formula (approssimata) per il "coefficiente di trasmissione" di una particella soggetta ad una generica "barriera di potenziale".

10.1 Particella in orbita circolare

Come prima applicazione consideriamoi una particella in moto uniforme su una traiettoria circolare di raggio r. In questo caso possiamo risolvere l'eq. di Schrödinger unidimensionale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\partial^2\Psi(x,t)}{\partial x^2} = i\hbar\,\frac{\partial\Psi(x,t)}{\partial t} = \mathcal{E}\,\Psi(x,t) \tag{49}$$

col metodo della *separazione delle variabili*, ponendo:

$$\Psi(x,t) = \psi(x)\phi(t)\,;$$

in tal caso l'eq.(49) diventa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\phi(t)\frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} = i\hbar\,\psi(x)\frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = \mathcal{E}\,\psi(x)\phi(t)\,, \tag{50}$$

ovvero, dividendo per $\Psi(x,t) = \phi(t)\psi(x)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\,\frac{\psi''}{\psi} = i\hbar\,\frac{\dot{\phi}}{\phi} = \mathcal{E}\,. \tag{51}$$

Queste sono due semplici eq. differenziali lineari, le cui soluzioni possono essere scritte in forma esponenziale complessa come segue:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= C_1\,e^{ipx/\hbar}\,,\\ \phi(t) &= C_2\,e^{-i\mathcal{E}t/\hbar}\,,\end{aligned} \tag{52}$$

dove $p = \sqrt{2m\mathcal{E}}/\hbar$ è l'impulso della particella sull'orbita circolare; pertanto, in definitiva, la funzione d'onda *completa* è:

$$\Psi(x,t) = A\,e^{i(px-\mathcal{E}t)/\hbar}\,, \tag{53}$$

dove $A = C_1C_2$ è una costante d'integrazione. A questa soluzione va evidentemente imposta la condizione di *"periodicità"* sulla circonferenza (di raggio r): $\Psi(x+2\pi r,t) = \Psi(x,t)$, cioè:

$$A\,e^{i[p(x+2\pi r)-\mathcal{E}t]/\hbar} = A\,e^{i(px-\mathcal{E}t)/\hbar}\,;$$

questa identità implica: $e^{i(p2\pi r)/\hbar} = 1$, da cui otteniamo la "quantizzazione" del momento angolare $L_n = mv_nr$ della particella:

$$\begin{aligned}\frac{2\pi rp}{\hbar} = 2\pi n \quad\Rightarrow\quad p_n = mv_n = n\frac{\hbar}{r} \quad\Rightarrow\\ L_n = mv_nr = n\hbar\,,\end{aligned} \tag{54}$$

dove n è un numero intero positivo, detto "numero quantico". Di conseguenza, anche l'energia risulta quantizzata, essendo data dai seguenti "livelli discreti":

$$\mathcal{E} = \frac{{p_n}^2}{2m} = n^2 \frac{\hbar^2}{2mr^2}\,;$$

uno *spettro* di energie simile a quello ottenuto nel caso dell'atomo di Bohr, eq.(23). Ciò non deve sorprenderci, visto che la condizione (54) ora ottenuta è identica a quella proposta da Bohr, eq.(21).

10.2 Particella in una buca di potenziale infinita

In questo paragrafo si vuole studiare il problema (unidimensionale) di una particella vincolata a stare in un intervallo dell'asse x di ampiezza assegnata a, diciamo $x \in [0, a]$. Ciò è equivalente a dire che la particella è soggetta ad una forza di potenziale:

$$U(x) = \begin{cases} 0\,, & \text{per } 0 \le x \le a\,, \\ \infty\,, & \text{per } x < 0 \cup x > a\,. \end{cases} \tag{55}$$

In particolare, vediamo che all'interno della buca di potenziale infinita deve valere l'eq. di Schrödinger per la particella libera:

$$\psi'' + \frac{2m\mathcal{E}}{\hbar^2}\,\psi = 0\,, \tag{56}$$

con le *condizioni al contorno* fisiche: $\psi(x = 0) = \psi(x = a) = 0$, che ci assicurano l'annullamento della funzione d'onda agli estremi dell'intervallo, dove $U \to \infty$. In questo caso la soluzione che si ottiene, scritta in forma *reale*, è la seguente:

$$\psi(x) = A\sin(kx) + B\cos(kx)\,,$$

dove $k = \sqrt{2m\mathcal{E}}/\hbar$; la condizione $\psi(x = 0) = 0$ implica $B = 0$, mentre l'altra condizione porta a:

$$\psi(x = a) = A\sin(ka) = 0 \;\;\Rightarrow\;\; k_n a = n\pi\,,$$

da cui possiamo dedurre i seguenti *"livelli discreti di energia"*:

$$E_n = n^2\,\frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}\,, \quad (n = 1,\, 2,\, 3,\, \ldots)\,. \tag{57}$$

Ad ogni valore definito dell'energia, detto *"autovalore"*, E_n, corrisponde una ben determinata funzione d'onda:

$$\psi(x) = A\,\sin\left(\frac{n\pi x}{a}\right)\,, \tag{58}$$

dove la costante A va determinata dalla condizione di normalizzazione (41):

$$\int_0^a \psi^2 dx = \int_0^a \sin^2\left(\frac{n\pi x}{a}\right) dx = 1\,,$$

da cui si ottiene: $A = \sqrt{2/a}$.

10.3 Particella in una scatola tridimensionale

La generalizzazione al caso tridimensionale di una particella vincolata a muoversi all'interno di una scatola a pareti rigide di dimensioni (a, b, c) è immediata. La corrispondente equazione di Schrödinger può essere ridotta a tre equazioni "unidimensionali" indipendenti e identiche all'eq.(56) col metodo della separazione delle variabili. Questo ci permette di generalizzare facilmente i risultati ottenuti nel paragrafo precedente. I livelli di energia, adesso parametrizzati da *tre* numeri quantici, uno per ogni direzione spaziale, sono dati da:

$$E_{n_x,n_y,n_z} = \frac{\hbar^2\pi^2}{2m}\left[\left(\frac{n_x}{a}\right)^2 + \left(\frac{n_y}{b}\right)^2 + \left(\frac{n_z}{c}\right)^2\right]\,, \tag{59}$$

a cui corrispondono le seguenti funzioni d'onda (normalizzate):

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{abc}}\,\sin\left(\frac{n_x\pi x}{a}\right)\,\sin\left(\frac{n_y\pi y}{b}\right)\,\sin\left(\frac{n_z\pi z}{c}\right)\,. \tag{60}$$

Poiché ciascuno *stato* è univocamente caratterizzato dall'insieme dei suoi "numeri quantici", conviene spesso rappresentarlo col simbolo $|n_1,\, n_2,\, \ldots >$ (detto "ket").

Talvolta può accadere che un certo numero di *"stati"* distinti, cioè stati caratterizzati da *"set"* diversi di numeri quantici, possano avere la stessa energia; in tal caso diremo che tale livello energetico è *"degenere"*, ed il "grado di degenerazione" è proprio il numero di questi stati. Viene detto livello "fondamentale" quello caratterizzato dall'energia più bassa. Questo livello è sempre *non-degenere*. Per fare un esempio,

per una scatola *cubica* di lato a, il livello fondamentale ha un'energia:

$$E_{(0)} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{2ma^2}\,,$$

e corrisponde al solo stato $|1,1,1>$, mentre il *"primo livello eccitato"*, di energia

$$E_{(1)} = \frac{3\hbar^2\pi^2}{ma^2}\,,$$

è triplamente degenere, corrispondendo ai tre stati $|2,1,1>$, $|1,2,1>$ e $|1,1,2>$.

Per concludere, ricordiamo che se vogliamo inserire un certo numero di elettroni (in generale qualsiasi particella a *spin* semi-intero) nella nostra "scatola tridimensionale", dobbiamo rispettare il cosiddetto "Principio di esclusione" di Pauli, secondo il quale non possono esserci più di due particelle aventi lo stesso *set* di numeri quantici (in modo da poterle poi distinguere grazie al loro opposto spin $\pm\hbar/2$.

10.4 Barriera di potenziale ed Effetto Tunnel

In questo paragrafo affronteremo il problema di studiare il moto di una particella attraverso una barriera di potenziale. Secondo la fisica classica di Newton, naturalmente, non ci possono essere dubbi. Se la particella ha un'energia superiore alla massima altezza della barriera, essa attraverserà certamente la barriera stessa, mentre in caso contrario sarà sempre respinta, tornando da dove è venuta. Vedremo invece che le leggi della Meccanica Quantistica prevedono una probabilità non nulla, sia di essere "riflessa" nel primo caso, che di essere "trasmessa" nel secondo. In particolare quest'ultima possibilità, detta "Effetto Tunnel", può spiegare per esempio il fenomeno legato al decadimento radioattivo in cui una particella α riesce ad attraversare la barriera di potenziale del nucleo *"genitore"*.

Consideriamo quindi una particella di massa m in moto sull'asse x, proveniente da $x \to -\infty$, con una energia ed un impulso ben definiti $E = p^2/2m \equiv k^2\hbar^2/2m$. La barriera di potenziale, supposta per semplicità rettangolare, sia definita dalla:

$$U(x) = \begin{cases} 0\,, & \text{per } x \le 0 \cup x \ge a\,, \\ U_0\,, & \text{per } 0 < x < a\,. \end{cases} \tag{61}$$

Poiché siamo interessati all'effetto tunnel, ci limiteremo a studiare il caso in cui l'energia della particella è inferiore all'altezza della barriera: $E < U_0$. In questo caso, l'eq. di Schrödinger valida a destra e a sinistra della barriera è quella della particella libera ($U = 0$). Le soluzioni sono pertanto date dalle usuali espressioni oscillatorie; in particolare, a sinistra della barriera la funzione d'onda sarà esprimibile come la sovrapposizione di un'onda *"progressiva"* di ampiezza unitaria (corrispondente alla particella incidente in moto verso destra) e di un'onda *"regressiva"* (corrispondente alla particella *riflessa*, in moto verso $\to -x$:

$$\psi_1(x) = e^{ikx} + Ae^{-ikx}\,, \qquad \text{per } x < 0\,.$$

D'altra parte, l'eq. di Schrödinger valida nella regione della barriera (per $0 < x < a$) è:

$$\psi_2{}'' - \frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}\,\psi_2 = 0\,,$$

la cui soluzione contiene solo un'esponenziale *reale smorzato*:

$$\psi_2(x) = B\,e^{-qx}\,, \qquad \text{per } 0 < x < a\,,$$

dove si è posto: $q = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar$; (la soluzione esponenzialmente crescente è esclusa perché fisicamente inaccettabile!). L'ampiezza di probabilità di attraversare la barriera sarà proporzionale al rapporto tra la funzione d'onda calcolata alla fine della barriera e quella calcolata al suo inizio:

$$\frac{\psi_2(a)}{\psi_2(0)} \simeq e^{-qa}\,.$$

Quindi possiamo concludere che la "probabilità" di attraversamento, detta più propriamente "coefficiente di *Trasmissione*", è data da:

$$T = \left|\frac{\psi_2(a)}{\psi_2(0)}\right|^2 \sim e^{-2aq} = e^{-2a\sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar}\,. \tag{62}$$

Consideriamo ora una barriera generica, descritta da una qualche funzione continua $U(x)$. Questa può essere, in prima approssimazione, pensata come formata

da tante barriere rettangolari, di altezza $U_i \equiv U(x_i)$ e di larghezza $a_i = dx_i$, a ciascuna delle quali corrisponderà un certo coefficiente di trasmissione T_i , dato da un espressione del tipo (62); il coefficiente di trasmissione "globale" (essendo una probabilità!) sarà dato dal loro prodotto:

$$T = \prod_i T_i \Rightarrow$$

$$\ln T = \sum_i \ln T_i = \sum_i -\frac{2}{\hbar}\sqrt{2m(U(x_i) - E)}\, dx_i \,.$$

Da questa espressione otteniamo quindi la formula generale (ma approssimata !) per il coefficiente di trasmissione da una qualsiasi barriera di potenziale $U(x)$:

$$T = \exp\left(-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2} \sqrt{2m(U(x) - E)}\, dx\right) , \qquad (63)$$

dove x_1 e x_2 sono i cosiddetti "punti di inversione" *classici*, ovvero i punti in cui l'energia della particella è uguale all'energia potenziale: $U(x_{1(2)}) = E$.

11 Conclusioni

Questi *Appunti* sono originariamente stati scritti con l'intento di fornire un'utile *Dispensa* su alcuni argomenti di "Fisica Moderna" per gli studenti dell'ultimo anno del Corso di" Liceo Scientifico-Tecnologico" dell'ITI Marconi di Pontedera. Questo giustifica la scelta forse un po' soggettiva degli argomenti trattati, scelta dettata da motivazioni esclusivamente didattiche. Tuttavia, seppur brevemente, si è voluto fornire un breve panorama dei principi che hanno portato, attraverso la "crisi della fisica classica", alla nascita della "Meccanica Quantistica". Abbiamo cercato, in particolare nella prima parte, di trattare gli sviluppi storici che hanno portato all'ipotesi della teoria dei quanti tra la fine dell'800 e i primi vent'anni del secolo scorso. Nelle ultime sezioni, invece, abbiamo voluto dare qualche breve esempio di applicazione delle leggi della Meccanica Ondulatoria, descritta dall'equazione di Schrödinger. Per ulteriori approfondimenti si raccomanda la lettura di testi specifici, alcuni dei quali sono segnalati nella *Bibliografia* che segue.

References

[1] "La Fisica di Berkeley",(vol.4), *Fisica Quantistica*, Zanichelli.

[2] Max Born, *Fisica Atomica*, Boringhieri.

[3] Piero Caldirola, *Dalla Micro alla Macrofisica*, Mondadori.

[4] Pauling e Wilson, *Introduzione alla Meccanica Quantistica*, Piccin.