

ESERCIZI DI MECCANICA QUANTISTICA

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

Esercizio 26 (Principio di Corrispondenza: Righe Spettrali)

Secondo M. Jammer << C'è stata raramente nella storia della Fisica una teoria che abbia dovuto tanto ad un principio quanto la Meccanica Quantistica ha dovuto al Principio di Corrispondenza >>.

Ciò è confermato anche da Bohr << L'intero apparato della MQ può essere considerato una formulazione precisa di quanto potenzialmente è contenuto nel Principio di Corrispondenza >>, da Heisenberg che scrive << Per la derivazione dello schema matematico della teoria quantistica sono disponibili due fonti: i fatti sperimentali ed il principio di corrispondenza che postula una dettagliata analogia fra teoria quantistica e la teoria classica. >>, infine da Born il quale afferma << Jordan ed io vedevamo nella MQ nostra e di Dirac un'applicazione del Principio di Corrispondenza >>.

Un modo di enunciare il Principio di Corrispondenza (PdC) è il seguente: "il risultato di una teoria quantistica si avvicina tanto più al risultato classico quanto più grande è il numero quantico." Nel problema 20 abbiamo mostrato proprio un esempio del PDC, relativamente all'atomo di Bohr, che utilizzava il precedente enunciato; tuttavia il miglior modo di rendersi conto cosa sia il PDC e vederlo applicato.

Che cosa sia esattamente il PdC lo si capirà meglio eseguendo i prossimi esercizi, tuttavia, il PdC è centrato sul rapporto fra la vecchia teoria (meccanica ed elettromagnetismo classico), inadeguata e da superare, e la nuova teoria in costruzione (meccanica quantistica).

In questo esercizio si prenderà in considerazione l'intensità delle righe spettrali emesse a seguito di una transizione fra livelli energetici. In questo caso, non esiste una formula empirica per le intensità, tipo quella di Balmer per le frequenze, che possa suggerire i postulati su cui basare la parte mancante della teoria. Il punto di partenza è sempre la fisica classica. Sia $x(t)$ è la posizione della carica oscillante e , l'intensità I della radiazione emessa è proporzionale al

quadrato dell'accelerazione $a = \frac{d^2 x(t)}{dt^2}$ (approssimazione di dipolo, corretta quando, come nel caso della luce visibile, la lunghezza d'onda $\lambda \cong 10^{-5}$ cm è molto maggiore del raggio atomico $r_a \cong 10^{-8}$ cm):

$$I = \frac{2e^2}{3c^3} \langle a^2 \rangle.$$

con $\langle a^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T a^2 dt \equiv$ valor medio temporale dell'accelerazione della carica.

- a) Se $x(t) = \sum_{k=0}^{\infty} C_n \cos(2\pi kvt + 2\pi a_k)$ è lo sviluppo in serie di Fourier della posizione della carica e v la frequenza di oscillazione, dimostrare che l'intensità I della radiazione emessa è:

$$I = \frac{e^2}{3c^3} \sum_{k=1}^{\infty} (2\pi)^4 (kv)^4 C_k^2$$

- b) Argomentare come, utilizzando il PdC (e proprio questo fece Bohr), si può scrivere l'intensità della radiazione emessa nella transizione dal livello n al livello m .

Risoluzione

Lo studio delle frequenze emesse non bastava a Bohr. Infatti, egli che cercava, sulla base del PdC, una teoria completa che fosse una naturale generalizzazione della teoria classica. Egli voleva quindi risolvere il problema delle intensità delle righe spettrali, problema tutt'altro che semplice; si pensi che non esiste una formula empirica per le intensità, tipo quella di Balmer per le frequenze, che suggerisca e orienti i postulati su cui basare la parte mancante della teoria.

- a) Ricordiamo che ogni atomo di Bohr emetteva una sola frequenza, quindi l'insieme di un gran numero di atomi in diversi livelli di eccitazione, si comporta come un oscillatore anarmonico (oscillatore che compie un moto periodico (ma non sinusoidale) di frequenza ν ben definita e ha posizione sviluppabile in serie di Fourier) che emette tutte le frequenze contemporaneamente.

Se $x(t) = \sum_{k=0}^{\infty} C_k \cos(2\pi k\nu t + 2\pi a_k)$ è la posizione di un oscillatore anarmonico con carica e che

compie un moto periodico di frequenza ν (e quindi di periodo $T = 1/\nu$), la sua accelerazione è data da:

$$a = \frac{d^2 x(t)}{dt^2} = \sum_{k=1}^{\infty} \left[-(2\pi)^2 (k\nu)^2 C_k \cos 2\pi(k\nu t + a_k) \right]$$

la sommatoria parte da 1, mentre partiva da 0 nella espressione di $x(t)$, questo è un effetto dell'operazione di derivazione.

Ora il quadrato dell'accelerazione della carica oscillante risulta essere:

$$a^2 = \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \left[-(2\pi)^2 (k\nu)^2 C_k \cos 2\pi(k\nu t + a_k) \right] \right\}^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \left[(2\pi)^4 (k\nu)^4 C_k^2 \cos^2 2\pi(k\nu t + a_k) \right] + \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \left[-(2\pi)^2 (k\nu)^2 C_k \cos 2\pi(k\nu t + a_k) \right] \right\} \left\{ \sum_{k'=1}^{\infty} \left[-(2\pi)^2 (k'\nu)^2 C_{k'} \cos 2\pi(k'\nu t + a_{k'}) \right] \right\}_{k \neq k'}$$

Calcolando il valore medio nel tempo di a^2 troviamo:

$$\langle a^2 \rangle = \frac{1}{T} \int_0^T a^2 dt = \sum_{k=1}^{\infty} \left[(2\pi)^4 (k\nu)^4 C_k^2 \frac{1}{T} \int_0^T \cos^2 2\pi(k\nu t + a_k) dt \right] + \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{k'=1}^{\infty} \left[(2\pi)^4 (k\nu)^4 C_k C_{k'} \frac{1}{T} \int_0^T \cos 2\pi(k\nu t + a_k) \cos 2\pi(k'\nu t + a_{k'}) dt \right] \right\}_{k \neq k'}$$

Ora:

$$\frac{1}{T} \int_0^T \cos^2 2\pi(k\nu t + a_k) dt = \frac{1}{2} \text{ per } k \in \mathbb{N}$$

$$\frac{1}{T} \int_0^T \cos 2\pi(k\nu t + a_k) \cos 2\pi(k'\nu t + a_{k'}) dt = 0 \text{ per } k \in \mathbb{N}; k' \in \mathbb{N}$$

Ne segue che:

$$a^2 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} \left[(2\pi)^4 (k\nu)^4 C_k^2 \right]$$

pertanto l'intensità della radiazione emessa dall'oscillatore anarmonico su tutte le frequenze $k\nu$ è data da:

$$I = \frac{2e^2}{3c^3} \langle a^2 \rangle = \frac{e^2}{3c^3} \sum_{k=1}^{\infty} \left[(2\pi)^4 (k\nu)^4 C_k^2 \right]$$

b) Dal risultato ottenuto si evince che il contributo della radiazione di frequenza $k\nu$ all'intensità I è ovviamente:

$$I_{k\nu} = \frac{e^2}{3c^3} (2\pi)^4 (k\nu)^4 C_k^2$$

da cui si vede che classicamente il quadrato del coefficiente C_k dello sviluppo in serie della posizione della carica oscillante determina l'intensità della radiazione emessa. Se assumiamo che la fisica classica determina il corretto comportamento delle proprietà della radiazione nel limite dei grandi numeri $n \gg |n - m = k|$ allora vi è connessione fra le *ampiezze delle vibrazioni armoniche* C_n e le *probabilità di transizione fra stati con $n - m = k$* , e che questa connessione sia di natura generale; pertanto anche per *piccoli valori* di n , C_n è una misura della probabilità di transizione.

Quindi, l'intensità delle righe emesse è data da:

$$I_{n \rightarrow m} = \frac{e^2}{3c^3} (2\pi)^4 [(n - m)\nu]^4 C_{n-m}^2$$

per valori arbitrari (quindi anche piccoli di n ed m): *<< sebbene questa stima diventa tanto più incerta quanto più piccoli sono i valori dei numeri quantici >>*(Bohr).

Bohr, infatti, era consapevole del fatto che questa ipotesi, secondo la quale la fisica classica possa essere usata per il calcolo delle intensità anche per bassi numeri quantici, non è lecita perché porta a risultati errati per le frequenze (vedere le conclusioni per l'atomo d'idrogeno). E' un tentativo fatto in mancanza di meglio!

N.B. Ancora una volta, mentre è ammessa la validità delle leggi classiche della meccanica per gli stati stazionari, non ammessa la validità dell'elettrodinamica classica. Infatti, se fosse valida l'elettrodinamica classica, una carica classica che si muove periodicamente emetterebbe un sistema di righe con frequenza $\nu_{class} = k\nu$, tuttavia le *frequenze osservate* sono:

$$\nu(n, m) = \frac{E(J') - E(J)}{h}$$

dove $E(J')$ ed $E(J)$ sono le energie dei due livelli fra i quali avviene la transizione e sui quali i *parametri azione* (aree racchiuse delle "traiettorie" nello spazio delle fasi della carica oscillante) J e J' valgono: $J' = nh$ e $J = mh$, con $n > m$. Se n ed m sono livelli molto vicini (e molto grandi: $\cong 10^3 \div 10^4$ e $n - m < 10$) risulta:

$$E(J') \cong E(J) + (J' - J) \frac{dE(J)}{dJ}$$

In generale (come visto per l'atomo di Bohr, per l'oscillatore armonico, ecc.):

$$\frac{dE(J)}{dJ} = \nu$$

quindi:

$$E(J') - E(J) \cong (n - m)\nu h$$

quest'ultimo risultato inserito nel precedente delle frequenze osservate permette di concludere:

$$\nu(n, m) = (n - m)\nu$$

In questo limite è così riprodotta la situazione classica perché viene emessa la frequenza fondamentale del movimento meccanico ν ed i suoi multipli interi ($n - m = k$ è positivo).

Breve Bibliografia:

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

ESERCIZI DI MECCANICA QUANTISTICA

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

Esercizio 27 (Principio di Corrispondenza: Einstein e le probabilità di transizione)

Questo esercizio mostra come utilizza Einstein il Principio di Corrispondenza (PdC) per ottenere una *nuova* derivazione della formula del Corpo Nero di Planck.

Sia un gas a temperatura T costituito da atomi che possono esistere negli stati stazionari $S_1, S_2, \dots, S_\ell, \dots$ con le energie rispettive $E_1, E_2, \dots, E_\ell, \dots$.

L'abbondanza degli atomi in uno degli stati, ad esempio S_ℓ , è data da:

$$W_\ell = C n_\ell e^{-\frac{E_\ell}{kT}}$$

con C costante di normalizzazione e n_ℓ numero degli stati con la *stessa energia* (degenerazione). La formula di W_ℓ può essere derivata dal principio di Boltzmann oppure per via puramente termodinamica, essa è l'espressione della generalizzazione più completa della legge della distribuzione delle velocità di Maxwell. Einstein assume che la relazione per W_ℓ sia valida anche in meccanica quantistica.

Siano due stati generici S_1 e S_2 , con energie $E_2 > E_1$. Ogni atomo è capace di effettuare le transizioni:

$$\begin{aligned} S_2 &\rightarrow S_1 \text{ con emissione di energia } \Delta E_{21} = E_2 - E_1 \\ S_1 &\rightarrow S_2 \text{ con assorbimento di energia } \Delta E_{12} = E_1 - E_2 \end{aligned}$$

Si assuma, con Einstein, che:

- $S_1 \rightarrow S_2$: *assorbimento di energia* sotto l'azione di una radiazione di densità $u(\nu, T)$.
La *probabilità* che questo evento accada nell'intervallo di tempo dt è $dw_{1\rightarrow 2} = B_{1\rightarrow 2} u(\nu, T) dt$ con $B_{1\rightarrow 2} > 0$.
- $S_2 \rightarrow S_1$: *emissione di energia stimolata* dall'azione della radiazione di densità $u(\nu, T)$.
La *probabilità* che questo evento accada nell'intervallo di tempo dt è $dw_{2\rightarrow 1} = B_{2\rightarrow 1} u(\nu, T) dt$ con $B_{2\rightarrow 1} > 0$.
- $S_2 \rightarrow S_1$: *emissione spontanea di energia*.
La *probabilità* che questo evento accada nell'intervallo di tempo dt è $dw'_{2\rightarrow 1} = A_{2\rightarrow 1} dt$ con $A_{2\rightarrow 1} > 0$.

Infatti, Hertz aveva dimostrato che un oscillatore carico emette energia, che sia sollecitato oppure no da un campo esterno (*emissione spontanea*). Se poi l'oscillatore è sottoposto all'azione di un campo esterno periodico avente la *stessa frequenza* (onda elettromagnetica), il moto dell'oscillatore è amplificato, con emissione di energia (*emissione stimolata*), oppure smorzato, con assorbimento di energia, dipendendo ciò dalla fase relativa dei movimenti periodici e campo.

Ancora una volta viene meno la validità dell'elettrodinamica classica, infatti, queste assunzioni *non sono deducibili matematicamente* dalle Equazioni di Maxwell, tuttavia esprimono in termini *probabilistici* i tre tipi di interazioni di Hertz fra oscillatore classico e campo elettromagnetico.

Mostrare che la particolare funzione $u(\nu, T)$ che lascia inalterata la distribuzione W_ℓ , anche in presenza di transizioni $S_1 \rightarrow S_2$ e $S_2 \rightarrow S_1$, è quella di Planck:

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

Risoluzione

Sia N_{tot} il numero totale di atomi, se $dN_{1 \rightarrow 2} = N_{tot} W_1 dw_{1 \rightarrow 2}$ è il numero di atomi che compiono la transizione $S_1 \rightarrow S_2$ (assorbimento di energia sotto l'azione di una radiazione di densità $u(\nu, T)$) nel tempo dt e $dN_{2 \rightarrow 1} = N_{tot} W_2 (dw_{2 \rightarrow 1} + dw'_{2 \rightarrow 1})$ è il numero di atomi che compiono la transizione $S_2 \rightarrow S_1$ (emissione di energia stimolata dall'azione della radiazione di densità $u(\nu, T)$ \vee emissione spontanea di energia) nel tempo dt allora in condizioni di *equilibrio stazionario*:

$$dN_{1 \rightarrow 2} = dN_{2 \rightarrow 1}.$$

Pertanto, eliminando i fattori N_{tot} e dt :

$$p_1 e^{\frac{E_1}{kT}} B_{1 \rightarrow 2} u(\nu, T) = p_2 e^{\frac{E_2}{kT}} [A_{2 \rightarrow 1} + B_{2 \rightarrow 1} u(\nu, T)]$$

Poiché l'energia tende ad equipartirsi sui vari gradi di libertà, se $T \rightarrow \infty$ tende all'infinito l'energia cinetica degli atomi (energia termica) e una frazione costante di questa energia si trasformerà in radiazione elettromagnetica quindi anche $u(\nu, T) \rightarrow \infty$ pertanto:

$$\lim_{T \rightarrow \infty} \left[p_1 e^{\frac{E_1}{kT}} B_{1 \rightarrow 2} u(\nu, T) \right] = \lim_{T \rightarrow \infty} \left\{ p_2 e^{\frac{E_2}{kT}} [A_{2 \rightarrow 1} + B_{2 \rightarrow 1} u(\nu, T)] \right\}$$

cioè:

$$p_1 B_{1 \rightarrow 2} = p_2 B_{2 \rightarrow 1}$$

quindi possiamo ricavare:

$$u(\nu, T) = \frac{\frac{A_{2 \rightarrow 1}}{B_{2 \rightarrow 1}}}{e^{\frac{E_2 - E_1}{kT}} - 1}$$

Usando nuovamente il PdC si può assumere (con Einstein) che la legge di Wien (ottenuta combinando l'elettrodinamica classica con la termodinamica) sia applicabile in meccanica quantistica. Quindi:

$$u(\nu, T) = \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right)$$

ottenendo:

$$\frac{A_{2 \rightarrow 1}}{B_{2 \rightarrow 1}} = \alpha \nu^3 e^{-\frac{E_2 - E_1}{kT}} = \alpha \nu^3 e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

con α costante.

Infine, sempre usando il Principio di corrispondenza, assumiamo (con Einstein) che per $\frac{v}{T} \rightarrow 0$ valga la legge di Rayleigh – Jeans e quindi

$$u(\nu, T) \xrightarrow{\nu/T \rightarrow 0} \frac{\alpha}{h} k\nu^2 T = \frac{8\pi}{c^3} kT\nu^2$$

Ciò permette finalmente di scrivere la formula di Planck:

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

purché h sia identificata con la *costante di Planck*.

Questo fondamentale risultato di Einstein (1917) fu decisivo nel gettare le basi della nuova fisica quantistica, soprattutto perché *considerazioni strettamente probabilistiche* venivano organicamente introdotte per la prima volta nella fisica atomica.

Breve Bibliografia:

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

ESERCIZI DI MECCANICA QUANTISTICA

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

Esercizio 28 (Einstein ed il calore specifico dei solidi)

Nel 1819 Dulong e Petit osservarono sperimentalmente che i calori specifici tutti i solidi semplici (Cu, Fe, Al, Si,...) avevano la stessa espressione e uguale a:

$$c_p = c_v = 3R \cong 6 \text{ calorie/gradi mole}$$

ed analogamente per i composti (NaCl, AgCl, Fe₂, O₃...)

$$c_p = c_v = 3nR$$

dove $n \equiv$ numero di atomi della molecola del solido ed $R = 1.987 \text{ calorie/gradi mole} \equiv$ costante universale dei gas.

Questa legge empirica trovò una giustificazione teorica solo nel 1871 grazie all'interpretazione statistica di Boltzmann.

a) Un solido, infatti, può essere pensato come costituito da un insieme di atomi che oscillano attorno alla loro posizione di equilibrio. Utilizzando il teorema classico di equipartizione giustificare la legge di Dulong e Petit. Tuttavia, verso la fine dell'800 furono disponibili strumenti e mezzi tecnici per sperimentare a bassa temperatura, si scoprì che i calori specifici di tutte le sostanze misurate assumevano al diminuire della temperatura valori minori di quelli richiesti dalla regola di Dulong e Petit, stabilita a temperatura ambiente.

Pertanto, il problema delle eccezioni alla regola di Dulong e Petit sui calori specifici dei solidi assunse un carattere teorico poiché era collegato alla validità generale del principio di equipartizione dell'energia. Einstein pensò di utilizzare per l'energia media di un atomo l'espressione quantistica di Planck (Esercizio 4), invece di quella data dal principio di equipartizione dell'energia.

- b) Nel modello di Einstein ciascun atomo del solido può essere considerato come un oscillatore armonico semplice che oscilla attorno alla posizione di equilibrio dove la sua energia potenziale ha un minimo. Tutti gli atomi del solido oscillano con la stessa frequenza ν . Inoltre ciascun atomo può vibrare nelle 3 direzioni spaziali, quindi il solido, contenente un numero totale N di atomi, è pensato come un insieme di $3N$ oscillatori armonici. Trovare l'energia interna U del solido funzione della sua temperatura assoluta T .
- c) Trovare l'espressione per il calore specifico C_v del solido dandone un'espressione per le alte e basse temperature.
- d) Trovare l'espressione per l'entropia del solido dandone un'espressione per le alte o le basse temperature.
- e) Mostrare che le frequenze di oscillazione tipiche per un solido sono: $\nu \cong 10^{12} \text{ Hz}$, e pertanto il modello di solido adottato è significativo per una temperatura $T_0 \cong 80 \text{ K}$

Risoluzione

- a) Nel caso di un oscillatore armonico unidimensionale di massa m e frequenza ν (pertanto di pulsazione $\omega = 2\pi\nu$), l'energia dell'oscillatore, espressa in funzione delle variabili q e $p = mdq/dt$ dello spazio delle fasi, è data da:

$$E(q, p) = \frac{1}{2m} (p^2 + m\omega^2 q^2)$$

ed ha una dipendenza quadratica dalle coordinate. Il *teorema di equipartizione dell'energia* (Ad ogni termine dell'Hamiltoniana di singola componente quadratico rispetto alle coordinate generalizzate compete un'energia media pari a $1/2 kT$) permette di scrivere che l'energia media di ogni oscillatore a temperatura T:

$$\langle \varepsilon \rangle = 2 \cdot \frac{1}{2} kT = kT$$

quindi assimilando il solido ad un insieme di oscillatori armonici tridimensionali, avremo un'energia interna di una mole del solido data da:

$$U(T) = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A kT = 3RT$$

con $N_A \equiv$ numero di Avogadro, $k \equiv$ costante di Boltzmann, $R = N_A k \equiv$ costante universale dei gas.

Il calore specifico molare a volume costante c_V è dato da:

$$c_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = 3R$$

che è proprio la legge di Dulong e Petit.

- b) Einstein pensò di utilizzare per l'energia media di un atomo l'espressione quantistica di Planck, invece di quella data dal principio di equipartizione dell'energia perché convinto che *“la legge per l'energia media dell'oscillatore materiale sia una conseguenza della legge di Planck dovuta all'equilibrio dinamico che si instaura tra radiazione elettromagnetica e risonatori materiali”*. Einstein era convinto che esista questo equilibrio dinamico tra campo e risonatori e quindi che anche i *“portatori di calore”* del solido debbano seguire l'analoga della legge del corpo nero, e quindi presentare un calore specifico corrispondente. In pratica se tutti gli atomi del solido scambiano energia per quanti allora Einstein propose di sostituire ad $\langle \varepsilon \rangle$ l'espressione ottenuta da Planck:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

avendo così:

$$U(T) = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

Si noti che per *alte temperature* $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$ risulta al 1° ordine:

$$U(T) = 3N_A kT \frac{\frac{h\nu}{kT}}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \cong 3N_A kT \left(1 - \frac{1}{2} \frac{h\nu}{kT} \right) = 3N_A \left(kT - \frac{1}{2} h\nu \right)$$

Da notare che lo sviluppo del primo ordine è stato compiuto sulla riscrittura dell'energia media dell'oscillatore nel modo seguente:

$$\langle \varepsilon \rangle = kT \frac{\frac{h\nu}{kT}}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \cong kT \left(1 - \frac{1}{2} \frac{h\nu}{kT} \right) = kT - \frac{1}{2} h\nu$$

che è un valore *non* corrispondente a quello classico, che prevede la *sottrazione* al valore aspettato della quantità $h\nu/2$. Poiché il valor medio dell'energia dell'oscillatore è preso dalla teoria del corpo nero di Planck, proprio la comparsa della quantità, *inaspettata*, $h\nu/2$ era stata criticata da Lorentz. Tanto è vero, che per rispondere alle critiche di Lorentz, Planck (1913) scrisse la *Teoria della radiazione termica* nella quale ora l'energia media era posta uguale a:

$$\langle \varepsilon \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} + \frac{1}{2} h\nu$$

ciò significava l'oscillatore quantistico di Planck aveva i *livelli energetici spostati tutti di una quantità $h\nu/2$* . Questo risultato comportava che l'energia scambiata tra l'oscillatore della cavità e il campo elettromagnetico nella cavità non è più $\varepsilon = nh\nu$, bensì:

$$\varepsilon = \left(n + \frac{1}{2} \right) h\nu$$

ciò vuol dire il livello energetico più basso per un oscillatore ha energia pari a $h\nu/2$.

Ciò non era sfuggito ad Einstein e l'esistenza di questa quantità additiva venne da lui interpretata come il segnale dell'esistenza di una sorta di *agitazione termica indeterminata* quando la temperatura tende a zero. (N.B.: Il principio di indeterminazione di Heisenberg fu stabilito nel 1924, mentre il lavoro sia di Planck che quello di Einstein sono del 1913)¹.

Quindi per l'energia interna totale ora risulta:

$$U = 3N_A \left(\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} + \frac{1}{2} h\nu \right)$$

L'introduzione $h\nu/2$ nell'espressione dell'energia media dell'oscillatore, comporta ora l'accordo dell'energia interna del solido con ciò che ci si aspetta classicamente ad alte temperature (da $T \geq 300K$), e cioè per

$$\frac{h\nu}{kT} \ll 1:$$

$$U(T) = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A kT = 3RT$$

come dedotto in a) facendo uso del classico teorema di equipartizione dell'energia.

A basse temperature $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$ si ha:

$$e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \cong e^{\frac{h\nu}{kT}}$$

per cui:

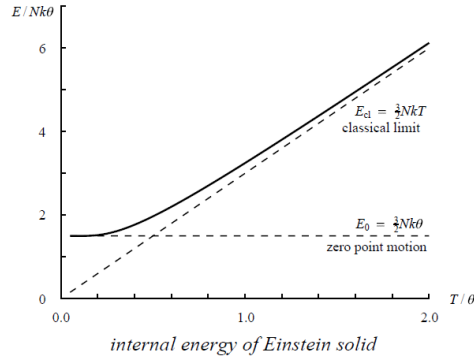
$$U(T) = 3N_A \langle \varepsilon \rangle = 3N_A h\nu \left(\frac{1}{2} + e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right)$$

¹ La quantità $h\nu/2$ è oggi chiamata *energia di punto zero* dell'oscillatore. L'introduzione di questa quantità comporta una revisione dell'interpretazione degli scambi energetici di un oscillatore. Poiché $nh\nu = kT$, diminuire T significa diminuire n il numero dei quanti scambiati, quindi, in pratica, l'energia dell'oscillatore. Tuttavia, a $T = 0K$, l'energia dell'oscillatore, proprio a causa del termine $h\nu/2$, non è nulla, né può essere scambiata dall'oscillatore con l'esterno, perché è una unità frazionaria di energia $h\nu$, e non intera.

e quindi:

$$\lim_{T \rightarrow 0} U(T) = \frac{3}{2} N_A h\nu$$

Allo zero assoluto l'energia totale del solido non è nulla!!!!



$$\theta = h\nu/k.$$

c) Il calore specifico molare a volume costante c_V è dato da:

$$c_V = \left. \frac{\partial U}{\partial T} \right|_V = \frac{\partial}{\partial T} \left[3N_A \left(\frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} + \frac{1}{2} h\nu \right) \right]_V = 3R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 \frac{e^{\frac{h\nu}{kT}}}{\left(e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1 \right)^2}$$

si noti che il termine di energia di punto zero non influisce su calcolo di c_V perché è un termine costante e nell'operazione di derivazione scompare.

Ad alte temperature $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$ ($T \geq 300\text{K}$) risulta al 1° ordine:

$$c_V = 3R$$

che è la legge di Dulong e Petit.

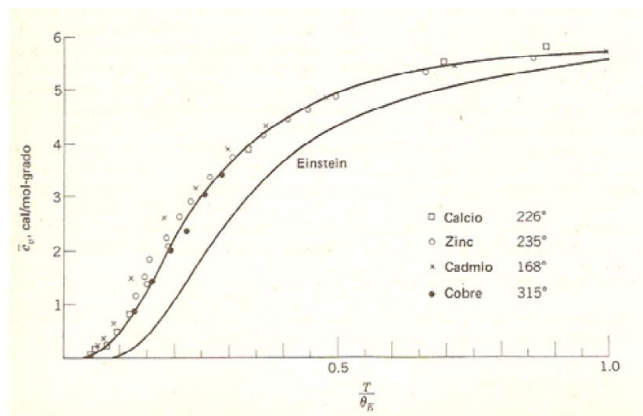
A basse temperature $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$ si ha:

$$c_V \cong 3R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

e allo zero assoluto:

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} c_V \cong \lim_{T \rightarrow 0^+} \left[3R \left(\frac{h\nu}{kT} \right)^2 e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right] = 0$$

Einstein si limitò a considerare il caso di *un'unica frequenza di oscillazione*, e questo comportò una notevole approssimazione e la curva teorica non fittava bene i dati sperimentali.



Riuscì invece, oltre ad attrarre l'attenzione di moti fisici a questo problema mostrando che, ad una determinata temperatura, varie oscillazioni possono non dare contributi e risultare inattive al fine di dare contributi al calore specifico che, comunque, dovrebbe tendere a zero allo zero assoluto.

- d) Per rispondere al presente quesito, è necessario premettere alcune nozioni e definizioni.

Particelle identiche: particelle che hanno la stessa struttura e composizione.

Particelle distinguibili: particelle, che pur essendo identiche, possono essere distinte per mezzo di qualche espediente: particelle con posizione spaziale diversa; particelle con velocità diversa; ecc.

Macrostatto di un sistema: è definito da un numero solitamente molto piccolo di parametri termodinamici, ad es. pressione, temperatura, volume specifico, energia interna, ecc.

microstatto di un sistema (compatibile con un macrostatto): stato del sistema descritto specificando lo stato, in particolare il livello energetico, di ogni componente del sistema.

Ipotesi di debole interazione: le componenti del sistema interagiscano debolmente tra loro, in modo da poter approssimare l'energia totale del sistema con la somma delle energie delle componenti. Si noti che questa interazione deve comunque esistere perché se non ci fosse interazione tra le componenti e il sistema è isolato (come si supporrà spesso), l'energia delle varie componenti non potrebbe mai variare.

Stato di equilibrio statistico: lo stato del sistema in cui i numeri di occupazione di ogni livello d'energia, cioè il numero di componenti che hanno una determinata energia, siano indipendenti dal tempo, o al limite fluttuanti intorno a dei valori medi costanti nel tempo. Si postula che la distribuzione all'equilibrio è quella con la massima probabilità di realizzazione.

Funzione di distribuzione all'equilibrio: descrive i numeri di occupazione dei vari stati del sistema in funzione dell'energia degli stati.

Assunzione fondamentale della Meccanica Statistica: in un sistema isolato tutti gli stati microscopici hanno la stessa probabilità di venir realizzati, cioè tutti i microstati corrispondenti alla stessa energia totale sono equiprobabili.²

Ora consideriamo un sistema *isolato* di N particelle (*costante*) nel quale ogni particella ha a disposizione diversi livelli energetici E_i , non necessariamente quantizzati. In un dato istante le particelle sono distribuite nei vari livelli energetici disponibili.

Sia n_i il numero di particelle sull' i -esimo livello, allora:

$$N = \sum_{i=1}^n n_i$$

inoltre l'energia totale del sistema (*conservata* perché il sistema è isolato):

$$E = \sum_{i=1}^n n_i E_i$$

² In realtà questa ipotesi non è corretta. Non è vero infatti che l'equilibrio sia caratterizzato dalla sola specificazione dell'energia. Esistono degli ulteriori vincoli (altre leggi di conservazione) che fanno sì che alcuni microstati con la stessa energia totale non siano permessi, o comunque siano meno probabili. Tuttavia, questi stati non probabili sono in numero così ridotto che se si considerano equiprobabili agli altri l'errore commesso è trascurabile.

dove si è tenuto conto dell'*ipotesi di debole interazione*. Un modo per tenere conto in qualche maniera delle interazioni consiste nel considerare un campo potenziale medio per ogni particella, dipendente esclusivamente dalle coordinate della stessa. In tal caso si ha:

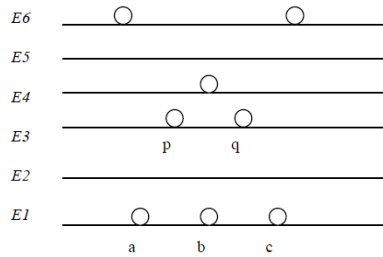
$$E_i = E_{k,i} + \langle E_{p,i} \rangle$$

con $E_{k,i} \equiv$ energia cinetica particella i -esima e $E_{p,i} \equiv$ energia potenziale particella i -esima.

Per l'*assunzione fondamentale della Meccanica Statistica*:

la probabilità di un particolare microstato (che coincide con una particolare partizione dell'insieme delle N particelle) è *proporzionale* al numero di modi differenti in cui possibile distribuire le particelle nei vari stati energetici per produrre il microstato.

Dall'*ipotesi di particelle distinguibili*³, consegue che un microstato nella quale la particella a stia in E_1 e la particella p stia in E_2 è *considerato diverso* da un microstato nella quale p stia in E_1 e a in E_2 .



Se si riempie il livello E_1 ci sono N modi diversi di scegliere la prima particella (una delle N particelle). La seconda particella può invece essere scelta in $(N-1)$ modi differenti poiché tale è il numero di particelle rimasto a disposizione. Una terza particella potrà essere scelta in $(N-2)$ modi differenti e così via. Quindi il numero totale di modi differenti per collocare *tre particelle* sul *primo livello* (vedi figura precedente) è dato da:

$$N(N-1)(N-2) = \frac{N!}{(N-3)!}$$

Si noti che un microstato è determinato solamente dal numero e dal tipo di particelle presenti in ogni stato e *indipendentemente dall'ordine* in cui queste particelle sono state messe. Quindi si tratta di dividere per il *numero delle permutazioni* di 3 oggetti distinti: $3!$ Pertanto il numero di modi diversi di posizionare tre particelle sul primo livello energetico è in realtà dato da:

$$\frac{N!}{3!(N-3)!} = \binom{N}{3}$$

In generale, il numero di modi diversi di posizionare n_1 particelle sul primo livello energetico è dato da:

$$\frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} = \binom{N}{n_1}$$

e ciò coincide con il numero di combinazioni di N oggetti presi a n_1 .

Il numero di particelle a disposizione ora per il secondo livello energetico è $N - n_1$.

Il numero di modi diversi di posizionare n_2 particelle sul secondo livello energetico è dato da:

$$\frac{(N-n_1)!}{n_2!(N-n_1-n_2)!} = \binom{N-n_1}{n_2}$$

Il procedimento può continuare finché sono stati considerati tutti i livelli energetici.

Il *numero totale* di modi diversi per ottenere il microstato $n_1, n_2, n_3, \dots, n_n$ è dato dalla moltiplicazione :

³ Gli atomi nel modello del solido di Einstein sono particelle distinguibili.

$$\frac{N!}{n_1!(N-n_1)!} \frac{(N-n_1)!}{n_2!(N-n_1-n_2)!} \frac{(N-n_1-n_2)!}{n_3!(N-n_1-n_2-n_3)!} \dots = \frac{N!}{n_1!n_2!n_3!\dots n_n!}$$

Questa quantità è proporzionale alla *probabilità per ottenere il microstato* $n_1, n_2, n_3 \dots n_n$ a meno di una costante di normalizzazione

E', inoltre, possibile che vi sia degenerazione dei livelli energetici, cioè i livelli energetici hanno probabilità differente di essere occupati (contrariamente all' *Assunzione fondamentale della Meccanica Statistica*). Ad esempio un certo livello energetico può essere più compatibile di altri livelli con più differenti valori di momento angolare, e pertanto è più facilmente occupato.

Siano:

$$g_1 \equiv \text{probab. di occupazione livello } E_1$$

$$g_2 \equiv \text{probab. di occupazione livello } E_2$$

$$g_3 \equiv \text{probab. di occupazione livello } E_3$$

.....

$$g_n \equiv \text{probab. di occupazione livello } E_n$$

se g_i è la probabilità di trovare una particella nel livello energetico E_i , la probabilità di trovare due particelle nel livello energetico E_i sarà (essendo *eventi indipendenti*) g_i^2 , allora la probabilità di trovare n_i particelle sarà:

$g_i^{n_i}$ e quindi la *probabilità* per ottenere il microstato $n_1, n_2, n_3 \dots n_n$ è dato dalla:

$$\Omega = N! \prod_{i=1}^n \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$

Oltre ad aver rimosso l'*assunzione fondamentale della Meccanica Statistica*, possiamo, volendo, rimuovere anche l'assunzione di *distinguibilità* delle particelle. Se le particelle sono *indistinguibili* significa che non si può notare una differenza se le particelle p ed a nella precedente figura (ad esempio) sono scambiate tra loro. Quindi tutte le $N!$ permutazioni tra particelle che occupano stati differenti danno origine allo stesso identico microstato. Pertanto il precedente risultato va diviso per $N!$, ottenendo perciò:

$$\Omega(n_i) = \prod_{i=1}^n \frac{g_i^{n_i}}{n_i!}$$

abbiamo commesso un abuso di notazione indicando con la stessa lettera 2 probabilità differenti.

Questa è l'espressione della probabilità di una distribuzione nella *statistica di Maxwell-Boltzmann*.

Per ottenere lo *stato di equilibrio* cerchiamo dunque il *massimo della funzione* $\Omega(n_i)$ compatibilmente con le condizioni:

$$N = \sum_{i=1}^n n_i ; E = \sum_{i=1}^n n_i E_i$$

Per trovare il massimo di $\Omega(n_i)$, troviamo equivalentemente il massimo di $\ln[\Omega(n_i)]$ essendo il logaritmo una funzione strettamente crescente.

Si ha:

$$\ln[\Omega(n_i)] = \sum_{i=1}^n [n_i \ln g_i - \ln(n_i!)]$$

Utilizzando la formula di Stirling per grandi numeri:

$$\ln(x!) \cong x \ln x - x$$

possiamo scrivere:

$$\ln[\Omega(n_i)] = \sum_{i=1}^n [n_i \ln g_i - n_i \ln(n_i) + n_i] = N - \sum_{i=1}^n n_i \ln\left(\frac{n_i}{g_i}\right)$$

Ovviamente se cerchiamo il massimo di $\ln[\Omega(n_i)]$ dobbiamo imporre:

$$d(\ln[\Omega(n_i)]) = 0$$

insieme a:

$$dN = \sum_{i=1}^n dn_i = 0$$

e

$$dE = \sum_{i=1}^n E_i dn_i = 0$$

perché sia N che E sono costanti.

Di conseguenza questo è un problema di ricerca di un punto stazionario per $\ln[\Omega(n_i)]$, *vincolato dalle due condizioni*, $N = \text{costante}$ ed $E = \text{costante}$. Dal punto di vista matematico si affronta con *il metodo dei moltiplicatori di Lagrange*: α e β tanti quante sono le condizioni vincolo.

Pertanto essendo:

$$d(\ln[\Omega(n_i)]) = -\sum_{i=1}^n \left[\ln\left(\frac{n_i}{g_i}\right) \right] dn_i = 0$$

si può scrivere:

$$\sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial \ln[\Omega(n_i)]}{\partial n_i} + \alpha \frac{\partial N}{\partial n_i} + \beta \frac{\partial E}{\partial n_i} \right] = 0$$

cioè:

$$\sum_{i=1}^n \left[\ln\left(\frac{n_i}{g_i}\right) + \alpha + \beta E_i \right] = 0$$

la quale comporta che la distribuzione di equilibrio è ottenuta se:

$$\ln\left(\frac{n_i}{g_i}\right) + \alpha + \beta E_i = 0$$

che risolta rispetto ad n_i fornisce:

$$n_i = g_i e^{-\alpha - \beta E_i}$$

α e β sono legati alle proprietà fisiche del sistema.

Da:

$$N = \sum_{i=1}^n n_i$$

si può scrivere:

$$N = \sum_{i=1}^n g_i e^{-\alpha - \beta E_i} = e^{-\alpha} \sum_{i=1}^n g_i e^{-\beta E_i} = e^{-\alpha} Z$$

dove si è introdotta la *funzione di partizione Z* (zustandsumme):

$$Z = \sum_{i=1}^n g_i e^{-\beta E_i}$$

In questo modo possiamo scrivere:

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\beta E_i}$$

Questa espressione costituisce la *legge di distribuzione di Maxwell-Boltzmann*.

La *probabilità di occupazione di uno stato* è data da:

$$\wp_i = \frac{n_i}{N} = \frac{1}{Z} g_i e^{-\beta E_i}$$

il *valor medio di una certa grandezza fisica* $G(E)$ in una miscela di stati data da questa distribuzione è dato da:

$$\langle G \rangle = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n n_i G(E_i) = \frac{1}{Z} \sum_{i=1}^n g_i G(E_i) e^{-\beta E_i}$$

Risulta pure:

$$E = \sum_{i=1}^n n_i E_i = \frac{N}{Z} \sum_{i=1}^n g_i E_i e^{-\beta E_i} = -N \frac{d \ln Z}{d \beta}$$

Ricordiamo che l'*entropia* S del sistema è definita da:

$$S = k \ln [\Omega(n_i)]$$

e la *temperatura del sistema* è definita da:

$$\frac{1}{T} = \left. \frac{\partial S}{\partial E} \right|_{V, N}$$

Ora:

$$\begin{aligned} dS &= k d \ln [\Omega(n_i)] = -k \sum_{i=1}^n \left[\ln \left(\frac{n_i}{g_i} \right) \right] dn_i = -k \sum_{i=1}^n \left[\ln \left(\frac{N}{Z} e^{-\beta E_i} \right) \right] dn_i = \\ &= -k \ln \frac{N}{Z} \sum_{i=1}^n dn_i + k \sum_{i=1}^n \beta E_i dn_i = k \beta dE \end{aligned}$$

dove è stata applicata la costanza di N , cioè:

$$dN = \sum_{i=1}^n dn_i = 0$$

Quindi:

$$k \beta = \frac{dS}{dE} = \frac{1}{T}$$

pertanto il parametro β è uguale:

$$\beta = \frac{1}{kT}$$

e anche:

$$\alpha = \ln \left(\frac{Z}{N} \right)$$

$$Z = \sum_{i=1}^n g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

$$n_i = \frac{N}{Z} g_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$$

$$E = kNT^2 \frac{d(\ln Z)}{dT}$$

$$S = kN \ln \frac{Z}{N} + \frac{E}{T} + kN$$

I risultati precedenti mostrano l'importanza della funzione di partizione Z per il calcolo di tutte le funzioni di stato del sistema.

Finalmente siamo pronti per rispondere alla domanda che chiedeva il calcolo dell'entropia del solido.

Nel caso del solido di Einstein gli atomi oscillatori sono particelle distinguibili e hanno livelli energetici che hanno uguale probabilità di essere occupati, quindi non vi è degenerazione, cioè $g_i = 1, \forall i = 1, \dots, n$, pertanto la *probabilità* per ottenere il microstato $n_1, n_2, n_3 \dots n_n$ è dato dalla:

$$\Omega(n_i) = N! \prod_{i=1}^n \frac{1}{n_i!}$$

per cui la formula per l'entropia S risulta leggermente semplificata:

$$S = kN \ln Z + \frac{E}{T}$$

in questo caso risulta:

$$E = U(T) = 3N_A \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$$

e

$$S = 3kN_A \ln Z + \frac{E}{T}$$

$$Z = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\frac{E_i}{kT}} = \sum_{i=0}^{\infty} e^{-\frac{\left(i+\frac{1}{2}\right)h\nu}{kT}}$$

essendo $N = 3N_A$ gli atomi del solido e $n \rightarrow \infty$ per il numero di livelli energetici. Ora il calcolo della funzione di partizione Z , in questo caso risulta semplice essendo il calcolo di una *serie di termini in progressione geometrica* di ragione $e^{-\frac{h\nu}{kT}} < 1$. Pertanto:

$$Z = \frac{e^{-\frac{h\nu}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}}$$

pertanto l'entropia del solido sarà:

$$S = 3kN_A \left[\ln \left(\frac{e^{-\frac{h\nu}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{h\nu}{kT}}} \right) + \frac{h\nu/kT}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} + \frac{1}{2} \frac{h\nu}{kT} \right]$$

A basse temperature $\frac{h\nu}{kT} \gg 1$ si ha:

$$S \cong 3kN_A \left(\frac{h\nu}{kT} \right) e^{-\frac{h\nu}{kT}}$$

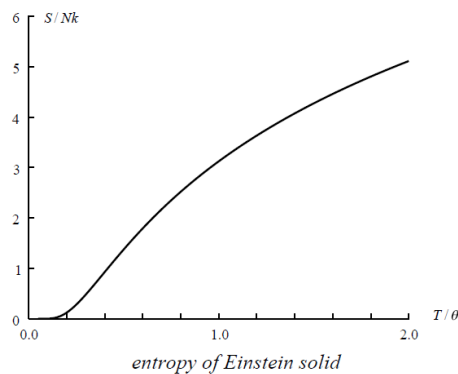
per cui:

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} S = \lim_{T \rightarrow 0^+} \left[3kN_A \left(\frac{h\nu}{kT} \right) e^{-\frac{h\nu}{kT}} \right] = 0$$

L'entropia di un solido si annulla allo zero assoluto come ci si aspetta dalla terza legge della termodinamica.

Ad alte temperature $\frac{h\nu}{kT} \ll 1$ si ha:

$$S \cong 3kN_A \left[1 + \ln \left(\frac{kT}{h\nu} \right) \right]$$



$\theta = h\nu/k$.

e) Una stima della frequenza di oscillazione del solido può farsi come segue:

La velocità del suono in un solido è: $c_s \cong 10^3 \text{ m/s}$. La tipica distanza tra gli atomi in un reticolo è: $\lambda \cong 10^{-9} \text{ m}$.

Pertanto $\nu = c_s/\lambda \cong 10^{12} \text{ Hz}$. Da $h\nu \cong kT$ risulta che il modello di solido adottato è significativo per una temperatura $T \cong h\nu/k \cong 80 \text{ K}$.

Breve Bibliografia:

- F. Selleri: Dispense di ISTITUZIONI DI FISICA TEORICA, Università di Bari, Laurea in Fisica, a.a. 2001/2002
M. Alonso, E.J. Finn : Quantum and Statistical Physics, Addison Wesley Publishing Company, 1968
L.Mihich: Meccanica Statistica Classica Appunti del corso di Termodinamica, Università di Pavia, a.a. 2014/2015
A. Garruccio : La storia – Il dibattito sull'ipotesi di Einstein, <http://www.ba.infn.it/~garuccio/didattica/fotoelettrico/homepage.htm>
Meccanica Statistica: Appunti raccolti ed elaborati da F. Grazioso e V. Barassi - 2009-2010 <http://www.fabiograzioso.net/>
R. Renzetti: LA FISICA DELLE BASSE TEMPERATURE <http://www.fisicamente.net/A/index-1784.htm>

ESERCIZI DI MECCANICA QUANTISTICA

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

Esercizio 29 (Dualità onda-corpuscolo: Corpuscoli con massa nulla. Effetto Compton)

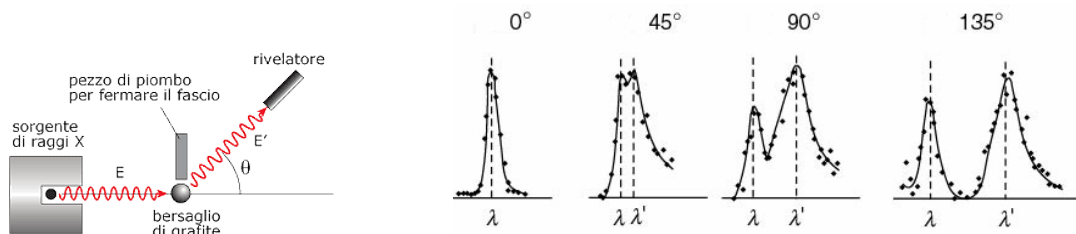
Con l'effetto fotoelettrico Einstein introdusse l'idea della *dualità* onda – corpuscolo, cioè di una *compresenza* di aspetti ondulatori e di minuscole localizzazioni energetiche in uno stesso fascio di luce. Questa idea tanto rivoluzionaria che inizialmente fu accettata da pochissimi, ma da molti dopo il 1927 sotto l'influenza della scuola di Copenaghen.

La parola *dualità* è usata nell'accezione di " *ciò che è composto di due parti* "per indicare la *scelta filosofica* (Einstein, de Broglie, Schrödinger) che si appella a due principi che si possono integrare e possono coesistere: onda o particella. In contrapposizione alla parola *dualismo* usata nell'accezione di " *contrasto, antagonismo* " per indicare la *scelta filosofica* (Bohr, Heisenberg, Born, Pauli) che si appella a due principi opposti e irriducibili: onda o particella.

Einstein, nonostante fosse isolato nel credere ai corpuscoli della radiazione e alle onde vuote, non si fece influenzare dai giudizi critici. Anzi, lavorò molto a queste sue idee tra il 1909 al 1917, riuscendo a dimostrare che tutta l'energia assorbita da un atomo o da un elettrone (nella loro interazione con la radiazione elettromagnetica) proveniva da una stessa direzione, per cui all'energia $h\nu$ doveva essere associata una *quantità di moto* $\frac{h\nu}{c}$ nella direzione di propagazione della luce.

L'esperimento Compton (1923) e quello di Compton – Simon (1925) furono quelli che *più contribuirono* a rafforzare l'idea dell'esistenza di fotoni come corpuscoli di energia $E = h\nu$ e di quantità di moto $\frac{h\nu}{c}$.

Un fascio di raggi X (onde e.m. di λ piccolissima, $\approx 10^{-10}$ m, quindi p grande, a cui corrispondono fotoni di energia $h\nu$ dell'ordine di $10^2 - 10^6$ ev) che attraversa un solido (grafite) è deviato in proporzioni diverse ai differenti angoli θ dalla direzione d'incidenza e che per ogni θ ci sono due massimi nell'intensità $I(\lambda)$ della radiazione in funzione della lunghezza d'onda λ . L'esistenza dei due massimi in λ e λ' (con $\lambda' > \lambda$) è chiamata " *Effetto Compton* ".



In particolare, Compton osservò che, sebbene la radiazione incidente fosse essenzialmente monocromatica di lunghezza d'onda λ , nella radiazione diffusa era presente una nuova lunghezza d'onda λ' che differiva da λ di una quantità funzione dell'angolo di diffusione θ : $\lambda' = \lambda + \lambda_C(1 - \cos\theta)$; λ_C è *lunghezza d'onda Compton* (λ_C è *inversamente proporzionale alla massa della particella* su cui incide il fotone). Tale risultato è in *contraddizione* con le previsioni della fisica classica⁴. Infatti, classicamente ci si aspetta che gli elettroni liberi del cristallo, sotto l'azione del campo elettrico oscillante della radiazione incidente, compiano oscillazioni della stessa frequenza e quindi emettano radiazione diffusa in tutte le direzioni, ma della stessa frequenza dell'onda incidente.

λ' è *indipendente dal materiale* su cui i raggi X incidono (piombo, oro, argento, grafite,...), ma dipende dall'angolo θ .

Il *secondo massimo* di $I(\lambda)$ nasce dall'interazione con gli elettroni la sola presumibile causa dell'effetto osservato

⁴ A questo proposito si veda: Pietro di Mauro - LA FORMULA DI DIFFUSIONE COMPTON CON LA MECCANICA NEWTONIANA - Atti del XIX Congresso Nazionale di Storia della Fisica e dell'Astronomia.

in tutti i materiali. Inoltre se λ' aumenta con θ è equivalente ad affermare che $\nu' = \frac{c}{\lambda'}$ e quindi $E' = h\nu'$ diminuiscono al crescere di θ come dovrebbe accadere all'energia di particelle che dopo un urto con bersagli immobili. Le lunghezze d'onda alle quali è apprezzabile lo shift Compton ($\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$) sono: raggi X ($\approx 1 \text{ \AA}$); raggi γ ($\approx 0.01 \text{ \AA}$).

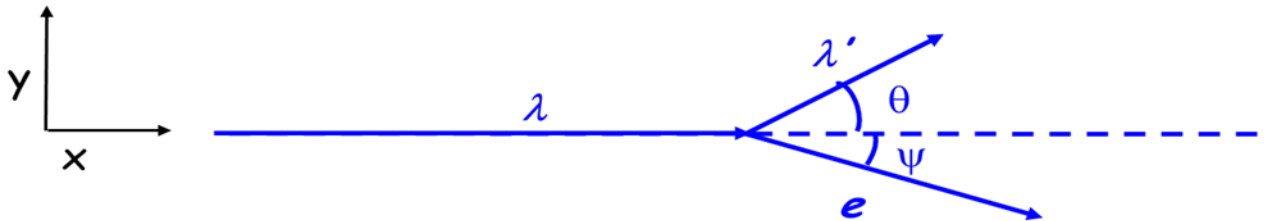
a) Applicando, come fece lo stesso Compton, i principi di conservazione dell'energia e dell'impulso in forma relativistica ad un *urto elastico* tra un *fotone* ed un *elettrone libero* trovare la formula di diffusione Compton:

$$\lambda' = \lambda + \lambda_{ce}(1 - \cos\theta)$$

b) Analizzare l'effetto fotoelettrico come un *urto anelastico* tra *fotone* ed *elettrone libero* (con assorbimento del fotone) mostrando che un elettrone libero *non può assorbire* un fotone.

Risoluzione

a) Appliciamo le regole dell'*urto elastico*, tra un fotone (di $E = h\nu$ e momento $p = h\nu/c$) e un elettrone praticamente fermo.



In Figura: $\lambda = c/\nu \equiv$ lunghezza d'onda fotone incidente; $\lambda' = c/\nu' \equiv$ lunghezza d'onda fotone diffuso

Dopo l'urto il fotone ha energia $h\nu'$ e l'elettrone $K_{cin} = m_e c^2(\gamma - 1)$ (formula relativistica con $\gamma = 1/\sqrt{1-(v/c)^2}$)

Applicando ora la *conservazione dell'energia* :

$$h\nu = h\nu' + m_e c^2(\gamma - 1) \Rightarrow h(\nu - \nu') + m_e c^2 = m_e c^2 \gamma$$

Applicando anche la *conservazione della q.d.m.* :

$$x) \quad h\nu/c = (h\nu'/c) \cos(\theta) + p_e \cos(\psi);$$

$$y) \quad 0 = (h\nu'/c) \sin(\theta) - p_e \sin(\psi)$$

cioè:

$$x) \quad h\nu/c - (h\nu'/c) \cos(\theta) = p_e \cos(\psi); \quad y) \quad (h\nu'/c) \sin(\theta) = p_e \sin(\psi)$$

Elevando al quadrato le espressioni x) ed y) e sommando membro a membro, si ottiene:

$$(h\nu/c)^2 + (h\nu'/c)^2 - 2(h\nu/c)(h\nu'/c) \cos(\theta) = p_e^2$$

moltiplicando per c^2

$$(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2(h\nu)(h\nu') \cos(\theta) = p_e^2 c^2$$

Riprendiamo la conservazione dell'energia: $h(\nu - \nu') + m_e c^2 = \gamma m_e c^2$ ed eleviamo al quadrato:

$$h^2(v - v')^2 + m_e^2 c^4 + 2h(v - v') m_e c^2 = \gamma^2 m_e^2 c^4$$

$$(hv)^2 + (hv')^2 - 2h^2 vv' + m_e^2 c^4 + 2h(v - v') m_e c^2 = \gamma^2 m_e^2 c^4$$

Sottraiamola alla conservazione della quantità di moto: $(hv)^2 + (hv')^2 - 2h^2 vv' \cos(\theta) = p_e^2 c^2$

si ottiene:

$$2h^2 vv' (1 - \cos(\theta)) - m_e^2 c^4 - 2h(v - v') m_e c^2 = -m_e^2 c^4$$

$$\text{(per l'Invariante Relativistico } E_e^2 = \gamma^2 m_e^2 c^4 = m_e^2 c^4 + p_e^2 c^2)$$

$$2h^2 vv' (1 - \cos(\theta)) = 2h(v - v') m_e c^2$$

Quindi con un po' di algebra:

$$m_e c^2 (v - v') = hvv' (1 - \cos(\theta)) \quad \Rightarrow \quad c(v - v')/vv' = (h/m_e c) (1 - \cos(\theta))$$

$$c(1/v' - 1/v) = h/(m_e c) (1 - \cos(\theta)) \quad \Rightarrow \quad (\lambda' - \lambda) = \lambda_{Ce} (1 - \cos(\theta))$$

cioè:

$$\lambda' = \lambda + \lambda_{Ce}(1 - \cos \theta)$$

con $\lambda_{Ce} = h/m_e c = 2,4263102175 \times 10^{-12} \text{ m}$ ≡ Lunghezza d'onda Compton dell'elettrone e $\lambda = c/v$ e $\lambda' = c/v'$.

Questa è la formula di Compton. Essa riproduce correttamente le osservazioni sperimentali. L'esistenza del primo massimo di $I(\lambda)$ è una naturale conseguenza delle precedenti considerazioni. Infatti i raggi X che entrano nella materia collidono anche con i nuclei, oltre che con gli elettroni. La formula che si ottiene identica

alla precedente: $\lambda' - \lambda = \frac{h}{m_{nucleo} c} (1 - \cos \theta)$, essendo $m_{nucleo} \gg m_e$ si ha $\lambda' \cong \lambda$ quindi il

massimo di $I(\lambda)$ risulta così vicino a λ da essere praticamente indistinguibile.

Nelle formule precedenti è evidente l'idea che ogni singolo fotone è *monodirezionale* e alle energie $h\nu$ e $h\nu'$

siano sempre associate le quantità di moto $\frac{h\nu}{c}$ e $\frac{h\nu'}{c}$ rispettivamente.

$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ non dipende dalla lunghezza d'onda incidente *dipende* dall'angolo di scattering θ e varia tra 0 e $2h/(m_e c)$ corrispondente a $\theta = 180^\circ$ cioè tra 0 e 0.049 \AA ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$).

L'effetto Compton sta a dimostrare che, anche al livello quantistico, al livello atomico e delle particelle elementari, si conservano rigorosamente la quantità di moto e l'energia, cosa che Bohr, ad un certo momento, stava per mettere in discussione.

Ancora più convincente da un punto di vista realista fu l'*esperimento di Compton e Simon* (1925) che prese in considerazione lo studio di eventi generati da un fascio di raggi X che interagivano con una lamina materiale posta in una *camera a nebbia*. Essi osservarono 18 eventi di emissione di elettroni secondari (poteva accadere

infatti che l'inosservato fotone propagandosi nel vapore della camera a nebbia mettesse in moto urtandolo un secondo elettrone) e il punto iniziale della traiettoria dell'elettrone secondario era sempre sulla traiettoria calcolata del fotone. Nel 1927 Compton scrisse: << Non possiamo trovare alcuna interpretazione della diffusione se non in termini di deviazioni di corpuscoli o fotoni della radiazione. >>

- b) Se si analizza l'effetto fotoelettrico come urto anelastico, assorbimento del fotone da parte dell'elettrone, quindi senza fotone dopo la collisione si vede che:

$$h\nu = m_e c^2 (\gamma - 1)$$

$$h\nu/c = p_e \cos(\psi)$$

$$0 = p_e \sin(\psi) \Rightarrow \sin(\psi) = 0 \Rightarrow \psi = 0$$

quindi:

$$h\nu/c = p_e \Rightarrow h\nu + m_e c^2 = \gamma m_e c^2 = \sqrt{(p_e c)^2 + m_e^2 c^4} = \sqrt{(h\nu)^2 + m_e^2 c^4}$$

uguaglianza ovviamente assurda. Perciò un elettrone libero non può assorbire un fotone!

Breve Bibliografia:

F. Selleri: Dispense di ISTITUZIONI DI FISICA TEORICA, Università di Bari, Laurea in Fisica, a.a. 2001/2002
 A. Sciarrino: Corso di MECCANICA QUANTISTICA Università di Napoli Federico II

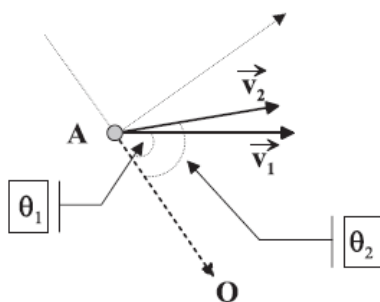
ESERCIZI DI MECCANICA QUANTISTICA

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

Esercizio 30 (Dualità onda-corpuscolo: Corpuscoli con massa nulla. Emissione con rinculo di un atomo)

Circa un anno prima dell'esperimento Compton, il 7 Giugno 1922, Erwin Schrödinger scriveva un articolo nel quale, per primo, trattava l'emissione di un quanto di luce usando la conservazione dell'energia e della quantità di moto relativistiche. Schrödinger scriveva inoltre: <<...sulla base data da Einstein alla teoria della radiazione, il quanto emesso $h\nu$ porta con sé sempre - e in particolare in ogni sistema di riferimento - l'impulso lineare $h\nu/c$, il massimo che in linea di principio possa essere associato a questo ammontare di energia. Nel seguito dimostriamo che il "salto di velocità" in tal modo per la condizione delle frequenze di Bohr dà proprio lo spostamento Doppler, e con tutte le sottigliezze che sono richieste dalla teoria della relatività.>> Sfortunatamente a quel tempo l'idea di Einstein sui quanti di luce non era ancora tenuta in seria considerazione, pertanto il lavoro cadde nell'oblio. Einstein ebbe a dire che << ...mentre la teoria ondulatoria implica l'effetto Doppler per la radiazione emessa da un atomo in movimento. . . con la condizione di Bohr, fondamentale per la teoria dei quanti, $E_2 - E_1 = h\nu_1$ che collega la variazione di energia dell'atomo alla frequenza emessa, si tende ad associare una singola frequenza ad ogni atto di emissione elementare, anche quando l'atomo che emette è in movimento.>>

Un atomo (o un nucleo) inizialmente in moto con velocità \mathbf{v}_1 , nel sistema S del laboratorio, con un angolo \mathcal{G}_1 con la direzione AO (asse x), emette un fotone di energia E_γ nella direzione AO rinculando con velocità \mathbf{v}_2 nella direzione che forma un angolo \mathcal{G}_2 con la direzione AO.



Trovare l'energia del fotone E_γ .

Risoluzione

Le equazioni di conservazione dell'energia e dell'impulso nel sistema S del laboratorio si scrivono:

$$\begin{cases} E_\gamma = \gamma_1 E_1 - \gamma_2 E_2 \\ \gamma_1 \frac{E_1}{c^2} v_1 \cos \mathcal{G}_1 = \gamma_2 \frac{E_2}{c^2} v_2 \cos \mathcal{G}_2 + \frac{E_\gamma}{c} & \text{componente impulso asse x (direz. AO)} \\ \gamma_1 \frac{E_1}{c^2} v_1 \sin \mathcal{G}_1 = \gamma_2 \frac{E_2}{c^2} v_2 \sin \mathcal{G}_2 & \text{componente impulso asse y (\perp direz. AO)} \end{cases} \quad (1)$$

con:

$$\gamma_1 = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}}; \gamma_2 = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_2^2}{c^2}}}$$

$E_1 \equiv$ energia a riposo dell'atomo (o del nucleo) prima dell'emissione

$M_1 = \frac{E_1}{c^2} \equiv$ massa dell'atomo (o del nucleo) prima dell'emissione

$E_2 \equiv$ energia a riposo dell'atomo (o del nucleo) dopo dell'emissione

$M_2 = \frac{E_2}{c^2} \equiv$ massa dell'atomo (o del nucleo) dopo dell'emissione

$\mathbf{p}_\gamma = \frac{E_\gamma}{c} \hat{\mathbf{x}} \equiv$ impulso del fotone emesso

Dalla conservazione dell'energia (prima equazione del sistema (1)) si ricava γ_2 :

$$\gamma_2 = \frac{\gamma_1 E_1 - E_\gamma}{E_2}$$

Ricordando l'espressione di γ_2 scriviamo:

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v_2^2}{c^2}}} = \frac{\gamma_1 E_1 - E_\gamma}{E_2} \Rightarrow \sqrt{1 - \frac{v_2^2}{c^2}} = \frac{E_2}{\gamma_1 E_1 - E_\gamma}$$

per cui il modulo della velocità di rinculo \mathbf{v}_2 è:

$$v_2^2 = c^2 \frac{(\gamma_1 E_1 - E_\gamma)^2 - E_2^2}{(\gamma_1 E_1 - E_\gamma)^2} \quad (2)$$

Utilizzando le seconde due equazioni del sistema (1), che esprimono la conservazione dell'impulso, troviamo:

$$v_2 \cos \vartheta_2 = \frac{\gamma_1 E_1 v_1 \cos \vartheta_1 - c E_\gamma}{\gamma_2 E_2} \Rightarrow v_2 \cos \vartheta_2 = \frac{\gamma_1 E_1 v_1 \cos \vartheta_1 - c E_\gamma}{\gamma_1 E_1 - E_\gamma}$$

$$v_2 \sin \vartheta_2 = \frac{\gamma_1 E_1 v_1 \sin \vartheta_1}{\gamma_2 E_2} \Rightarrow v_2 \sin \vartheta_2 = \frac{\gamma_1 E_1 v_1 \sin \vartheta_1}{\gamma_1 E_1 - E_\gamma}$$

Elevando al quadrato entrambi i membri e sommando si trova il modulo quadro della velocità di rinculo dell'atomo (o del nucleo):

$$v_2^2 = \frac{\gamma_1^2 E_1^2 v_1^2 + c^2 E_\gamma^2 - 2cE_1 E_\gamma v_1 \cos \vartheta_1}{(\gamma_1 E_1 - E_\gamma)^2} \quad (3)$$

Uguagliando la (2) e la (3) possiamo ricavare E_γ :

$$c^2 \frac{(\gamma_1 E_1 - E_\gamma)^2 - E_2^2}{(\gamma_1 E_1 - E_\gamma)^2} = \frac{\gamma_1^2 E_1^2 v_1^2 + c^2 E_\gamma^2 - 2cE_1 E_\gamma v_1 \cos \vartheta_1}{(\gamma_1 E_1 - E_\gamma)^2}$$

dopo alcuni passaggi e semplificazioni otteniamo:

$$E_\gamma = \frac{\left(1 - \frac{\Delta E}{2E_1}\right) \Delta E \sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}}{1 - \frac{v_1}{c} \cos \vartheta_1} \quad (4)$$

con:

$\Delta E = E_1 - E_2 \equiv$ differenza di energia tra i due stati della transizione atomica

Se l'atomo (o il nucleo) è inizialmente a riposo ($\mathbf{v}_1 = \mathbf{0}$), nel sistema S del laboratorio, allora dalla (4) si ha che l'energia del fotone emesso è data da:

$$E_\gamma = \left(1 - \frac{\Delta E}{2E_1}\right) \Delta E \quad (5)$$

Le quantità che compaiono nella (5), poiché dipendono soltanto da energie di riposo dell'atomo (o del nucleo) sono *invarianti relativistici*. Pertanto l'energia del fotone data dalla (5) sarà denotata con $E_{0\gamma}$ (dove lo zero sta ad indicare che è misurata nel sistema dove l'atomo (o il nucleo) è in quiete prima dell'emissione). Con questa nuova posizione la (4) si scrive:

$$E_\gamma = \frac{E_{0\gamma} \sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}}{1 - \frac{v_1}{c} \cos \vartheta_1} \quad (6)$$

Nella (5) il termine $\frac{\Delta E}{2E_1}$ è generalmente trascurabile a meno che non abbiamo a che fare con i fotoni γ emessi da nuclei liberi.

Si noti che se si pone, per la nota relazione di Einstein, $E_{0\gamma} = \left(1 - \frac{\Delta E}{2E_1}\right) \Delta E = h\nu_0$ e $E_\gamma = h\nu$ dalla (6) si ottiene la relazione Doppler tra le frequenze:

$$\nu = \frac{\nu_0 \sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}}{1 - \frac{v_1}{c} \cos \vartheta_1} \quad (7)$$

La (7), ricavata da Schroedinger, fa uso del concetto di fotone. Essa è identica a quella ottenuta considerando la propagazione di un'onda e.m. piana.

$$\nu_0 = \left(1 - \frac{\Delta E}{2E_1}\right) \frac{\Delta E}{h}$$

rappresenta la frequenza misurata da un osservatore rispetto a cui la sorgente è in quiete

prima dell'emissione del fotone e stabilisce la relazione tra questa frequenza e la differenza di energia dei due livelli quantici tra i quali avviene la transizione atomica o nucleare.

In entrambi i casi si confrontano le frequenze misurate dai due osservatori in moto relativo prescindendo dalla sorgente. La trattazione alla Schroedinger descrive completamente il fenomeno perché tiene conto della sorgente.

La trattazione è simile anche per l'assorbimento di un fotone da parte dell'atomo. Infatti le equazioni di partenza ora sono:

$$\begin{cases} E_\gamma = \gamma_2 E_2 - \gamma_1 E_1 \\ \gamma_1 \frac{E_1}{c^2} v_1 \cos \vartheta_1 + \frac{E_\gamma}{c} = \gamma_2 \frac{E_2}{c^2} v_2 \cos \vartheta_2 & \text{componente impulso asse x (direz. AO)} \\ \gamma_1 \frac{E_1}{c^2} v_1 \sin \vartheta_1 = \gamma_2 \frac{E_2}{c^2} v_2 \sin \vartheta_2 & \text{componente impulso asse y (\perp\text{ direz. AO})} \end{cases} \quad (8)$$

La relazione finale è identica alla (6):

$$E_\gamma = \frac{E_{0\gamma} \sqrt{1 - \frac{v_1^2}{c^2}}}{1 - \frac{v_1}{c} \cos \vartheta_1}$$

dove però questa volta:

$$E_{0\gamma} = \left(1 + \frac{\Delta E}{2E_1}\right) \Delta E = h\nu_0 \quad (9)$$

Si noti bene che: nel caso dell'assorbimento $h\nu_0$ rappresenta l'energia che un fotone *deve avere* per essere assorbito da un atomo (o nucleo) la cui velocità iniziale (prima dell'assorbimento) è nulla.

Si noti bene, infine, che la grandezza E_1 ha valori diversi nel caso dell'emissione e dell'assorbimento. Nel caso dell'emissione, E_1 è l'*energia a riposo dell'atomo (o nucleo) eccitato*; nel caso dell'assorbimento, E_1 è l'*energia a riposo dell'atomo non eccitato*.

Pertanto, l'*effetto Doppler* è una conseguenza della *discretezza del processo di emissione e di assorbimento da parte di un atomo (o nucleo) e delle leggi di conservazione della dinamica relativistica*.

Breve Bibliografia:

G.Giuliani, I.Bonizzoni : LINEAMENTI DI ELETTROMAGNETISMO - La Goliardica Pavese - Pavia

G.Giuliani: Experiment and theory: the case of the Doppler effect for photons - Eur. J. Phys. **34** (2013) 1035–1047