

Introduzione alla fisica atomica e alla meccanica quantistica

Biancalana Andrea
Riccio Francesca*

aprile 2011

1 Modelli atomici

Riassumiamo brevemente alcune fasi dello sviluppo delle conoscenze sulla struttura dell'atomo presentando quelle che erano nozioni acquisite alla fine del secolo scorso:

- l'ipotesi dell'esistenza degli atomi è stata introdotta per spiegare le leggi fondamentali della chimica;
- ad ogni elemento chimico corrisponde un tipo di atomo;
- il fenomeno dell'elettrolisi, l'effetto termoionico, l'effetto fotoelettrico, la conduzione elettrica nei gas e nei metalli, il fatto che gli atomi sono in grado di assorbire ed emettere luce (cioè onde elettromagnetiche) ecc. mostrano che gli atomi, elettricamente neutri, contengono cariche positive e cariche negative;
- le cariche negative contenute negli atomi sono dovute a corpuscoli tutti uguali tra loro chiamati elettroni: questo è provato dal fatto che le misure di massa e di carica eseguite sulle cariche negative estratte con diversi metodi (effetto termoionico, effetto fotoelettrico ecc.) e dagli atomi più disparati forniscono sempre lo stesso risultato.

Il rapporto e/m (carica/massa dell'elettrone) è stato misurato da J.J. Thomson; successivamente il valore di e (carica elettrica dell'elettrone) è stato misurato da Millikan.

Si ottiene: $m \simeq 10^{-30} \text{ kg}$, $e \simeq 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

E' particolarmente conveniente introdurre una unità di misura per l'energia comoda e significativa in fisica atomica: l'elettronvolt (1 eV) è definito come l'energia acquistata da un elettrone quando passa da un punto ad un altro tra i quali esiste una differenza di potenziale (elettrico!) di 1 V . Ne segue che:

$$1 \text{ eV} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ C} \cdot \text{V} = 1.6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$$

*Liceo Majorana, Orvieto classe 5S4 a.s. 2010-11

Essendo noto dalla chimica che in un *grammo-atomo* di qualunque elemento sono contenuti N_A (Numero di Avogadro $\simeq 6.02 \cdot 10^{23}$) atomi si può calcolare la massa di un atomo: ad esempio per l'idrogeno, che ha peso atomico $A = 1$, si ha $m_H = N_A^{-1} g \simeq 1.7 \cdot 10^{-27} kg = 1.7 \cdot 10^{-24} g$ pertanto si ottiene che la massa m_H dell'atomo di idrogeno è *molto maggiore* della massa m dell'elettrone:

$$m_H \simeq 1800m$$

Questo insegna che in un atomo gli elettroni contribuiscono in maniera decisamente trascurabile alla massa totale.

Possiamo stimare le dimensioni di un atomo: consideriamo una sostanza solida monoatomica come l'oro; il suo peso atomico è $A = 197$ e quindi $197 g$ di oro sono costituiti di N_A atomi; la densità dell'oro è di circa $10 g/cm^3$; un grammo atomo di oro occupa quindi un volume di $19.7 cm^3$; ogni atomo ha quindi a disposizione un volume di circa:

$$\frac{19.7}{N_A} = 30 \cdot 10^{-24} cm^3$$

Poiché nei solidi gli atomi sono estremamente ravvicinati (incomprimibilità dei solidi) possiamo considerare questo risultato come volume del singolo atomo. Quindi le dimensioni lineari del singolo atomo sono dell'ordine di $10^{-8} cm$. Questa grandezza viene utilizzata come unità di misura delle lunghezze in fisica atomica con il nome di Ångstrom (Å).

Quindi si sa che l'atomo è composto da una carica positiva, cui è associata quasi tutta la massa, e da un certo numero di elettroni (di carica uguale e di segno contrario) cui è associata una massa complessivamente trascurabile. Le dimensioni dell'atomo sono dell'ordine di 1Å .

Rimane da stabilire *come* sono disposti nell'atomo gli elettroni e la carica positiva. Rimane cioè da definire un *modello* dell'atomo.

Il primo modello che ha riscosso un certo successo è stato quello di J.J. Thomson all'inizio del secolo: si supponeva che l'atomo fosse costituito da una sfera di carica positiva uniformemente distribuita, di diametro circa 1Å , entro cui si trovano elettroni in numero tale da rendere nulla la carica totale. Il numero di elettroni viene chiamato numero atomico indicato con Z . Nel caso dell'atomo più semplice, quello di idrogeno, si ha un solo elettrone ($Z = 1$) che risente di una forza attrattiva verso il centro *proporzionale* alla distanza dal centro (finché l'elettrone si trova all'interno della sfera di carica positiva): la posizione di equilibrio risulta essere il centro della sfera e il moto dell'elettrone risulta essere un moto armonico. Con questo modello si spiegava, ad esempio, l'emissione e l'assorbimento di radiazione e.m. dovuti al moto degli elettroni legati elasticamente.

Un altro modello atomico che permetteva di rendere conto di un gran numero di fatti sperimentali si deve a Rutherford (1911): si supponeva che la carica positiva fosse concentrata in un nucleo di dimensioni molto piccole rispetto a quelle degli atomi. Il nucleo possiede una carica uguale (di segno opposto) alla somma delle cariche di tutti gli elettroni e una massa pressoché uguale alla massa totale dell'atomo. Secondo questo modello *planetario* gli elettroni orbitano intorno al nucleo fino a distanze dell'ordine di 1Å ; ma il modello si differenzia in modo sostanziale da quello di un piccolo sistema planetario per due fatti evidenti:

- le forze tra elettroni sono repulsive mentre le forze gravitazionali tra i pianeti sono sempre attrattive;
- tali forze sono dello stesso ordine di grandezza delle forze di attrazione esercitate dal nucleo mentre nel caso del nostro sistema planetario il Sole esercita sui pianeti una forza notevolmente superiore a quelle reciproche tra i pianeti.

Nel caso di atomi con grande numero di elettroni, a causa del loro moto rapido intorno al nucleo, si può immaginare che essi siano distribuiti in modo pressoché uniforme in una sferetta di raggio $\simeq 1\text{\AA}$ attorno al nucleo.

Si trattava di stabilire quale dei due modelli fosse *più corretto*: non ha senso in fisica atomica chiedersi quale sia il modello vero ma solo quale è più idoneo a spiegare i fatti sperimentali.

Tra i meriti di Rutherford fu quello di capire che in questo senso erano cruciali i risultati degli esperimenti che Geiger effettuava già dal 1909: inviando su un sottile bersaglio di oro particelle α prodotte da una sorgente radioattiva (le particelle α hanno carica positiva $2e$ e massa $4m_H$ e oggi sappiamo che sono nuclei di Elio H_e^4) si osservava che, con probabilità circa 10^{-4} , la particella veniva deviata di un angolo maggiore di 90° . Questo fatto era in contrasto con il modello di Thomson: il campo elettrico (e quindi la forza sulla particella proiettile) all'interno dell'atomo sarebbe proporzionale alla distanza r dal centro e quindi superiormente limitata. Nel modello di Rutherford, invece, il campo va come $1/r^2$ e per distanze piccole dal nucleo si manifestano sulla particella forze repulsive molto grandi che riescono a dare angoli di deflessione $> 90^\circ$ nonostante la velocità dei proiettili siano dell'ordine di 10^7 m/s. In particolare angoli di deflessione di 180° possono essere spiegate dal modello di Rutherford ma non dal modello di Thomson.

Dal punto di vista sperimentale era necessario osservare lo scattering a grandi angoli da parte di un bersaglio estremamente sottile (da cui la scelta del materiale: l'oro è molto duttile e malleabile) per garantire l'osservazione di urti singoli tra prticelle e atomi.

2 Crisi della fisica classica in relazione ai modelli atomici

Nonostante la capacità di interpretare molti fenomeni ed esperimenti il modello planetario di Rutherford ha fatto sorgere numerose difficoltà che la fisica classica, edificio ben consolidato all'inizio del secolo, non riusciva a superare.

2.1 Stabilità delle dimensioni degli atomi

E' noto che un certo tipo di atomi (si pensi per semplicità a quelli di idrogeno) ha le stesse dimensioni indipendentemente da come viene 'preparato'; poiché classicamente le dimensioni delle orbite dipendono dalla rispettiva energia non si spiega perché atomi di idrogeno ottenuti dissociando molecole di H_2 debbano avere sempre le stesse dimensioni (quindi la stessa energia orbitale) di atomi ottenuti, per esempio, dissociando molecole di H_2O . Le grandezze in gioco

(carica elettrica e e massa m dell'elettrone) non consentono di 'costruire' una grandezza che abbia le dimensioni di una lunghezza. In questo senso il modello di Thomson non poneva problemi: era stato pensato apposta per spiegare la stabilità delle dimensioni degli atomi!

2.2 Collasso per irraggiamento

E' noto dall'analisi delle equazioni di Maxwell che le cariche elettriche in orbita intorno al nucleo dovrebbero irraggiare energia e.m. perché sottoposte ad accelerazione; per raggi delle orbite dell'ordine di 1\AA si ottiene che in tempi inferiori a un miliardesimo di secondo gli elettroni dovrebbero cedere come radiazione tutta la loro energia e quindi precipitare sul nucleo: le dimensioni stabili degli atomi dovrebbero essere quindi quelle dei nuclei che (dagli esperimenti di scattering) risultano essere circa 10^{-13} cm .

3 Effetto fotoelettrico

Fra i molti fenomeni che non trovano spiegazione nell'ambito della fisica classica (distribuzione spettrale della radiazione di corpo nero, calore specifico dei metalli ecc.) è particolarmente significativo nella sua 'semplicità' l'effetto fotoelettrico. Illuminando la superficie di un metallo con luce di frequenza abbastanza elevata si osserva emissione di elettroni.

Secondo la fisica classica l'energia associata ad un'onda e.m. monocromatica è proporzionale all'intensità; l'intensità può avere un qualunque valore da 0 in su e quindi l'energia associata può variare con continuità da 0 in su. Inoltre questa energia è uniformemente distribuita nello spazio.

In un metallo gli atomi sono disposti in un reticolo in posizioni fisse e 'condividono' una parte dei loro elettroni (di conduzione) che si muovono quasi liberamente all'interno del metallo. Fornendo abbastanza energia ad un elettrone si può ottenere la sua fuoriuscita dal reticolo: questo può verificarsi scaldando il metallo (effetto termoionico) o investendolo con radiazione e.m. (effetto fotoelettrico).

Sperimentalmente: l'emissione fotoelettrica si ottiene solo per frequenze della radiazione superiori ad un valore di soglia ν_0 caratteristica di ogni metallo. Inoltre si osserva che gli elettroni emessi per effetto fotoelettrico hanno energia cinetica indipendente dall'intensità della radiazione incidente ma *dipendente in modo lineare* dalla frequenza ν :

$$E_{Max} \propto \nu - \nu_0$$

Nel 1905, per spiegare l'effetto fotoelettrico, Einstein formulò un'ipotesi in netto contrasto con le previsioni classiche: un'onda e.m. di frequenza ν trasmette energia in "pacchetti" (fotoni) di energia E proporzionale alla frequenza: $E = h\nu$. La costante di proporzionalità h era la stessa introdotta pochi anni prima da Plank per interpretare lo spettro della radiazione emessa da un corpo nero.

Può essere utile disporre di una regola mnemonica per ricavare rapidamente l'energia dei fotoni associati ad una radiazione di frequenza data (e viceversa). Esprimendo la lunghezza d'onda λ in nm e l'energia E in eV si ha semplicemente:

$$\lambda(nm) = \frac{1240}{E(eV)}$$

Sull'effetto fotoelettrico è basato il funzionamento dei fotomoltiplicatori: rivelatori di luce estremamente sensibili che consentono la misura di intensità luminose corrispondenti in alcuni casi a uno o pochi fotoni 'alla volta' con risoluzioni temporali molto elevate (fino a $1 ns$). L'effetto fotoelettrico è direttamente connesso, inoltre, alla formazione dell'immagine latente nel processo fotografico tradizionale ai sali d'argento: nella 'emulsione' fotografica sono dispersi microscopici cristalli di $AgBr$; per effetto fotoelettrico si ha lo 'spostamento' dell'elettrone dallo ione Br^- allo ione Ag^+ dando luogo alla formazione di atomi neutri Ag che poi catalizzano la riduzione degli altri ioni del cristallo durante lo sviluppo.

L'effetto fotoelettrico prova che l'energia e.m. viene *assorbita* per quanti; non prova però che essa sia 'trasportata' per quanti.

Si può sperimentalmente verificare anche in quale modo l'energia e.m. venga *emessa*: consideriamo la produzione di raggi X mediante l'arresto di un fascio di elettroni (emessi per effetto termoionico da un catodo e accelerati con una d.d.p. dell'ordine di $10^4 V$) inviati a urtare contro un anodo metallico: nella fase di arresto gli elettroni subiscono una brusca accelerazione e quindi irradiano (cariche elettriche accelerate irradiano sempre energia e.m.). Lo spettro della radiazione emessa è continuo con un limite superiore ad frequenza ν_0 che non dipende dal metallo usato ma è proporzionale alla d.d.p. usata per accelerare gli elettroni. Questo fatto sperimentale può essere interpretato immediatamente supponendo che ogni elettrone può emettere, nell'urto, uno o più fotoni di energia massima $h\nu$ pari alla energia cinetica dell'elettrone stesso. Classicamente, invece, il moto accelerato aperiodico dovrebbe dare luogo ad una emissione su tutte le frequenze senza alcun limite superiore.

4 Effetto Compton

Se un fotone trasporta un'energia $E = h\nu$ ed ha massa a riposo nulla allora possiede una quantità di moto $p = h\nu/c$.

Questo fatto viene messo in evidenza studiando la diffusione (o scattering) di radiazione e.m. da parte di elettroni liberi. Inviando raggi X su un bersaglio gli elettroni si comportano come se fossero liberi perché le loro energie di legame (almeno per gli elettroni periferici) sono molto più piccole di quelle trasportate dai fotoni X . L'urto fotone-elettrone può essere analizzato imponendo (in senso relativistico) la conservazione dell'energia e della quantità di moto. Si ottiene che i fotoni diffusi ad un angolo θ rispetto alla direzione di incidenza hanno lunghezza d'onda λ' maggiore della lunghezza d'onda λ di quelli incidenti e crescente al crescere di θ .

Indichiamo con m_0 la massa a riposo dell'elettrone. Supponiamo l'elettrone inizialmente fermo.

Consideriamo la conservazione dell'energia:

$$h\nu + m_0c^2 = h\nu' + m_0\gamma c^2$$

che, dividendo per c e ricordando che $\lambda\nu = c$, può essere riscritta:

$$\frac{h}{\lambda} + m_0c = \frac{h}{\lambda'} + m_0\gamma c$$

ovvero:

$$m_0\gamma c = \frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'} + m_0c$$

elevando al quadrato:

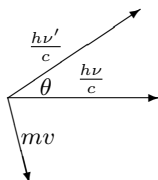
$$m_0^2\gamma^2c^2 = \left(\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\right)^2 + m_0^2c^2 + 2\left(\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\right)m_0c$$

e quindi sviluppando:

$$(\gamma^2 - 1)m_0^2c^2 = \frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + 2m_0c\left(\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\right)$$

Fin qui avendo utilizzato l'equazione della conservazione dell'energia.

Per quanto riguarda la conservazione della quantità di moto è conveniente sfruttare il teorema del coseno (altrimenti si può imporre separatamente la conservazione delle due componenti della quantità di moto totale nelle direzioni parallela e perpendicolare a quella del moto del fotone incidente): h/λ , h/λ' e mv sono rispettivamente i moduli della quantità di moto del fotone incidente, del fotone 'scattered' e dell'elettrone dopo l'urto. Dal teorema del coseno si ha (basta costruire il triangolo con i tre vettori in questione):



$$\frac{h^2}{\lambda^2} + \frac{h^2}{\lambda'^2} - \frac{2h^2}{\lambda\lambda'} \cos(\theta) = m_0^2\gamma^2v^2$$

dove v indica la velocità dell'elettrone dopo l'urto.

Ricordando dalla relatività che:

$$\beta = v/c \quad \gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}$$

è facilissimo dimostrare che:

$$\gamma^2 - 1 = \frac{\beta^2}{1 - \beta^2} = \gamma^2\beta^2$$

e, quindi, il primo membro dell'equazione ottenuta dalla conservazione dell'energia equivale a:

$$(\gamma^2 - 1)m_0^2c^2 = \gamma^2\beta^2m_0^2c^2 = m_0^2\gamma^2v^2$$

ovvero equivale al secondo membro dell'equazione ottenuta dalla conservazione della quantità di moto.

Quindi, per confronto delle due espressioni ricavate manipolando le equazioni di conservazione e semplificando si ottiene:

$$-\frac{2h^2}{\lambda\lambda'} + 2m_0c\left(\frac{h}{\lambda} - \frac{h}{\lambda'}\right) = -\frac{2h^2}{\lambda\lambda'}\cos(\theta)$$

Semplificando ancora (basta dividere tutti i termini per $2h$):

$$m_0c\left(\frac{1}{\lambda} - \frac{1}{\lambda'}\right) = \frac{h}{\lambda\lambda'}(1 - \cos(\theta))$$

E finalmente, moltiplicando per $\lambda\lambda'$, si ottiene la famosa relazione:

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0c}(1 - \cos(\theta))$$

Dal punto di vista sperimentale è importante notare che la *variazione relativa* di lunghezza d'onda per effetto Compton è data:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = \frac{h}{m_0c\lambda}(1 - \cos(\theta))$$

e, poiché $-1 < \cos(\theta) < +1$, vale al massimo:

$$\frac{\Delta\lambda}{\lambda} = 2 \cdot \frac{h}{m_0c\lambda}$$

Affinché si possa misurare una variazione apprezzabile della lunghezza d'onda è necessario utilizzare radiazione con lunghezza d'onda *non troppo grande* rispetto alla *lunghezza d'onda Compton*:

$$\lambda_{Compton} \approx 2 \cdot 10^{-12} \text{ m}$$

e quindi praticamente raggi X, preferibilmente molto energetici. Questo giustifica a posteriori la necessità di ricorrere alla trattazione relativistica poiché i fotoni X energetici possono avere energia non trascurabile rispetto alla energia a riposo dell'elettrone bersaglio.

5 Spettri atomici: le ipotesi di Bohr

Ogni sostanza può assorbire o emettere soltanto radiazioni e.m. di determinate frequenze caratteristiche della sostanza stessa. Le frequenze che la sostanza può assorbire costituiscono il suo *spettro di assorbimento*, quelle che può emettere costituiscono il suo *spettro di emissione*. E' conveniente considerare gli spettri di emissione e assorbimento di sostanze gassose o vapori a bassa pressione: in queste condizioni gli atomi si comportano come se fossero quasi liberi e isolati.

Lo spettro di assorbimento si osserva analizzando la luce trasmessa da una sostanza quando viene illuminata da luce ‘bianca’ (cioè da luce che contiene tutte le frequenze): si osserverà uno spettro continuo come quello della luce incidente interrotto, però, da righe scure in corrispondenza alle frequenze assorbite. Lo spettro di emissione si osserva analizzando la luce emessa dalla sostanza in esame quando ad essa viene fornita energia: per esempio per riscaldamento in una fiamma, oppure provocando in essa una scarica elettrica, oppure illuminandola con radiazione di frequenza opportuna.

In generale si osserva che, per ogni sostanza, lo spettro di emissione è più ricco di righe di quello di assorbimento; inoltre nello spettro di emissione si ritrovano tutte le righe che compongono lo spettro di assorbimento.

Allo scopo di spiegare gli spettri di emissione e di assorbimento, Bohr nel 1913 formulò alcune ipotesi in contrasto (come l’ipotesi di Einstein sull’effetto fotoelettrico) con la fisica classica (la quale peraltro non riusciva a spiegare gli spettri):

1^a ipotesi Ogni atomo può avere solo un insieme discreto di valori dell’energia a partire da un valore minimo: $E_1 < E_2 < \dots < E_n$.

Questi valori di energia si chiamano ‘livelli energetici’ dell’atomo.

Questa ipotesi vale per gli atomi in “stati legati” nei quali gli elettroni sono confinati in zone di spazio limitate: per gli atomi ionizzati tutto il continuo di valori di energia previsto dalla fisica classica è permesso.

Lo stato di un sistema atomico corrispondente al valore minimo dell’energia è chiamato *stato fondamentale*.

2^a ipotesi Quando il sistema si trova in uno dei suddetti stati energetici *non irraggia*: si ha irraggiamento o assorbimento di radiazione e.m. solo nel passaggio da uno stato di energia E_n ad un’altro E_m : in questo caso si osserva emissione (o assorbimento) alla frequenza:

$$\nu_{n,m} = \frac{|E_n - E_m|}{h}$$

3^a ipotesi Le orbite permesse sono quelle per cui il *momento angolare* è un multiplo intero di $h/2\pi$.

Questa ipotesi (esprimibile in forma più generale, Bohr–Sommerfeld) permise a Bohr di determinare i livelli energetici di sistemi atomici semplici: l’atomo di idrogeno e degli *idrogenoidi*. Gli *atomi idrogenoidi* sono atomi ionizzati (una o più volte) che contengono un solo elettrone: per esempio H_e^+ , Li^{++} , B_e^{+++} ecc.

In particolare le ipotesi di Bohr erano compatibili con l’ipotesi di Einstein sull’assorbimento quantizzato della radiazione da parte degli atomi; inoltre si capiva perché gli spettri di emissione sono più ricchi di quelli di assorbimento: gli atomi a temperature ordinarie si trovano, nella stragrande maggioranza, allo stato fondamentale; pertanto in assorbimento si osservano solo le frequenze

$$\nu_{1,n} = \frac{E_n - E_1}{h}$$

Dopo l’eccitazione ad uno stato E_n , invece, l’atomo riemette radiazione effettuando una o più transizioni ai livelli energetici inferiori fino a raggiungere lo

stato fondamentale: in emissione si osserva perciò l'intero spettro dato da tutte le possibili coppie $E_n - E_m$.

6 Esperienze di Bragg (sui raggi X) e di Davisson-Germer (sugli elettroni)

Nel 1923, dieci anni dopo che Bohr aveva proposto la sua teoria, DeBroglie si pose il seguente problema:

la radiazione e.m., cui abbiamo sempre attribuito una natura ondulatoria, si presenta anche sotto un aspetto completamente diverso, cioè sotto l'aspetto corpuscolare (fotoni). La costante di Plank h rappresenta il legame tra i due aspetti. Ma la costante h interviene anche nel modello atomico di Bohr e quindi interviene in problemi in cui si ha a che fare con particelle. Non potrebbe allora darsi che si possa cercare un aspetto ondulatorio anche per le particelle che abbiamo sempre trattato come oggetti corpuscolari?

Le orbite degli elettroni secondo il modello di Bohr sono quelle per cui $pL = nh$ dove n è un numero intero, L è la lunghezza dell'orbita e p è la quantità di moto dell'elettrone.

Per i fotoni vale la seguente relazione tra quantità di moto e lunghezza d'onda: $\lambda = h/p$.

Ipotesi di DeBroglie:

Se ad ogni particella associamo un'onda tale che $\lambda = h/p$ allora le orbite permesse nel modello atomico di Bohr sono quelle che hanno lunghezza multipla di λ .

Ma questa è ancora solo un'ipotesi: che significa che ad una particella è associata un'onda? Di che tipo di onda si tratta?

Si conoscono due tipi di onde: quelle elastiche e quelle e.m.; presumibilmente si avrà a che fare con un terzo tipo di onde. In ogni caso per le onde vale il principio di sovrapposizione: cioè le onde sono entità che danno luogo a fenomeni di *interferenza*.

Vediamo, per cominciare, con quali lunghezze d'onda si ha a che fare:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE}}$$

Per un elettrone, esprimendo ancora E in eV e λ in nm si ha:

$$\lambda \simeq \frac{1.24}{\sqrt{E}}$$

Si noti che mentre per i fotoni λ è inversamente proporzionale a E , per particelle di massa a riposo non nulla λ è inversamente proporzionale a \sqrt{E} .

Per elettroni con $E = 100 \text{ eV}$ si ha $\lambda \approx 0.1 \text{ nm}$: lunghezza d'onda tipica dei raggi X.

Per verificare la natura ondulatoria dei raggi X si può osservare la riflessione di Bragg da parte di un cristallo; i piani reticolari del cristallo, posti a distanza regolare d , riflettono onde che danno luogo a interferenza e la radiazione riflessa presenta massimi di intensità per gli angoli θ che soddisfano la seguente

condizione (di Bragg):

$$2d \sin(\theta) = n\lambda$$

con n numero intero.

Davisson e Germer, in modo del tutto analogo a quanto fatto dai Bragg sui raggi X, osservarono la riflessione di un fascio di elettroni da parte di un cristallo: il fascio riflesso presentava i caratteristici massimi e minimi di intensità tipici della interferenza. Si trattava di una conferma sperimentale dell'ipotesi di DeBroglie.

7 Dualità onda–corpuscolo

Abbiamo visto che le onde e.m. manifestano un comportamento corpuscolare e, viceversa, le particelle manifestano un comportamento ondulatorio.

Questi due aspetti sono contraddittori secondo gli schemi classici in termini dei quali siamo abituati a pensare.

I fatti sperimentali non ci permettono di scartare uno dei due aspetti in favore dell'altro: si deve prendere atto dell'esistenza di questo dualismo e modificare i nostri schemi di ragionamento per riuscire a conciliare l'esistenza simultanea dell'aspetto ondulatorio e corpuscolare per uno stesso ente fisico.

Vediamo quindi come si può conciliare l'esistenza di fenomeni di interferenza luminosa se si pensa alla luce composta di fotoni.

Possiamo immaginare un esperimento in cui luce monocromatica (o un fascio di elettroni monoenergetici; nel seguito faremo riferimento a fotoni) attraversa una coppia di fenditure A e B. Su uno schermo posto dietro le fenditure si osservano frange di interferenza nella zona in cui si sovrappongono le figure di diffrazione prodotte dalle fenditure A e B.

Evidentemente nelle frange luminose arrivano molti fotoni e nelle frange buie arrivano pochi fotoni.

Cosa succede se si riduce l'intensità della luce fino ad avere un fotone per volta nel percorso dalla sorgente allo schermo?

Se sullo schermo si dispone una lastra fotografica si dovrà aumentare il tempo di esposizione in corrispondenza della diminuzione della intensità luminosa: ma alla fine, dopo averla sviluppata, la lastra riprodurrà la solita figura di interferenza.

Dobbiamo concludere che i fotoni non interferiscono fra di loro ma l'interferenza dipende dal singolo fotone: ogni fotone interferisce con sé stesso.

Classicamente un corpuscolo che parte dalla sorgente e raggiunge lo schermo passa o dalla fenditura A o dalla B. I fotoni che danno interferenza passano in qualche modo contemporaneamente da A e da B. Dal punto di vista ondulatorio se la fenditura B è chiusa si osserva sullo schermo solo l'onda proveniente da A; viceversa se si chiude la fenditura A; se le fenditure sono entrambe aperte lo schermo è raggiunto dalla sovrapposizione delle due onde provenienti da A e da B.

Se il fotone passasse 'mezzo da A e mezzo da B' cosa dovrei misurare mettendo due fotomoltiplicatori (rivelatori di luce sensibili al singolo fotone, vd. Effetto fotoelettrico) F_A e F_B subito dietro le fenditure A e B rispettivamente?

Se F_A e F_B scattassero insieme avrei diviso in due il fotone! Succede invece che per ogni fotone scatta o F_A o F_B : ripetendo molte volte la misura scatterà, in media, metà delle volte F_A e metà delle volte F_B .

Bisogna considerare adesso che l'inserimento dei due fotomoltiplicatori ci permette di sapere da quale fenditura passa ogni fotone ma ci preclude senz'altro la possibilità di vedere le frange di interferenza: i fotomoltiplicatori devono assorbire il fotone per dare il segnale del suo passaggio.

Si può cercare di immaginare un esperimento più sofisticato che consenta di vedere interferenza e di scoprire dove passa il fotone: in realtà qualunque misura che permetta di riconoscere il comportamento corpuscolare del fotone preclude la possibilità di vedere il comportamento ondulatorio della stessa radiazione.

Quando tappiamo le due fenditure con F_A e F_B noi sappiamo, e verificiamo, che i due fotorivelatori scatteranno, ognuno, con probabilità del 50%: tuttavia non sapremo mai, per ogni fotone, se sarà rivelato da F_A o da F_B .

Ancora: osservando le frange di interferenza sapremo che ogni fotone finirà su una delle frange chiare: non potremo mai sapere con certezza quale punto dello schermo sarà 'illuminato' da un fotone che contribuisce alla figura di interferenza.

Nella fisica quantistica il carattere *statistico* della prevedibilità del comportamento di un fotone (o di una particella) è *ineliminabile*.

In generale una misura perturba lo stato di un sistema: se il fotone interferisce 'con sé stesso' si trova in uno stato tale che 'passa sia da A che da B contemporaneamente' ma se facciamo una misura che rivela il suo passaggio perturbiamo lo stato del fotone che risulterà passato 'per A' o 'per B'.

Tipico esempio di misura che perturba lo stato del sistema: supponiamo di voler determinare la polarizzazione di una radiazione e.m.; essa può essere analizzata, ad esempio, con un filtro 'polaroid': il risultato della misura è che alcuni fotoni passano dal filtro e altri vengono assorbiti; tutti quelli che passano hanno uno stato di polarizzazione ben definito dalla orientazione del filtro mentre prima di incontrare il filtro potevano avere uno stato di polarizzazione non definito (si pensi alla luce che proviene da una lampada a incandescenza: è luce non polarizzata!).

8 Le relazioni di indeterminazione

Supponiamo di voler determinare lo stato di polarizzazione e la frequenza (cioè l'energia) di un fotone. Dopo aver determinato lo stato di polarizzazione (per esempio con il solito filtro polaroid o per mezzo di un cristallo birifrangente) possiamo utilizzare un prisma o un reticolo di diffrazione per determinare l'energia del fotone senza influenzarne lo stato polarizzazione.

Si dice che le due misure (di polarizzazione e di frequenza) sono fra loro compatibili.

Esistono tuttavia grandezze che non possono essere note simultaneamente: questo succede quando la misura della seconda perturba il sistema portandolo in uno stato in cui non è nota la misura della prima grandezza.

Un esempio tipico di grandezze che non possono essere note simultaneamente è quello della posizione e della velocità di una particella: supponiamo di avere

determinato (=misurato) la velocità di un elettrone e di volerne misurare la posizione. Per far questo bisogna osservarlo: possiamo inviare sull'elettrone luce monocromatica di lunghezza d'onda λ per poi raccogliere la luce diffusa dall'elettrone con un microscopio che ne dà un'immagine.

I fotoni che formano l'immagine passano in qualche punto (che non può essere determinato) della lente del microscopio: questi fotoni sono stati diffusi dall'elettrone che ha subito un "rinculo" (vd. effetto Compton).

E' noto che gli effetti di diffrazione rendono l'immagine di uno strumento ottico tanto più 'imprecisa' quanto più stretta è l'apertura della lente. Volendo determinare con precisione la posizione dovremo usare quindi un microscopio con una grande lente.

Ma nel nostro caso più grande è la lente del microscopio e maggiore sarà l'indeterminazione della quantità di moto del fotone raccolto: questo comporta che sarà tanto maggiore l'indeterminazione della quantità di moto scambiata tra fotone e elettrone nell'urto.

Il risultato è che perderemo informazione sulla quantità di moto (e quindi sulla velocità) dell'elettrone per effetto della misura della sua posizione.

Quantitativamente per la componente x della quantità di moto dell'elettrone si avrà la seguente *relazione di indeterminazione di Heisenberg*:

$$\Delta x \cdot \Delta p_x \geq h$$

Possiamo pensare di ridurre la λ del fotone incidente per aumentare la risoluzione del microscopio: ma in questo modo aumenta l'energia dei fotoni e quindi sarà più marcato l'effetto Compton.

Il problema è tipicamente quantistico: in uno schema di ragionamento classico si potrebbe pensare di ridurre 'a piacere' l'intensità della radiazione fino a rendere piccola quanto si vuole la perturbazione dello stato di moto dell'elettrone. Ma la quantizzazione dell'energia e.m. impedisce di ridurre la quantità di moto del singolo fotone una volta fissata la λ .

Il concetto di indeterminazione è di solito, ad un primo incontro, poco digeribile. Generalmente si è portati a sostenere che *il fatto che nessuna esperienza permetterà mai di determinare esattamente posizione e velocità di una particella non impedisce che la particella abbia, istante per istante, una ben determinata posizione e una ben determinata velocità*. Questo atteggiamento è criticabile per due motivi:

1. in questo modo si finirebbe per considerare la realtà come un qualcosa di distinto da ciò che può essere misurato (osservato)
2. inoltre sarebbe come se, a proposito dell'esperienza sulla interferenza da due fenditure, si volesse sostenere che certamente la particella o passa dalla fenditura A o passa dalla B anche se nessuna misura ci permetterà di controllarlo: ma sappiamo che le frange di interferenza in questo caso non si formerebbero. O, ancora, sarebbe come se nell'esperienza di Davisson e Germer l'elettrone si dovesse riflettere su un ben determinato piano reticolare (che noi non sappiamo riconoscere ma 'lui' sì): ma allora non si dovrebbe avere riflessione solo per quegli angoli che soddisfano alla condizione di Bragg (di interferenza costruttiva).

In modo analogo alla relazione di indeterminazione presentata sopra vale quella tra energia e tempo:

$$\Delta t \cdot \Delta E \geq h$$

ovvero, in termini di frequenza, sostituendo per i fotoni $E = h\nu$:

$$\Delta t \cdot \Delta \nu \geq 1$$

già conosciuta dalla teoria delle onde elastiche (e in particolare delle onde acustiche).

9 Meccanica Quantistica

Abbiamo visto che il comportamento ondulatorio delle particelle si manifesta quando si osservano fenomeni di interferenza. I fenomeni di interferenza sono una conseguenza della validità del *principio di sovrapposizione*.

Le prime strutture formali che furono realizzate per la descrizione della fisica quantistica furono la ‘meccanica ondulatoria’ di Schroedinger e la ‘meccanica delle matrici’ di Heisenberg.

Solo in seguito, per merito di Dirac, fu dimostrata la perfetta equivalenza delle due teorie.

La validità del principio di sovrapposizione per gli ‘stati’ di un sistema quantistico (lo stato dell’elettrone nell’esperienza dell’interferenza da due fenditure è una combinazione dei due stati ‘passa per A’ e ‘passa per B’) permette di rappresentare tali stati per mezzo di elementi (vettori) di un particolare spazio vettoriale (spazio di Hilbert) definito sul corpo dei numeri complessi. Precisamente gli stati di un sistema possono essere messi in corrispondenza biunivoca con le direzioni dei vettori di un particolare spazio vettoriale.

Normalmente lo spazio vettoriale in questione ha dimensione ∞ !

Se gli stati di un sistema possono essere rappresentati come *vettori*, le grandezze osservabili (come per esempio le tre coordinate di una particella, le sue tre componenti della quantità di moto, la sua energia cinetica, le sue componenti del momento angolare, ecc.) possono essere rappresentate come *operatori* che agiscono sui vettori (cioè sugli stati del sistema).

In matematica gli operatori che agiscono su vettori sono rappresentati da matrici; l’algebra delle grandezze osservabili, in meccanica quantistica, è l’algebra (notoriamente non commutativa) delle matrici.

Facciamo riferimento quindi alla algebra delle matrici: i risultati della misura di una grandezza (osservabile) possono essere solo gli *autovalori* della corrispondente matrice.

In meccanica quantistica si postula che, subito dopo la misura, lo stato del sistema è quello rappresentato dall’*autovettore* corrispondente all’autovalore risultato dalla misura stessa.

In fisica classica, dato lo stato di un sistema, ogni grandezza osservabile ha un determinato valore su quello stato: per esempio data la posizione e la velocità di una particella è noto il valore dell’energia, del momento angolare ecc.

In meccanica quantistica, invece, ogni grandezza osservabile ha un valore definito solo se il sistema si trova in suo autostato (cioè in uno stato rappresentato

da un autovettore della grandezza osservabile in questione): ma ha senso solo dire che la grandezza osservabile ha un determinato *valore medio* su un generico stato del sistema.

Le grandezze osservabili compatibili sono quelle rappresentate da operatori che hanno gli stessi autovettori.

Il significato fisico di compatibilità di due osservabili può essere così riassunto:

due osservabili sono compatibili se possono essere misurate entrambe su uno stato e la seconda misura non fa perdere l'informazione acquisita con la prima misura.

Dal punto di vista formale:

il fatto che le grandezze osservabili sono rappresentate da operatori matriciali (operano su vettori), e il fatto noto che l'algebra delle matrici è un'algebra non commutativa, comporta che in generale i risultati di due differenti misure dipende dall'ordine in cui sono fatte (cioè dall'ordine in cui operano le due matrici sullo stato del sistema): se in particolare le due matrici commutano allora le due osservabili sono compatibili.

Infine ricordiamo che in uno spazio vettoriale una matrice può essere *diagonalizzata* con una opportuna trasformazione geometrica. Le due rappresentazioni 'storiche' di Heisenberg e di Schroedinger sono in realtà del tutto equivalenti e corrispondono alla scelta di diagonalizzare rispettivamente l'operatore corrispondente all'osservabile 'energia del sistema' e gli operatori corrispondenti alle osservabili 'coordinate spaziali delle particelle del sistema'.

9.1 Rappresentazione di Schroedinger

Per quanto riguarda la *rappresentazione di Schroedinger* essa fu la prima ad essere accettata per la comodità che offriva nei calcoli e per la consuetudine acquisita dai fisici nell'uso di certi strumenti matematici: gli stati di un sistema vengono rappresentati da 'funzioni d'onda' ψ che sono funzioni delle $3N$ coordinate delle N particelle che costituiscono il sistema.

Abbiamo visto che in questa rappresentazione le grandezze osservabili che risultano essere diagonalizzate sono le coordinate delle particelle che costituiscono il sistema.

Risulta, per esempio, che:

- l'operatore che rappresenta la coordinata i -esima è semplicemente la moltiplicazione per x_i ;
- l'operatore che rappresenta i -esima componente della quantità di moto è l'operatore differenziale:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$$

- l'operatore che rappresenta l'energia cinetica di una particella di coordinate (x,y,z) ($E_{cin} = p^2/2m$) è l'operatore differenziale:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right)$$

Consideriamo una particella: se con $V(x, y, z)$ indichiamo la funzione energia potenziale (funzione delle coordinate) e ci chiediamo di trovare quali stati della particella (rappresentati dalle funzioni d'onda $\psi(x, y, z)$) sono autostati dell'energia totale (cinetica + potenziale) con autovalore E dobbiamo risolvere la seguente equazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(x, y, z) + V(x, y, z)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z)$$

questa è una equazione differenziale lineare e omogenea del secondo ordine nota come equazione di Schroedinger; l'operatore ∇^2 , chiamato 'laplaciano', è definito come già visto sopra:

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

Questo tipo di equazione non è sempre risolvibile (dipende tutto dalla funzione energia potenziale $V(x, y, z)$); tuttavia esistono diverse tecniche, note dai metodi matematici della fisica sviluppati a partire già dal 1700, per la sua risoluzione esatta, approssimata o numerica; a ciò si deve il successo della rappresentazione di Schroedinger nella descrizione della fisica quantistica.

Il 'modulo quadro' della funzione d'onda $|\psi|^2$ di una particella, funzione delle coordinate (x, y, z) , rappresenta la *densità di probabilità* di trovare la particella nel punto $P(x, y, z)$ quando si effettua una misura della sua posizione. In altri termini, la probabilità di trovare la particella in una certa regione di spazio è data dall'integrale di volume:

$$\int |\psi(x, y, z)|^2 dx dy dz$$

sulla regione considerata.