ESERCIZI DI MECCANICA QUANTISTICA

B.Buonaura : ISIS "ALBERTINI" –NOLA (NA) & GSF-AIF[1] -

Esercizio 16 (*Atomo di Bohr*)

Lo spettro dell'atomo di H mostra solo righe di lunghezze d'onda λ ben determinate. Lo spettro di emissione (o, equivalentemente, di assorbimento) dell'atomo di H è, infatti, uno spettro di righe.

Per l'atomo di H, infatti (come è mostrato dalla figura), nel visibile vi sono solo 3 righe: rossa, blu, violetta. Tuttavia la serie prosegue nell'UV (ultravioletto) vicino.

Balmer (1885) e Rydberg (1890) avevano trovato una formula semplicissima per riprodurre accuratamente la lunghezza d'onda dell'H nel visibile:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n \geq 3\,,\, n \in \mathbb{N}$$

con $R_H = 10967.576\ cm^{-1}$ detta costante di Rydberg.

In anni successivi vennero scoperte altre "serie" dell'idrogeno:

a) serie di Lyman (1906) nell'UV:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{1^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n \geq 2\,,\, n \in \mathbb{N}$$

b) serie di Paschen (1908) nell'IR:

$$\frac{1}{\lambda} = R_H\left(\frac{1}{3^2} - \frac{1}{n^2}\right) \qquad n \geq 4,\, n \in \mathbb{N}$$

Niels Bohr fu il primo che riuscì (~ 1910) a formulare un modello dell'atomo di H adeguato che spiegasse le "serie" delle righe di emissione (o assorbimento). Il suo modello è basto su 4 postulati:

1) Esistono orbite di equilibrio stabile (*orbite stazionarie*) percorrendo le quali l'elettrone *non irradia* nonostante sia continuamente accelerato.
2) Le leggi cui obbedisce l'elettrone, su una qualsiasi orbita stazionaria, sono quelle della fisica classica inclusa l'attrazione coulombiana.
3) E' possibile limitarsi ad *orbite circolari*. Quelle stazionarie sono caratterizzate da un momento angolare perpendicolare al piano (x,y) dell'orbita:

$$\vec{L} = n\hbar\hat{z} \quad n \in \mathbb{N}$$

[1] Gruppo di Storia della Fisica- Associazione per l'Insegnamento della Fisica.

con $\hbar = \dfrac{h}{2\pi} = 1.05457 \times 10^{-34}\, J \cdot s$.

4) Un elettrone può "*saltare spontaneamente* " da un orbita stazionare all'altra di energia inferiore. Quando ciò accade viene emessa radiazione di frequenza:

$$\nu = \frac{E_{n'} - E_n}{h} \quad n' > n$$

dove $E_{n'}$ ed E_n sono le energie totali delle orbite stazionarie n' ed n.

Mostrare che, utilizzando i precedenti 4 postulati, si ottiene:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e Z e^2} \equiv \text{raggio dell'n-esima orbita stazionaria}$$

$$\omega_n = \frac{1}{n^3} \frac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^3} \equiv \text{frequenza angolare sull'n-esima orbita stazionaria}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2} \equiv \text{Energia totale dell'n-esima orbita stazionaria}$$

$$\frac{1}{\lambda_{n'n}} = \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi c \hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right) \equiv \text{Formula di Rydberg}$$

con Z ≡ carica positiva del nucleo (per l'idrogeno Z =1); e ≡ valore assoluto della carica dell'elettrone; m_e ≡ massa dell'elettrone. Le formule sono date nel sistema CGS

Risoluzione

La forza coulombiana (attrattiva) che agisce sull'elettrone da parte del nucleo è data da:

$$\vec{F} = -\nabla U = -\nabla \left(-\frac{Ze^2}{r} \right) = -\frac{Ze^2}{r^2} \hat{r}$$

dove il versore r è diretto dal nucleo verso l'elettrone. Essa è una forza centrale, per cui si conserva il momento angolare dell'elettrone, comportando che la sua orbita sia piana.

E' utile quindi usare le coordinate polari r, θ per individuare la generica posizione dell'elettrone sull'orbita:

$$\vec{r}(t) = r \cos\vartheta \hat{x} + r \sin\vartheta \hat{y}$$

Per la velocità si ha subito:

$$\vec{\mathrm{v}}(t) = \dot{\vec{r}} = \left(\dot{r} \cos\vartheta - r\dot{\vartheta} \sin\vartheta \right) \hat{x} + \left(\dot{r} \sin\vartheta + r\dot{\vartheta} \cos\vartheta \right) \hat{y}$$

L'energia cinetica T dell'elettrone è:

$$T = \frac{1}{2} m_e \mathrm{v}^2 = \frac{1}{2} m_e \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 \right)$$

Pertanto la lagrangiana $\mathcal{L}$ dell'elettrone è:

$$\mathcal{L} = T - U = \frac{1}{2} m_e \left(\dot{r}^2 + r^2 \dot{\vartheta}^2 \right) + \frac{Ze^2}{r}$$

Una prerogativa delle equazioni di Lagrange è quella di valere in ogni sistema di coordinate. quindi anche nele sistema delle coordinate polari:

$$\begin{cases} \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{r}} \right) - \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial r} = 0 \\ \dfrac{d}{dt}\left(\dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\theta}} \right) - \dfrac{\partial \mathcal{L}}{\partial \theta} = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} m_e \ddot{r} - m_e r \dot{\vartheta}^2 + \dfrac{Ze^2}{r^2} = 0 \\ m_e r^2 \dot{\vartheta} = \mathrm{cost}\,ante \Rightarrow \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = m_e r^2 \dot{\vartheta} \hat{z} = \cos\tan te \end{cases}$$

Se le orbite sono circolari:

$$\dot{r} = 0 \Rightarrow r = \cos\tan te \Rightarrow \dot{\vartheta} = \cos\tan te \Rightarrow \omega = \cos\tan te$$

$$m_e r \dot{\vartheta}^2 = \frac{Ze^2}{r^2} \Rightarrow m_e r^3 \omega^2 = Ze^2$$

La seconda uguaglianza non è altro che la 3^A legge di Keplero applicata al moto di un elettrone intorno al nucleo. Ciò è dovuto al fatto che la forza coulombiana, in questo caso, è attrattiva ed è una forza centrale come la forza di gravità.

L'ipotesi 3), ovvero la quantizzazione del momento angolare dell'elettrone, comporta:

$$m_e \omega r^2 = n\hbar \quad n \in \mathbb{N}$$

pertanto la precedente equazione e questa messe a sistema:

$$\begin{cases} m_e r^3 \omega^2 = Ze^2 \\ m_e \omega r^2 = n\hbar \quad n \in \mathbb{N} \end{cases}$$

forniscono:

$$\begin{cases} r_n = \dfrac{n^2 \hbar^2}{m_e Z e^2} \\ \omega_n = \dfrac{1}{n^3} \dfrac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^3} \end{cases}$$

Pertanto nel modello Bohr le orbite stazionarie hanno raggio proporzionale a n^2 e la velocità angolare invesamente proporzionale a n^3. L'orbita stazionaria più vicina al nucleo ha raggio:

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e Z e^2}$$

Pertanto il diametro dell'atomo di H è $2r_1 = 1.06 \cdot 10^{-8}$ cm, in accordo con i risultati sperimentali.

L'energia cinetica dell'elettrone sull'orbita stazionaria è:

$$T_n = \frac{1}{2} m_e \mathrm{v}_\mathrm{n}^2 = \frac{1}{2} m_e \omega_n^2 r_n^2 = \frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{1}{2} U_n$$

dove U_n è l'energia potenziale elettrica dell'elettrone sull'orbita stazionaria:

$$U_n = -\frac{Ze^2}{r_n}$$

Pertanto l'energia totale dell'elettrone sull'orbita stazionaria è:

$$E_n = T_n + U_n = -\frac{1}{2} \frac{Ze^2}{r_n} = -\frac{1}{n^2} \frac{m_e Z^2 e^4}{2\hbar^2}$$

L'energia E_n aumenta (perché diviene meno negativa) all'aumentare di n. Maggiore è la distanza dal nucleo più grande è l'energia dell'orbita stazionaria. Se $n \to \infty \Rightarrow E_n \to 0$.

Il postulato 4) ammette che l'elettrone non emette su un'orbita stazionaria, ma possa "*improvvisamente saltare*" su un'altra orbita di energia minore *emettendo* la differenza di energia ΔE sotto forma di radiazione elettromagnetica di frequenza $\nu = \dfrac{\Delta E}{h}$. Pertanto se consideriamo 2 orbite con numeri quantici n ed n' (con n'> n), la frequenza $\nu_{n'n}$ emessa sarà data da:

$$\nu_{n'n} = \frac{E_{n'} - E_n}{h} = \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi \hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

e quindi:

$$\frac{1}{\lambda_{n'n}} = \frac{\nu_{n'n}}{c} = \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi c \hbar^3} \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)$$

Questa è la formula di Rydberg, e, inserendo i dati numerici delle costanti fondamentali si trova anche la costante di Rydberg: $R_H = \dfrac{m_e Z^2 e^4}{4\pi c \hbar^3} = 109677.576 cm^{-1}$.

Commenti:

a) Tutte le serie dell'H si possono giustificare a partire dallo schema dei livelli energetici dell'atomo.
b) Piccole differenze tra i valori calcolati e misurati di λ derivano dal fatto che la massa del nucleo *non è infinita* e l'elettrone ruota attorno al centro di massa del sistema. Tuttavia si può dire che l'elettrone ruota attorno al nucleo se si utilizza la *massa ridotta*:

$$\mu = \frac{m_e M_{nuc}}{m_e + M_{nuc}}$$

c) Il modello Bohr è uno strano miscuglio di fisica classica e di ipotesi nuove che negano, per altri versi, la validità di alcuni contenuti della fisica classica. Il postulato 2 è il postulato conservatore. Quelli rivoluzionari sono 1), 3), 4).

d) Una verifica sperimentale dell'esistenza dei *livelli energetici* discreti fu fornita da Franck ed Hertz nel 1914, verifica che dimostrò la validità dell'ipotesi di Bohr.

e) Misure spettroscopiche estremamente precise, $1/10^4$, mostrarono che quelle che sembravano righe uniche, in realtà erano composte da righe vicinissime. Per spiegarle, Sommerfeld nel 1916 ammise (come nel caso dei satelliti spaziali) *orbite ellittiche stazionarie tutte con la stessa energia* purché le ellissi abbiano *los stesso asse maggiore*.

Breve Bibliografia:

F. Selleri: Dispense di ISTITUZIONI DI FISICA TEORICA, Università di Bari, Laurea in Fisica, a.a. 2001/2002

B.Buonaura : ISIS "ALBERTINI" –NOLA (NA) & GSF-AIF[2] -

Esercizio 17 (Atomo di Bohr)

Stimare la velocità dell'elettrone nello stato fondamentale (n = 1) per l'atomo di H; supponendo che l'orbita sia circolare di raggio r_1. Confrontare, poi, la velocità ottenuta con la velocità della luce nel vuoto.

Risoluzione

Sappiamo (Esercizio 16) che il raggio r_1 dell'orbita fondamentale è:

$$r_1 = \frac{\hbar^2}{m_e Z e^2}$$

nel Sistema Internazionale di misura, inserendo i dati noti per le costanti fondamentali *h*, m_e, *e*, è dato da:

$$r_1 = \left(4\pi\varepsilon_0\right)\frac{\hbar^2}{m_e Z e^2} = 5.3\times10^{-11}\,\mathrm{m}$$

con Z =1 e $4\pi\varepsilon_0 = 1{,}112650056 \cdot 10^{-10}\ \mathrm{F \cdot m^{-1}}$.

La velocità dell'elettrone nell'orbita fondamentale è data (sempre nel SI):

$$\mathrm{v}_1 = \omega_1 r_1 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}\frac{e^2}{\hbar} = 2.2\times10^{6}\,\mathrm{m/s}$$

Il valore della velocità della luce è $c = 3 \cdot 10^8$m/s, pertanto il rapporto è:

$$\frac{\mathrm{v}_1}{c} = 7.33\times10^{-3}$$

Quindi il fattore γ_1 relativistico :

$$\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{1-\frac{\mathrm{v}_1^2}{\mathrm{c}^2}}} = 1.000027$$

Pertanto $\gamma_1 \cong 1 + \frac{1}{2}\left(\frac{\mathrm{v}_1}{c}\right)^2 = 1.000027$. Quindi è un effetto del 2° ordine, pertanto il modello Bohr *non relativistico* può considerarsi coerente.

[2] Gruppo di Storia della Fisica- Associazione per l'Insegnamento della Fisica.

Esercizio 18 (Atomo di Bohr)

Calcolare l'energia di legame dell'atomo di H e la frequenza che un fotone deve avere per ionizzare l'atomo di H nello stato fondamentale (n=1).

Risoluzione

a) L'energia di legame è il lavoro che bisogna compiere per scomporre un sistema fisico nelle sue parti costituenti. In particolare è il lavoro che occorre compiere (cioè fornire energia) per separare l'elettrone dal protone (nucleo). In pratica l'energia di legame è, in valore assoluto, uguale all'energia meccanica totale dell'elettrone nello stato fondamentale (n=1), nel campo coulombiano del protone.

   L'energia totale nello stato fondamentale (esercizio 16) espressa nel S.I. è data da:

$$E_1 = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = -2.17\times10^{-18}\,J = -13.6\text{ev}$$

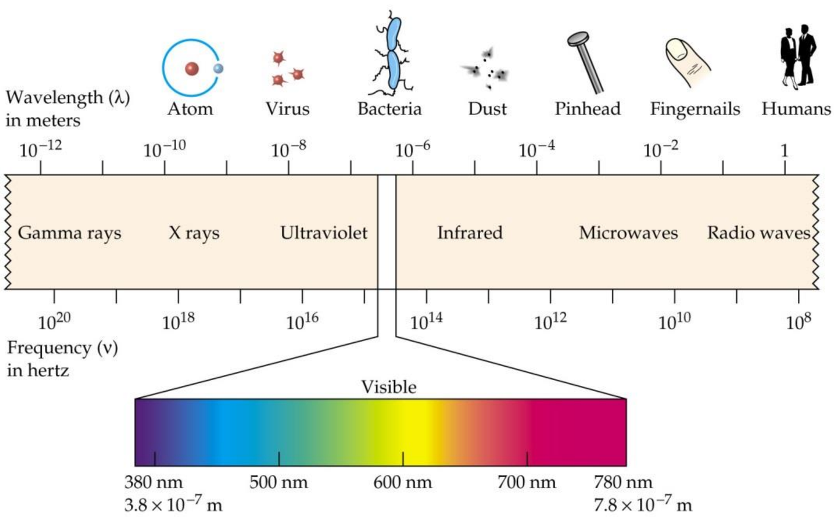
   con Z =1; n = 1; 1ev = $1.6\cdot10^{-19}$J.

   Ne segue che l'energia di legame è: E_B = + 13.6ev. Questo valore si accorda molto bene con l'energia osservata sperimentalmente.

b) Per il calcolo della frequenza basta utilizzare la relazione di Einstein per l'energia di un fotone $E_\gamma = h\nu$ ed eguagliarla ad E_B, ottenendo:

$$\nu = \frac{E_B}{h} = \frac{2.17\times10^{-18}\,J}{1.05\times10^{-34}\,J\cdot s} = 2.067\times10^{16}\,Hz$$

   frequenza che capita nella regione UV dello spettro elettromagnetico.



B.Buonaura : ISIS "ALBERTINI" –NOLA (NA) & GSF-AIF

Esercizio 19 (Atomo di Bohr)

a) Un gas è composto da atomi di H, e sono osservate, nel suo spettro di assorbimento, le righe della serie di Balmer. Si stimi la temperatura del gas.
b) L'idrogeno ordinario, H, contiene circa 1/1000 di *deuterio*, D, detto anche idrogeno pesante. Questo è idrogeno il cui nucleo contiene un protone ed un neutrone. Come la doppia massa nucleare influenza lo spettro atomico?

Risoluzione

a) Per stimare la temperatura applichiamo distribuzione di Boltzmann :

$$n(E) = Ae^{-\frac{E}{k_B T}}$$

n(E) è il numero di particelle, costituenti un sistema, che all'equilibrio termodinamico a temperatura assoluta T, possiede energia E. A è una costante moltiplicativa che dipende dal numero totale delle particelle che costituiscono il sistema; $k_B = 1.38 \cdot 10^{-23}$ J/°K ≡costante di Boltzmann. La distribuzione di Boltzmann si applica solo a particelle ad una temperatura abbastanza elevata e densità sufficientemente bassa affinché gli effetti quantistici possano essere ignorati.

Come già detto (esercizio 16), per avere le righe della serie di Balmer (in assorbimento o in emissione) bisogna che una percentuale non trascurabile di atomi di H abbia l'elettrone sul livello $n = 2$.

Pertanto detto $n(E_1)$ il numero di atomi di H che hanno l'elettrone nello stato fondamentale ($n = 1$):

$$n(E_1) = Ae^{-\frac{E_1}{k_B T}}$$

ed $n(E_2)$ il numero di atomi di H che hanno l'elettrone nello stato eccitato $n = 2$:

$$n(E_2) = Ae^{-\frac{E_2}{k_B T}}$$

risulta il rapporto:

$$\frac{n(E_2)}{n(E_1)} = \frac{e^{-\frac{E_2}{k_B T}}}{e^{-\frac{E_1}{k_B T}}} = e^{\frac{E_1 - E_2}{k_B T}}$$

Ricordando che :

$$E_1 = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_e e^4}{2\hbar^2} = -13.6\,\text{eV};\ E_2 = -\frac{1}{(4\pi\varepsilon_0)^2}\frac{m_e e^4}{8\hbar^2} = -3.39\,\text{eV}$$

si ottiene:

$$\frac{n(E_2)}{n(E_1)}=e^{\frac{-1.18\times10^5\,°\mathrm{K}}{T}}$$

Da questo risultato si vede subito che se vogliamo $n(E_2)/n(E_1) = 1/e = 0{,}368$ dobbiamo avere temperature

$T \cong 10^5$ °K. Le righe di Balmer sono realmente osservate nel gas H di alcune atmosfere stellari. Ciò permette di stimare la temperatura superficiale di quelle stelle.

b) Per il caso del deuterio, D, bisogna introdurre la massa ridotta:

$$\mu=\frac{m_e\left(m_p+m_n\right)}{m_e+\left(m_p+m_n\right)}$$

e sostituirla, nelle equazioni dell'esercizio 16, al posto della massa dell'elettrone, cioè:

$$m_e\to\mu$$

ottenendo:

$$\begin{cases} r_n=\dfrac{n^2\hbar^2}{\mu Ze^2} \\ \omega_n=\dfrac{1}{n^3}\dfrac{\mu Z^2e^4}{\hbar^3} \end{cases};\quad \begin{cases} E_n=-\dfrac{1}{n^2}\dfrac{\mu Z^2e^4}{2\hbar^2} \\ \dfrac{1}{\lambda_{n'n}}=\dfrac{\nu_{n'n}}{c}=\dfrac{\mu Z^2e^4}{4\pi c\hbar^3}\left(\dfrac{1}{n^2}-\dfrac{1}{n'^2}\right) \end{cases}$$

per cui la costante di Rydberg diviene:

$$R_{H\mu}=\frac{\mu}{m_e}R_H$$

Ora, nel caso del D:

$$\frac{\mu}{m_e}=\frac{m_p+m_n}{m_e+\left(m_p+m_n\right)}=\frac{1}{1+\dfrac{m_e}{m_p+m_n}}=\frac{1}{1+\dfrac{1}{2\times1836}}\cong1.000272$$

perché $m_p \cong m_n \cong 1836\, m_e$.

Pertanto:

$$R_{H\mu}=\frac{\mu}{m_e}R_H\cong1.000272R_H=109707\mathrm{cm}^{-1}$$

quindi $R_D > R_H$ e le righe spettrali del deuterio sono spostate verso lunghezze d'onda più corte di quelle dell'H.

Breve Bibliografia:

R. Eisberg- R. Resnick : Quantum Physics – John Wiley & Sons 1974

B.Buonaura : ISIS "ALBERTINI" –NOLA (NA) & GSF-AIF

Esercizio 20 (Atomo di Bohr)

L'elettromagnetismo classico predice che una carica elettrica in rotazione su di un'orbita circolare con frequenza angolare ω emetta radiazione elettromagnetica della stessa frequenza. Mostrare che la frequenza del fotone emesso da un elettrone dell'atomo di H, secondo il modello Bohr, che " *salta*" da un livello energetico E_{n+1} al livello E_n , è, per *n* molto grande, approssimativamente uguale alla frequenza del moto circolare classico corrispondente a quell'energia.

Risoluzione

La frequenza del fotone emesso (esercizio 15) è:

$$\nu_{n+1,n} = \frac{E_{n+1} - E_n}{h} = \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2}\right)$$

cioè, sviluppando la parentesi per *n* molto grande:

$$\nu_{n+1,n} = \frac{m_e Z^2 e^4}{4\pi\hbar^3}\left(\frac{2n+1}{n^2(n+1)^2}\right) \simeq \frac{m_e Z^2 e^4}{2\pi\hbar^3 n^3}$$

D'altra parte la frequenza angolare dell'elettrone è:

$$\omega_n = \frac{1}{n^3}\frac{m_e Z^2 e^4}{\hbar^3}$$

cioè:

$$\nu_n = \frac{\omega_n}{2\pi} = \frac{m_e Z^2 e^4}{2\pi n^3 \hbar^3} \simeq \nu_{n+1,n}$$

La coincidenza con la fisica classica consiste nell'identità (nel limite di grandi *n*) delle righe emesse da un oscillatore carico armonico classico e da un gran numero di atomi di H. Resta la differenza comunque, perché un atomo che si diseccita emette un solo fotone (e contribuisce ad una sola riga), mentre l'oscillatore emette *contemporaneamente su tutte le righe*, cioè produce la frequenza fondamentale e le armoniche superiori.
Nel limite di grandi *n* il modello di Bohr viene a coincidere con la descrizione classica. Un generatore di onde radio, per esempio, emette onde elettromagnetiche. aventi la stessa frequenza del movimento periodico degli elettroni nell'antenna, ma emette anche sempre un po' di armoniche superiori, perché è impossibile rendere perfettamente armonico il movimento degli elettroni. Questa coincidenza è la forma più semplice e più nota di *corrispondenza* fra teoria quantistica e fisica classica. Si dice che il modello di Bohr "*soddisfa il principio di corrispondenza*".

Breve Bibliografia:

F. Selleri: Dispense di ISTITUZIONI DI FISICA TEORICA, Università di Bari, Laurea in Fisica, a.a. 2001/2002