

Mathesis Firenze
mercoledì 21 ottobre 2015



Modelli atomici:
dai tentativi classici alle rappresentazioni
quantistiche

Prof. Emilio MARIOTTI



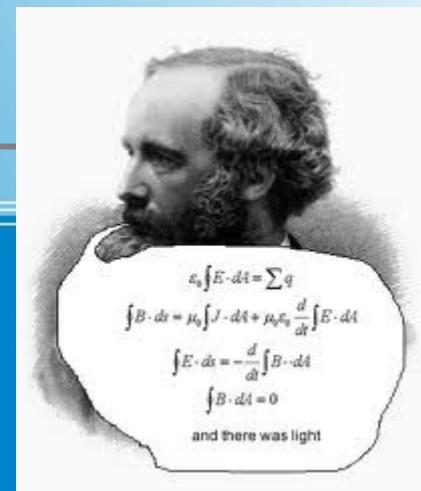
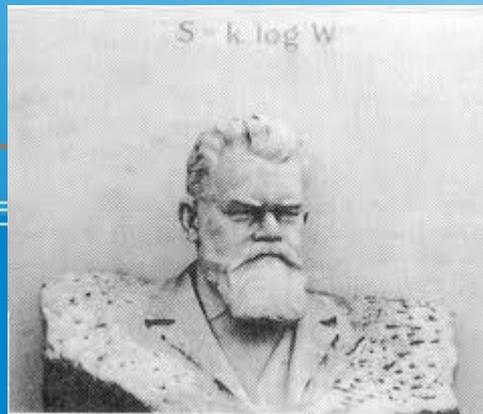
UNIVERSITÀ
DI SIENA 1240

COSA È LA FISICA CLASSICA

È IL SISTEMA DI IDEE ED ESPERIMENTI ELABORATO A PARTIRE DAL XVI SECOLO, CON LO SVILUPPO DELLA **DINAMICA NEWTONIANA** E, NEL CORSO DEL 1800, DELL' **ELETTROMAGNETISMO**.

LA **MECCANICA STATISTICA** DI BOLTZMANN PERMISE DI DARE UN'INTERPRETAZIONE MICROSCOPICA DEI **FENOMENI TERMODINAMICI**, COSÌ COME **L'OTTICA** FU COMPRESA NEL QUADRO DELLA TEORIA DI MAXWELL.

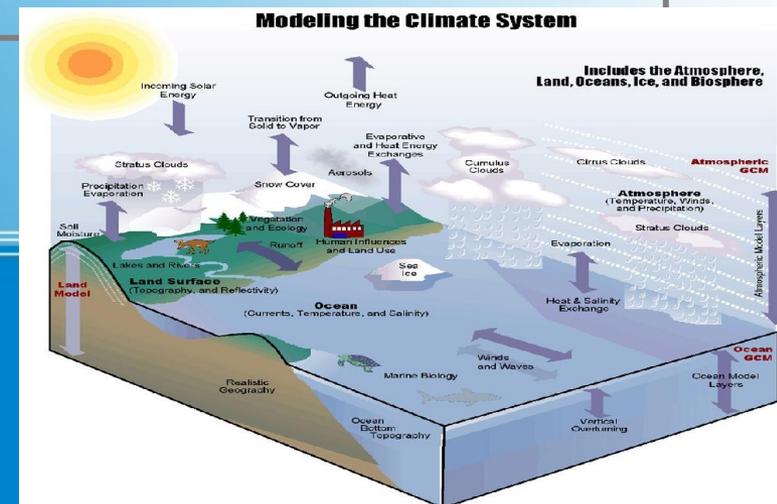
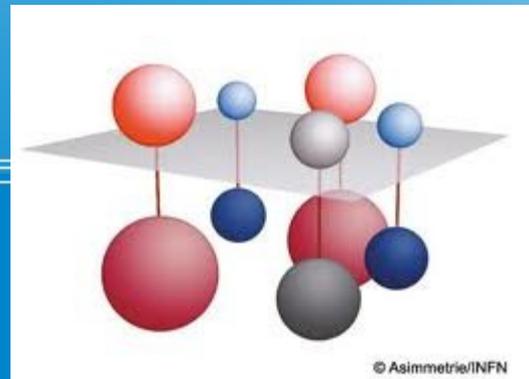
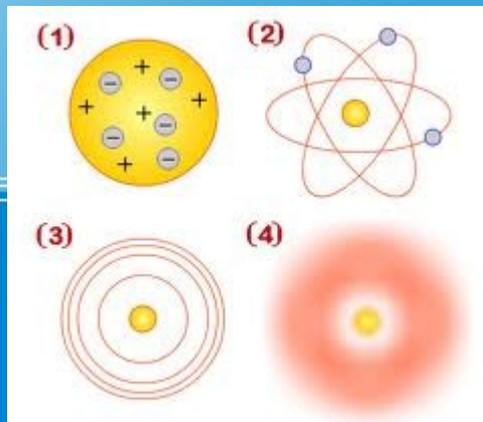
LO SVILUPPO DELLA **MECCANICA DEI MEZZI CONTINUI** CONTRIBUÌ A SPIEGARE L'**ACUSTICA** E, IN GENERALE LA PROPAGAZIONE DELLE **ONDE MECCANICHE**.



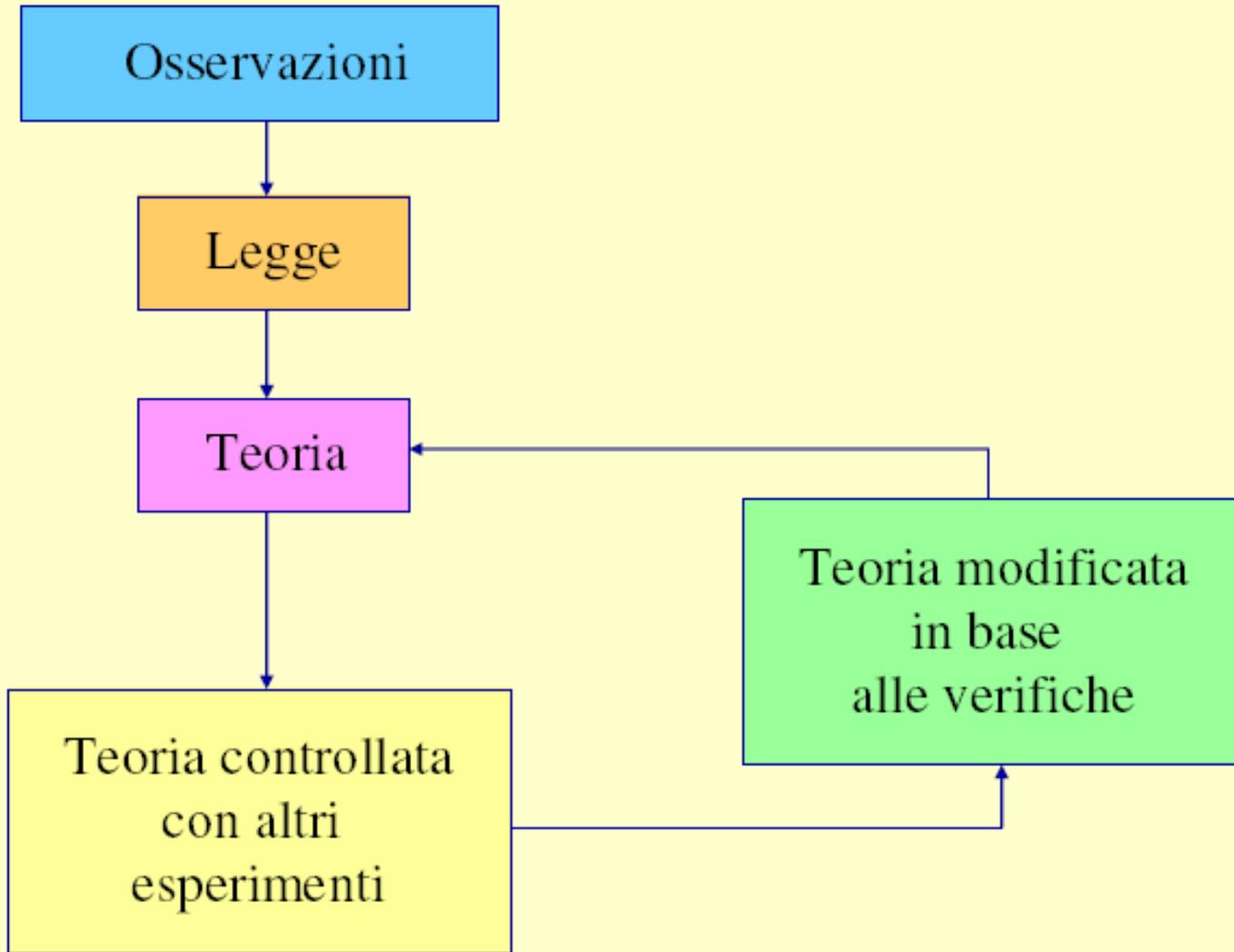
IL METODO SCIENTIFICO

Quello che dobbiamo fare è osservare la realtà per “immaginarci” il mondo a modo nostro, ovvero per costruirci dei **modelli**.

Tutte le volte che deduciamo una conclusione da questo modello, dobbiamo verificarla con un esperimento nuovo. Se tutte le verifiche hanno successo, possiamo dire che la realtà è “molto simile” al modello. Se troviamo anche una sola contraddizione, il mondo è diverso da quel che ci siamo immaginati.



IL METODO SCIENTIFICO



MODELLI ATOMICI

Struttura atomica della materia

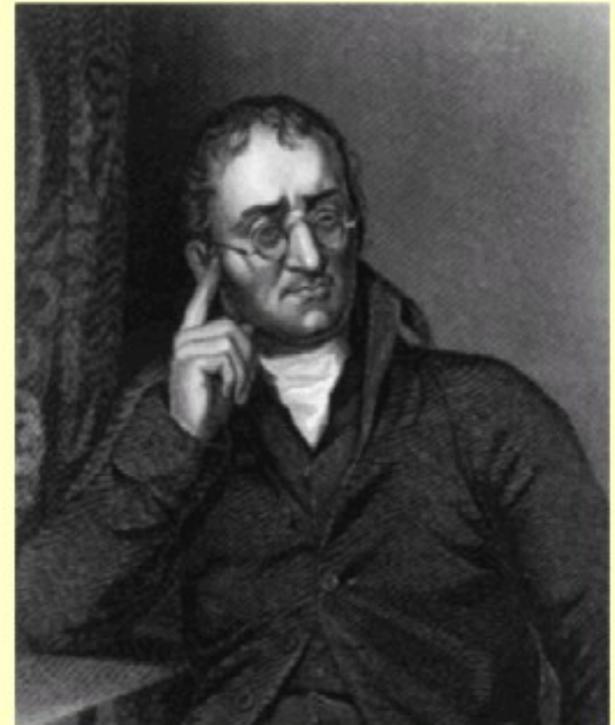
Teoria atomica di Dalton

La materia è costituita da atomi indivisibili e indistruttibili

Tutti gli atomi di uno stesso elemento hanno la stessa massa e le stesse proprietà chimiche

Atomi di elementi diversi hanno masse diverse e proprietà chimiche diverse

Gli atomi di elementi diversi si combinano fra loro in rapporti di numeri interi

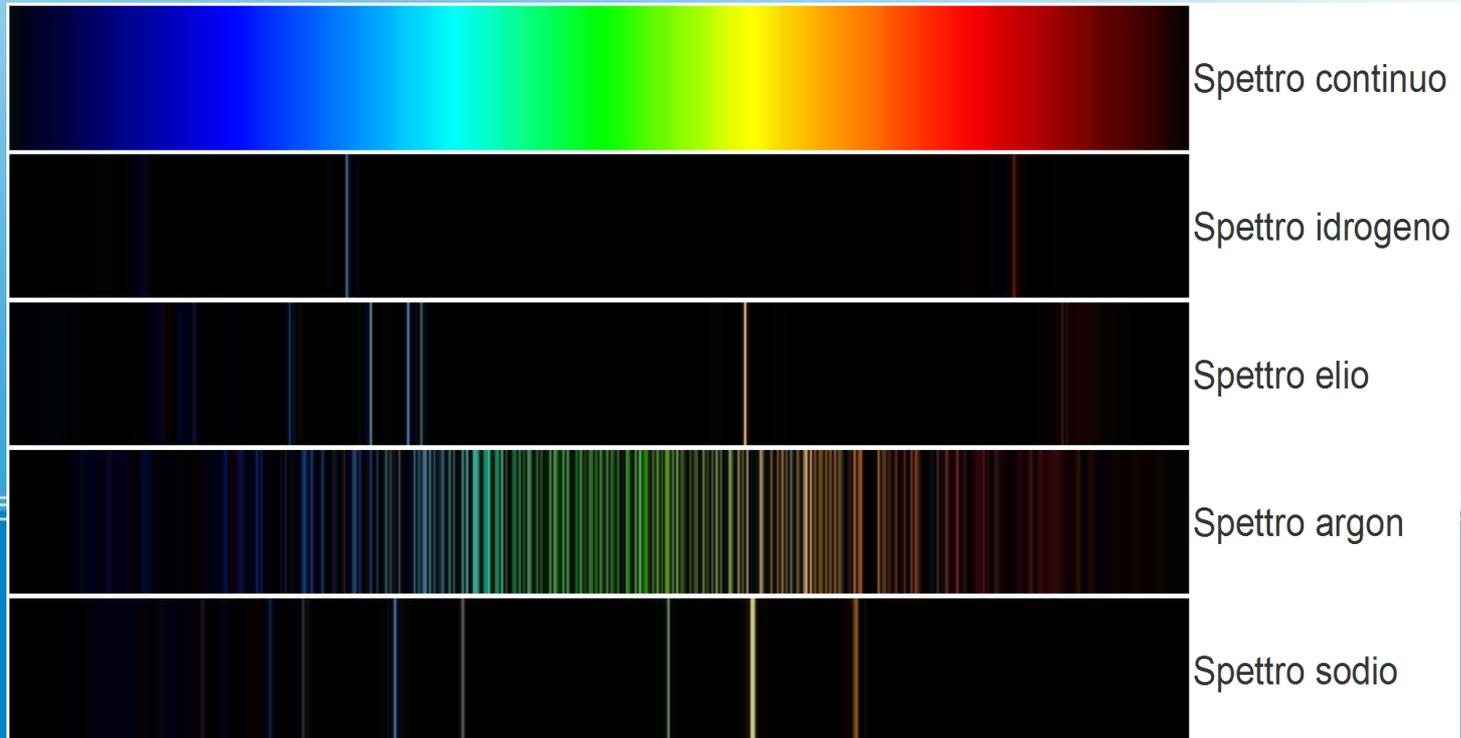


John Dalton
(1766 – 1844)

MODELLI ATOMICI

THOMSON

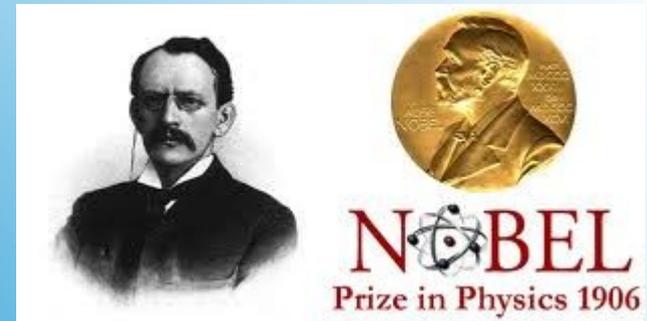
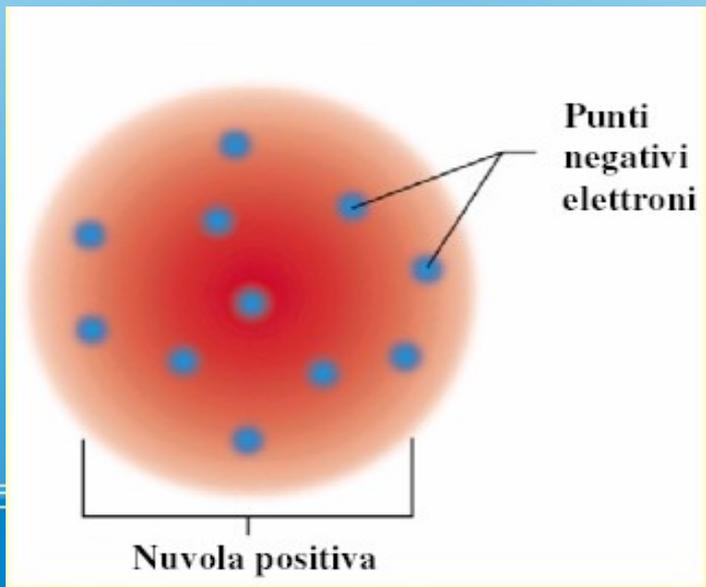
LO SPETTRO DI LUCE EMESSO DAGLI ATOMI E' UN'IMPRONTA DIGITALE PER OGNI ELEMENTO. GLI SPETTRI SONO COSTITUITI DA RIGHE DISCRETE. IL MODELLO DI THOMSON CERCA DI SPIEGARE ANZITUTTO L'ESISTENZA DI QUESTI SPETTRI



MODELLI ATOMICI

THOMSON

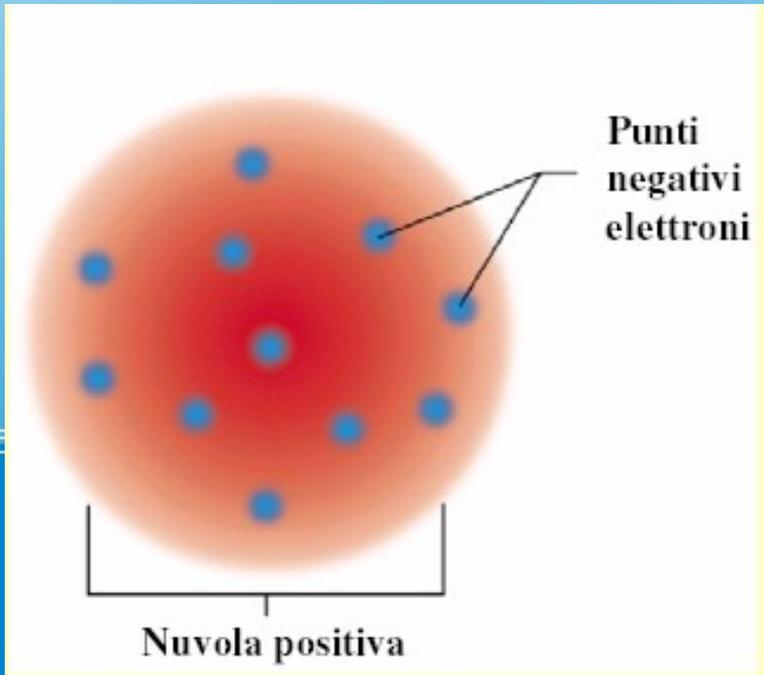
L'atomo è una sferetta (rieccoci con le biglie!) in cui la massa e la carica positiva sono distribuite con continuità (come un fluido) in modo uniforme nel volume, mentre gli elettroni puntiformi sono in numero tale da rendere complessivamente neutro il sistema.



MODELLI ATOMICI

THOMSON

Gli elettroni oscillano attorno a posizioni di equilibrio determinate dalle forze di attrazione verso il centro della sfera e le forze di repulsione tra elettroni. Il conto è semplice nel caso dell'idrogeno, dove l'elettrone in quiete sta al centro e, se spostato, comincia a oscillare in modo armonico. Ma chi introduce lo smorzamento?



$$\vec{F} = q_e \vec{E} = -K \vec{r}$$
$$\vec{r}(t) = \vec{r}_0 \cos(\omega_r t + \phi)$$

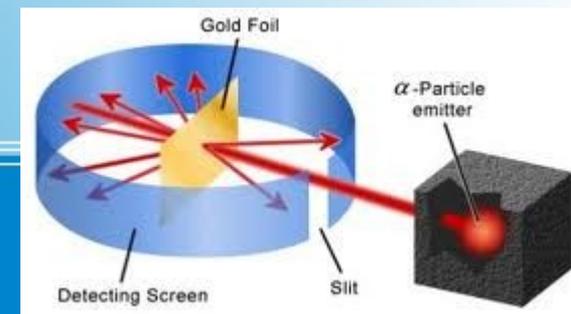
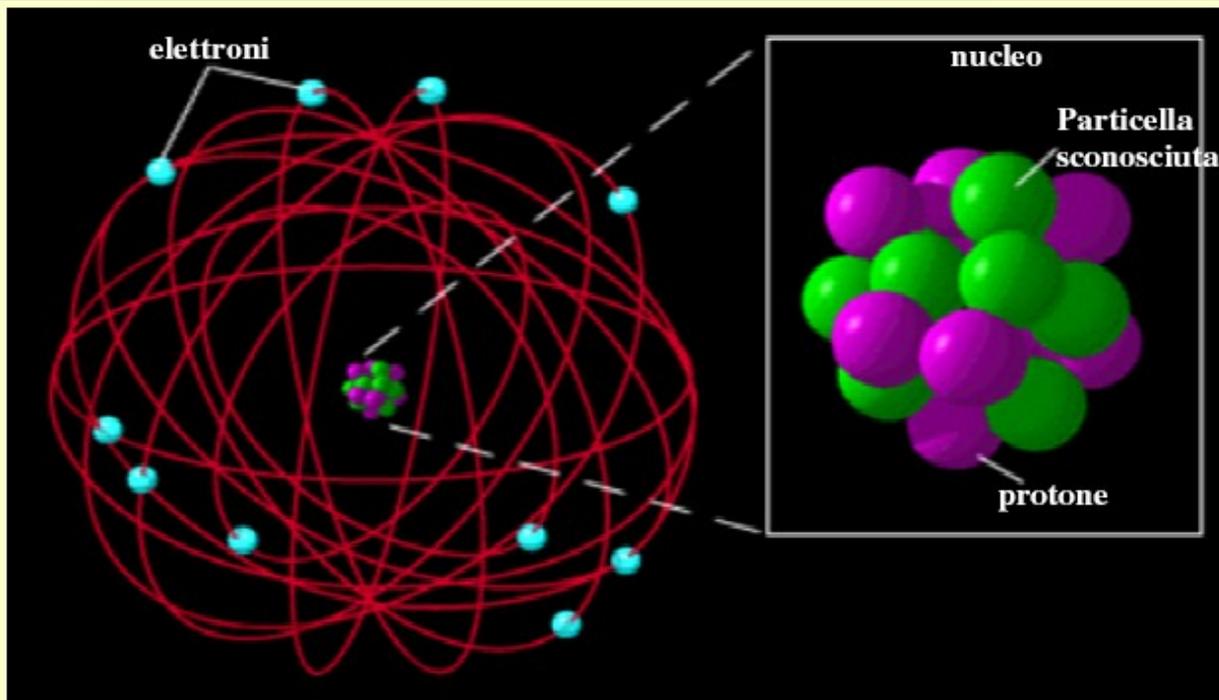
$$\omega_r = \sqrt{\frac{K}{m_e}}$$

MODELLI ATOMICI

RUTHERFORD

Il disegno non è in scala, se il nucleo avesse le dimensioni di un pallone da calcio, gli elettroni orbiterebbero a 40 km di distanza!

La particella “sconosciuta” è il neutrone, scoperto nel 1932.



MODELLI ATOMICI

RUTHERFORD

Facciamo un conto sull'atomo di idrogeno.

$$F = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = m_e a = m_e \frac{v^2}{r}$$

$$r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{m_e v^2}$$



Da questa relazione impariamo che esiste una relazione uno a uno tra raggio dell'orbita elettronica e velocità di percorrenza, ovvero tra raggio ed energia posseduta, come vediamo dalla prossima trasparenza.

MODELLI ATOMICI

RUTHERFORD

$$E_{\text{totale}} = E_{\text{cinetica}} + E_{\text{interazione}} = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

$$E_{\text{cinetica}} = \frac{1}{2} F r = \frac{1}{2} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{q_e^2}{r}$$

$$E_{\text{totale}} = \frac{-1}{2} \frac{q_e^2}{(4\pi\epsilon_0 r)}$$

Non sembrano esserci limitazioni di principio ai possibili valori di raggio orbitale, come accade d'altronde per i satelliti attorno a un corpo celeste. Eppure questo è in contrasto con l'osservazione di specifiche righe atomiche.

MODELLI ATOMICI

RUTHERFORD

Ma c'è di peggio. La teoria elettromagnetica classica prevede che l'elettrone, essendo accelerato dalla forza coulombiana, perda energia per irraggiamento a un ritmo blando, ma costante (qualsiasi carica in fase di accelerazione si comporta così): l'energia persa ad ogni periodo su quella di partenza è circa una parte su 100 milioni. Questo significa che gli atomi, e quindi tutta la materia, non dovrebbero essere stabili!

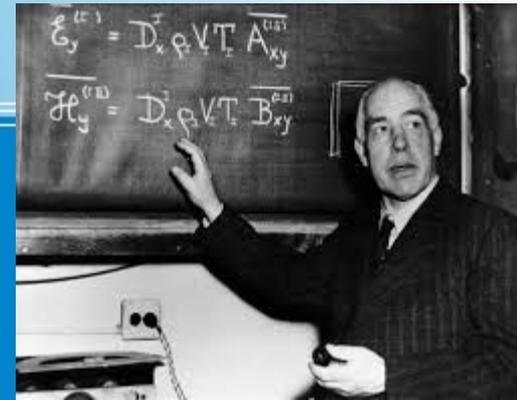
LA CRISI!

MODELLI ATOMICI

BOHR (Early Quantum Mechanics)

Fu lui ad introdurre l'idea di quantizzazione negli atomi, imponendo vincoli alle orbite permesse, senza spiegare i motivi per cui si deve escludere il caso continuo.

Ipotesi 1. un sistema atomico o molecolare legato può esistere solo se i suoi livelli di energia sono rappresentati da valori discreti E_n , che possono essere ricavati imponendo condizioni di quantizzazione alla meccanica classica



MODELLI ATOMICI

BOHR (Early Quantum Mechanics)

Ipotesi 2. in assenza di interazione con la luce, il sistema continuerà a permanere in uno dei livelli permessi (**stati stazionari**). L'emissione o l'assorbimento di luce è legato a processi in cui l'atomo passa da uno stato stazionario all'altro.

In emissione, l'energia persa dall'atomo appare come energia del campo di radiazione, secondo la relazione

$$\hbar \omega_{nm} = E_m - E_n$$

In assorbimento, un fotone viene rimosso dal campo e l'atomo sale su un livello energetico più alto.

MODELLI ATOMICI

BOHR (Early Quantum Mechanics)

Ipotesi 3. le orbite circolari del singolo elettrone nell'atomo di idrogeno sono determinate dalla richiesta che, per il momento angolare orbitale, valga

$$L_0 = m_e v r = n \hbar, \quad n \in \mathbb{N}$$

I raggi permessi hanno così valori

$$r_n = a_0 n^2; \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{q_e^2 / (4 \pi \epsilon_0 m_e)}$$

da cui

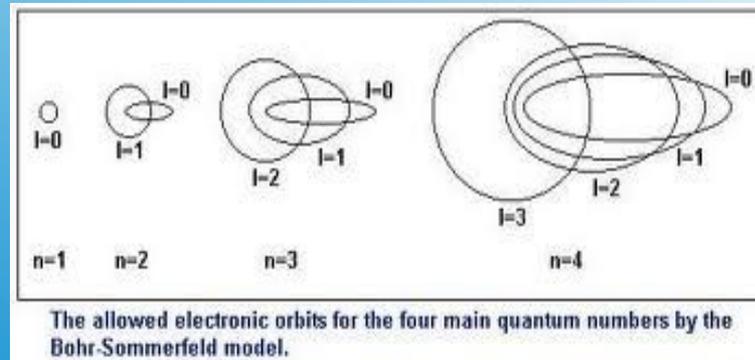
$$E_n = - \frac{q_e^2}{4 \pi \epsilon_0} \frac{1}{2 a_0 n^2}$$

MODELLI ATOMICI

BOHR - SOMMERFELD (Early Quantum Mechanics)

La formula di Bohr prevede che nella transizione tra livelli di energia l'atomo emetta luce la cui lunghezza d'onda classica si trova dall'espressione di Rydberg (1888), ricavata dagli esperimenti di spettroscopia

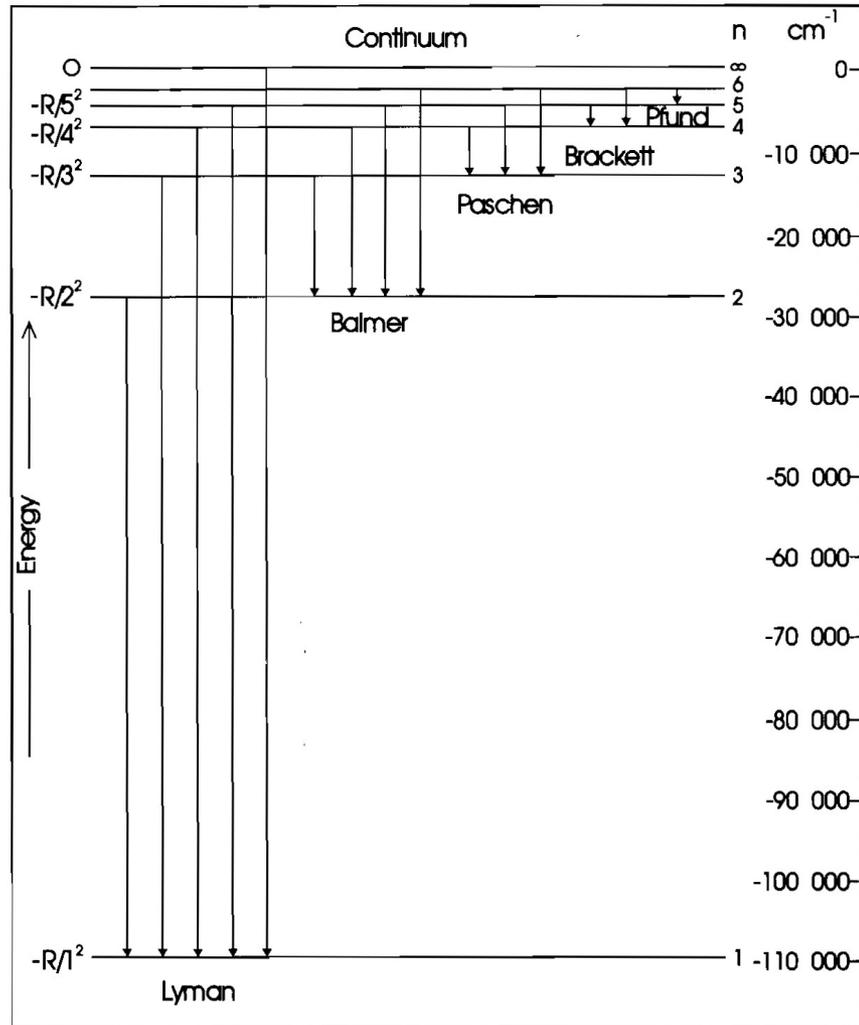
$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$



Successivamente Sommerfeld introdusse una regola generale di quantizzazione che permise di introdurre orbite ellittiche (in perfetta analogia con la meccanica celeste) e di incorporare la relatività ristretta.

MODELLI ATOMICI

Quantum mechanics



UNA COSTANTE FONDAMENTALE

LA COSTANTE E' PRESENTE NEI RISULTATI SPERIMENTALI
DELL'EFFETTO FOTOELETTRICO

$$h = 6.625 \cdot 10^{-34} \text{ MKSA (Lagrange)}$$

$$\hbar = \frac{h}{2\pi} \simeq 10^{-34} L$$

ANALISI DIMENSIONALE

UN PÒ DI CONTICINI (PER SCOPRIRE UN'AZIONE)

$$[E] = [h \nu] \Rightarrow [h] = [\textit{Energia} \times \textit{Tempo}]$$

$$[h] = [M L^2 T^{-2} \times T] = [M L^2 T^{-1}] = [MLT^{-1} \times L]$$

$$[h] = [\textit{Quantità di moto} \times \textit{Lunghezza}]$$

$$[h] = [\textit{Momento angolare} \times \textit{Angolo}]$$

ECCO IL CRITERIO

PER OGNI SISTEMA SI DEVE VALUTARE L'AZIONE
CARATTERISTICA E CONFRONTARLA CON L'AZIONE
ELEMENTARE.

VEDIAMO DUE CASI PARTICOLARI:

→ PENDOLO SEMPLICE IN OSCILLAZIONE

$$m = 0.1 \text{ kg}; \quad l = 10 \text{ cm}; \quad T \approx 0.6 \text{ s}$$

$$A_{\text{pendolo}} = m l^2 T^{-1} \simeq 1.7 \cdot 10^{-3} \text{ L} \approx 10^{31} \hbar \gg \hbar$$

→ ATOMO DI IDROGENO

$$\text{Sperimentalmente } E = 13.6 \text{ eV} \approx 2 \cdot 10^{-18} \text{ J}; \quad T \approx 10^{-16} \text{ s}$$

$$A_{\text{atomo}} = E_{\text{ionizzazione}} T^{-1} \simeq 2 \cdot 10^{-34} \text{ L} \approx \hbar$$

ECCO IL CRITERIO

NE DEDUCIAMO CHE, SE

$$A_{SISTEMA} \gg \hbar$$

POSSIAMO USARE LA FISICA CLASSICA, MENTRE QUANDO

$$A_{SISTEMA} \approx \hbar$$

DOBBIAMO RIVOLGERCI A UN'ALTRA TEORIA (tutta da costruire!!)

CARATTERISTICHE DEI QUANTONI

- UNICITA': un elettrone o i costituenti della luce (i fotoni) sono oggetti della stessa specie (benché diversi sotto molti aspetti). Nel caso limite classico questi oggetti si comportano uno da particella, l'altro da onda, ma solo nel **caso limite!**
- NECESSITA' DI NUOVE GRANDEZZE: i nuovi concetti quantistici che dobbiamo costruire vanno legati simultaneamente agli aspetti classici corpuscolari e ondulatori.
- QUANTIZZAZIONE DELLE GRANDEZZE: le grandezze rappresentative non assumono valori continui, ma discreti
- INDETERMINAZIONE NEI VALORI DELLE GRANDEZZE: ad ogni istante, in generale, ai quantoni non sono associati valori unici di una grandezza, ma uno spettro di valori, a ciascuno dei quali è associata una probabilità calcolabile. Per la posizione, questo significa assenza di una traiettoria!

RIASSUNTO

Lo stato di un sistema quantistico è, in generale, caratterizzato dai valori numerici delle grandezze fisiche che lo descrivono. Per ciascuna di queste grandezze, esistono particolari stati (**autostati** o **stati propri**) in cui essa assume un ben definito valore (**autovalori** o **valori propri**). In uno stato arbitrario la grandezza fisica possiede uno spettro di valori numerici le larghezze dei quali possono talvolta essere correlati attraverso le disuguaglianze di Heisenberg.

Due o più grandezze sono compatibili (commutano) se i loro autostati coincidono; in tal caso lo stato corrispondente è caratterizzato da un autovalore di ciascuna grandezza, le cui dispersioni sono simultaneamente nulle.

Va notata la natura radicale del cambiamento dalla meccanica classica dove ogni grandezza fisica può essere descritta matematicamente da una funzione del tempo avente un unico valore numerico.

UN CAPITOLO APPENA ACCENNATO...

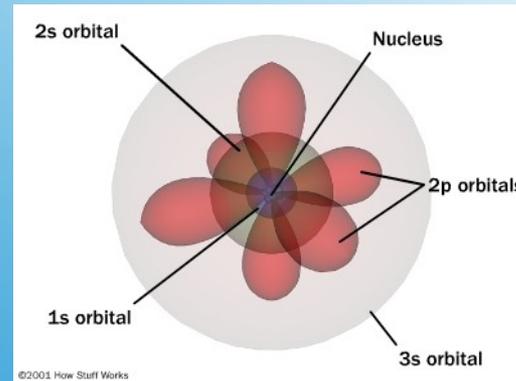
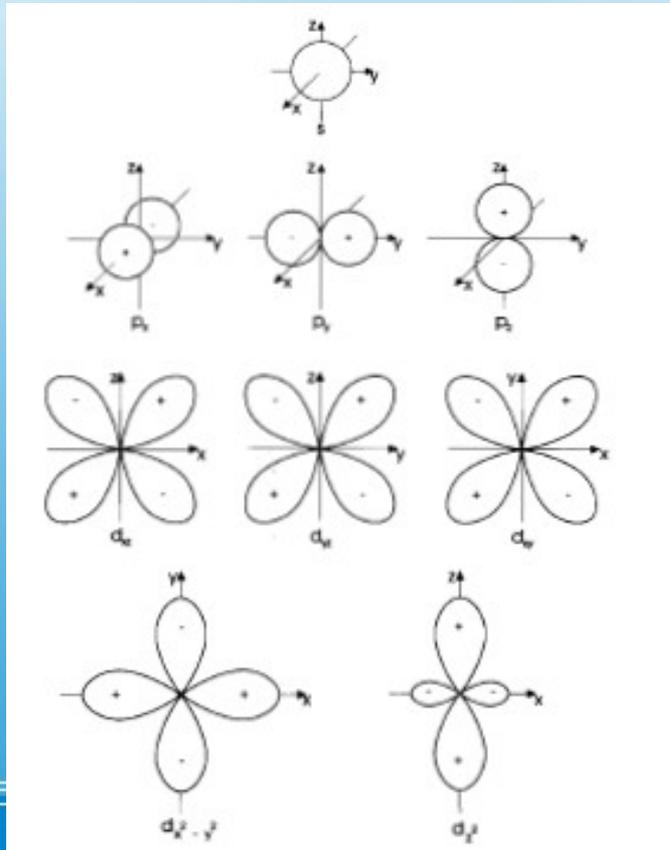
Qual è il modo quantistico di descrivere il comportamento effettivo di un sistema, compresa la sua evoluzione temporale? Il linguaggio formale richiederebbe una lezione a parte,....limitiamoci a citare ciò che tutti conoscono almeno per nome, la famigerata **funzione d'onda**, che può essere ricavata analiticamente o calcolata numericamente a partire da una specifica equazione che sostituisce quelle della fisica classica: l'**equazione di Schrödinger**.

Un sistema quantistico è intrinsecamente governato da leggi che devono tenere conto di una natura probabilistica dei fenomeni.

La funzione d'onda di un sistema quantistico va interpretata come una grandezza che esprime l'ampiezza di probabilità di trovare il sistema in un intorno di una posizione dello spazio: il suo modulo quadro diventa la densità di probabilità di posizione.

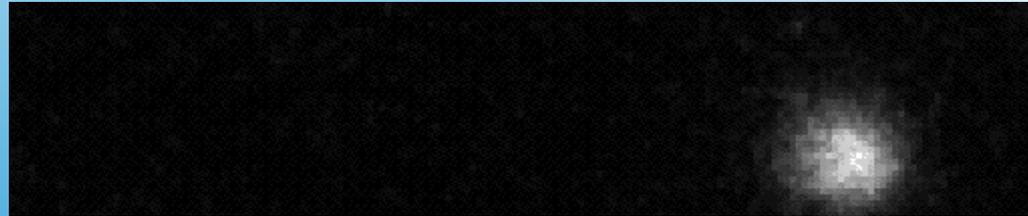
MODELLI ATOMICI

Quantum mechanics



MODELLI ATOMICI

Quantum mechanics



FAMOLO STRANO

Quantum mechanics

$$e^2 = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0}$$

$$[e^2] = [F r^2] = [M L^3 T^{-2}]$$

$$[h] = [M L^2 T^{-2} \times T] = [M L^2 T^{-1}] = [MLT^{-1} \times L]$$

FAMOLO STRANO

Quantum mechanics

$$E = \frac{m_e e^4}{\hbar^2} = 27.2 \text{ eV} = 2 E_{\text{ionizzazione}}$$

$$a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} = 0.53 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$v_e = \frac{e^2}{\hbar} = 2 \cdot 10^6 \text{ m/s} \approx \frac{c}{100}$$

UN ALTRO CAPITOLO...

Relativistic Quantum mechanics

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137}$$

costante di struttura fine