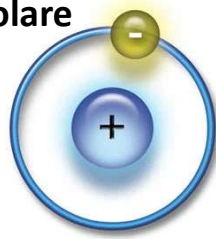


# Introduzione al corso

Esperimenti fondanti della fisica atomica e molecolare: il percorso  
percorso «storico-logico»

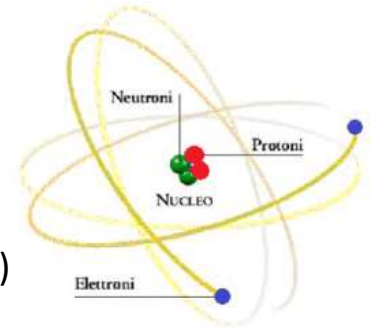
## Meccanica quantistica di Atomi idrogenoidi

- 1 Elettrone in orbita in potenziale centrale!
- Le quantità conservate... il momento angolare
- Lo spin dell'elettrone
- Correzioni relativistiche
- Assorbimento ed emissione (il campo elettromagnetico e i fotoni)
- Cenni di quantizzazione del campo e.m.



## Atomi a molti elettroni

- Più elettroni attratti dallo stesso nucleo
- Elettroni «indistinguibili»!!!
- Bosoni e Fermioni
- Atomo di elio (singoletto e tripletto)
- Gas di Fermi
- Screening dei potenziali
- Atomi a multi elettroni
- Hartee-Fock



Struttura atomica della materia

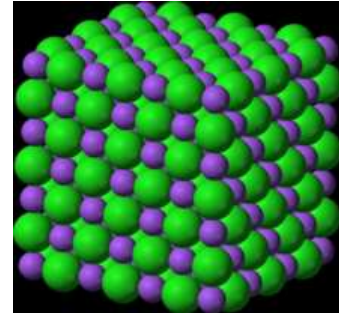
## Basi di Fisica Molecolare

- Perché gli atomi formano degli stati legati?!
- Le quantità conservate...e le simmetrie
- Il collante elettronico
- Approssimazione di Born-Oppenheimer
- Eccitazioni vibrazionali, rotazionali ed elettroniche
- Il principio di Frank-Condon



## Il mondo macroscopico

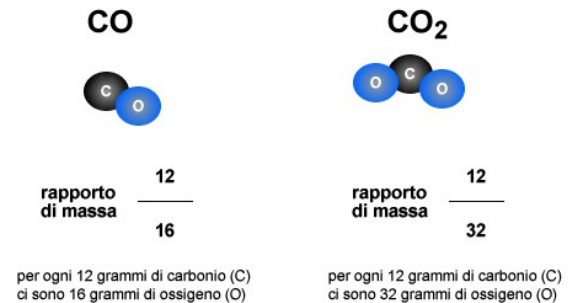
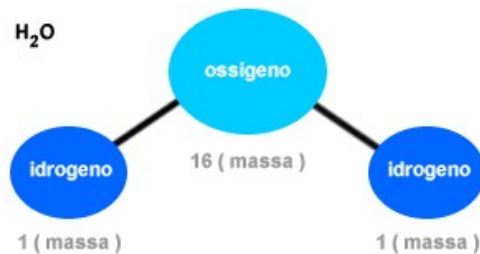
- Cristalli e potenziali periodici
- Teorema di Bloch (invarianza traslazionale)
- Il potenziale cristallino
- Vibrazioni in solidi cristallini (fononi)
- Struttura a bande
- Metalli, Semiconduttori e Isolanti
- Superconduttori



**Teoria** ← → **Approcci matematico formali** ← → **Approccio descrittivo e senso delle approssimazioni** ← → **Esperimenti**

## Esperimenti fondanti della fisica atomica e molecolare: il percorso percorso «storico-logico»

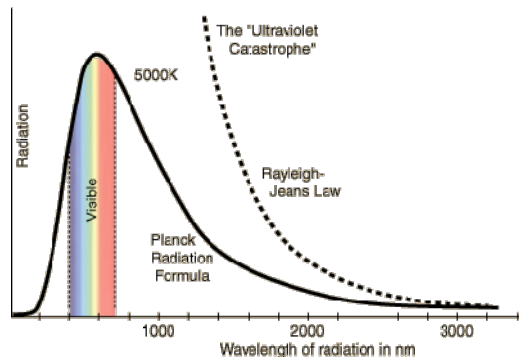
- Legge di Boyle (1662)-> La pressione di un gas cresce quando decresce il volume
- Teoria cinetica di Gas (1871): Bernoulli, Clausius, **Boltzman**, Maxwell
  - *Un gas è fatto di particelle tra le quali intercorrono urti elastici e sono a distanza molto maggiore rispetto alla loro dimensione*
  - *La temperatura di gas è legata alla sua TEMPERATURA*
- Legge delle proporzioni definite o Legge di Proust, 1799 (*Pirite, per ogni grammo di ferro erano sempre presenti 0,57 grammi di zolfo*)
  - *Quando due elementi di combinano a formare una terza sostanza -> le loro masse sono legate da una costante di proporzionalità*



WWW.OKPEDIA.IT

- Legge di Avogadro 1811
  - *Volumi uguali di Gas diversi alla stessa pressione e temperatura contengono lo stesso numero di molecole*
  - Introduce il concetto di MOLE: 1 mole=N grammi di una sostanza di peso atomico N (i.e.  $2,22 \cdot 10^{23}$  molecole/atomi)

- Legge dell'elettrolisi (Faraday 1833)
  - *La massa liberata da un elettrodo è proporzionale alla corrente prodotta (M prop. e-)*
  - *La quantità di carica portata dagli atomi (ionizzati) è discreta*
  - *Unità elementare di carica  $e^- = 10^{-20} C$*
- Esperimento di Thomson (1897)
  - *Identificazione della prima particella subatomica (l'elettrone)*
  - *Determinazione del rapporto  $e/m$*
- Esperimenti di Millikan (1909)
  - *Determinazione della carica dell'elettrone:  $e^- = 1,6 * 10^{-19} C$*
- Con questi esperimenti inizia quella che viene (...) chiamata **Fisica Moderna**
- Studio dell'Emissione di corpo nero:
  - *Emissione di un corpo in «equilibrio termico» con la radiazione*



*Legge basata sull'equidistribuzione classica RJ  
Catastrofe ultravioletta*

....

*Ipotesi di corpuscolare della radiazione e Teoria di Plank*

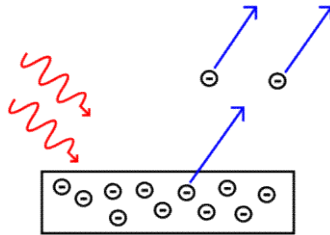
*Il fotone (Compton 1926)*

- L'effetto fotoelettrico (Faraday 1833)

- C'è una frequenza minima al di sotto della quale non ho emissione di elettroni
- Gli elettroni vengono emessi con energia cinetica massima proporzionale alla frequenza del fotone

$$E_{max} \propto \omega_{ph} \quad E_{kin} = h\nu - \Phi \quad \text{con } \Phi \text{ funzione lavoro del materiale}$$

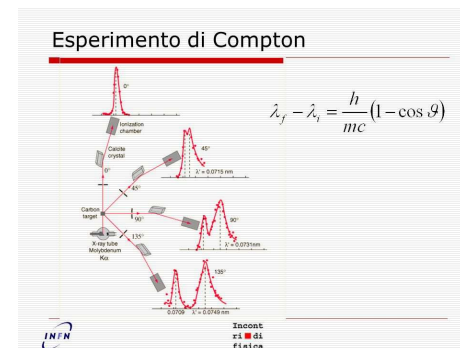
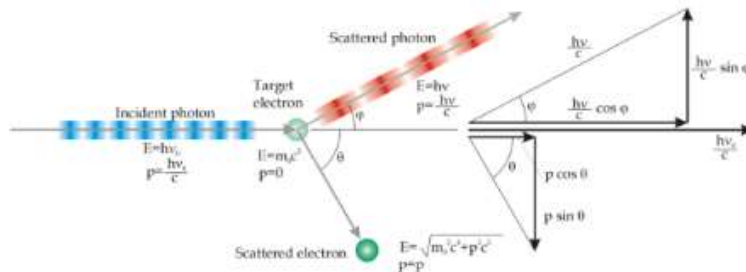
- Numero di elettroni emessi proporzionali all'intensità



- La radiazione è anche una particella (il fotone)!

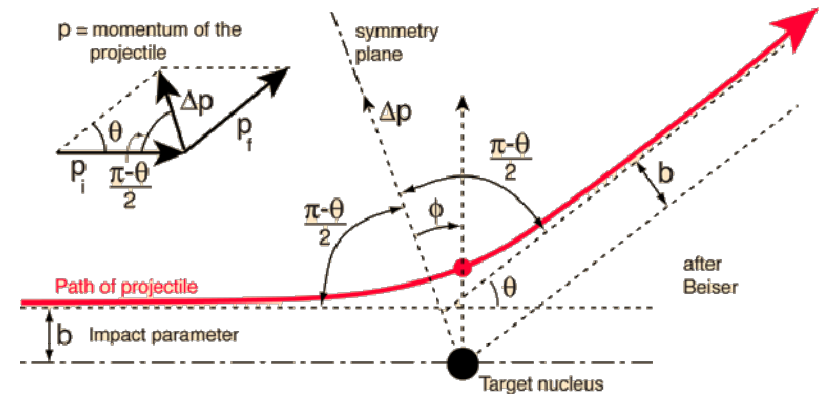
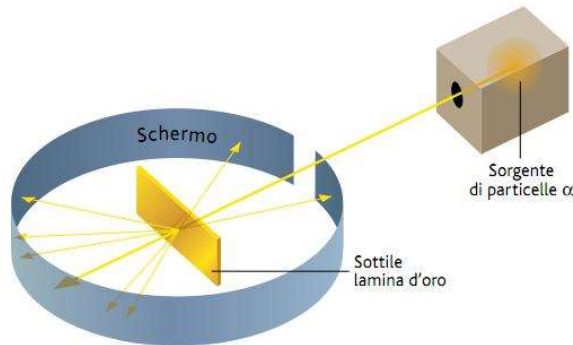
- Effetto Compton (1923)

- La lunghezza d'onda della radiazione scatterata dipende dall'angolo di scattering e un accordo sperimentale si ottiene solo introducendo il concetto di fotone (particella priva di massa ma dotata di una certa quantità di moto!!)



- **Esperimento di Rutherford (Faraday 1911)**

- *Scattering di particelle di He<sup>2+</sup> da fogli metallici*
- *La sezione d'urto è spiegata introducendo il concetto di point charges localizzate nel NUCLEO ( $r \approx 10^{-14}/15m$ )*



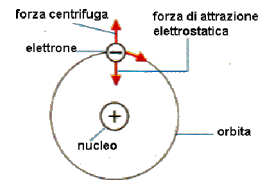
- **Atomo di Rutherford**

- *Sistema atomico «planetario» con elettroni in orbita attorno ad una carica «puntiforme» nucleare*

*Limite:*

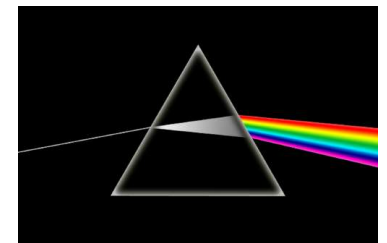
*1) Gli elettroni irradiano e perdono l'energia immagazzinata in  $10^{-10}$  sec*

*2) In stato gassoso gli atomi sono caratterizzati da righe di assorbimento e emissione (esperimenti di Melvill 1772)*



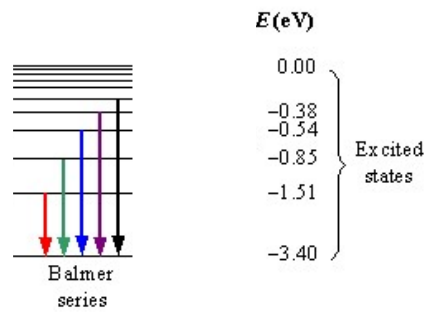
- Ogni elemento ha delle righe di assorbimento ed emissione caratteristiche

- *Tanto che è possibile ad esempio misurare la composizione di sorgenti gassose in questo modo*



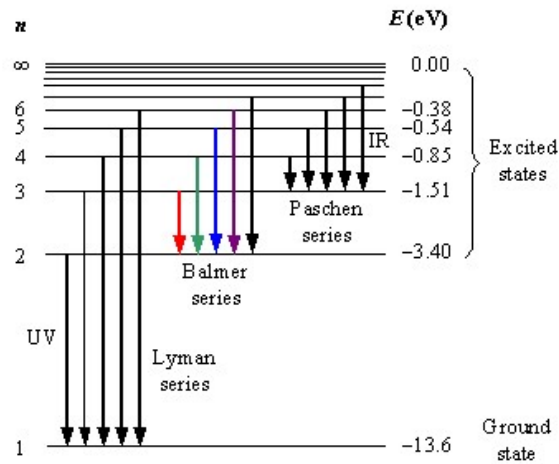
- Serie di Balmer (1885)

- *L'assorbimento dell'atomo di idrogeno nel visibile è dato da:  $\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$  con  $n > 2$  con  $R = 13,6 \text{ eV}$*



- Serie di Balmer (1885)

- *L'assorbimento dell'atomo di idrogeno nel visibile è dato da:  $\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2}\right)$  con  $n > 2$  con  $R = 13,6 \text{ eV}$*



Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated.



- La serie di Balmer è solo un caso di una struttura più generale in cui le righe di assorbimento seguono la legge di Rydberg:

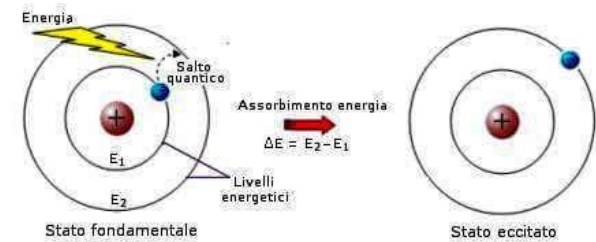
$$\frac{1}{\lambda} = R\left(\frac{1}{n_a^2} - \frac{1}{n_b^2}\right) \text{ con } b \text{ ed } a \text{ interi e } b > a$$



- **Modello di Bohr Dell'atomo di Idrogeno**

- *Gli atomi si muovono nel potenziale centrale del nucleo su orbite circolari*

*Postulati del modello di Bohr:*



1) Solo un set discreto di orbite sono permesse e sono chiamati **«stati stazionari»**

2) Gli elettroni in orbite stabili non irradiano. Emissione e assorbimento della radiazione sono determinati da una transizione tra uno orbita ed un'altra e l'energia emessa è data da :

$$h\nu = E_b - E_a \text{ con } E_a \text{ ed } E_b \text{ stato finale ed iniziale dell'atomo}$$

-> I termini della serie di Rydberg sono legati alle energie degli stati stazionari (alle loro differenze)

3) Il momento angolare degli elettroni in orbite circolari prende valori discreti ed uguali a

$$L = \frac{nh}{2\pi} = n\hbar$$

Con  $n=1,2,3\dots$

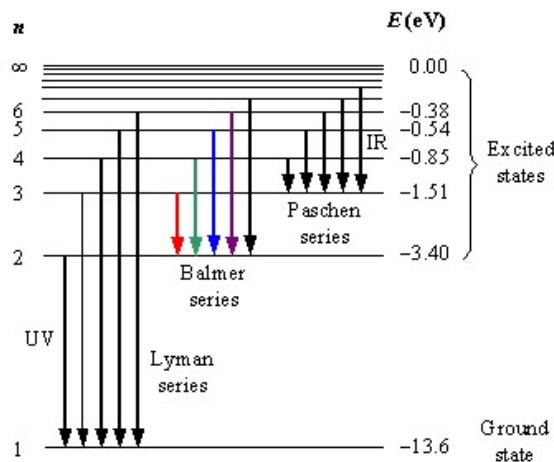
- Possiamo così ottenere (Calcolo p5-10...) le energie degli stati stazionari come:

$$E_n = -\frac{m}{2\hbar^2} \left( \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2 \frac{1}{n^2} \text{ con } b \text{ ed } a \text{ interi e } b > a$$

- Modello di Bohr Dell'atomo di Idrogeno

Descrive bene:

- *I livelli di energia per atomo con  $Z=1,2,3,4\dots$  ed un solo elettrone!*
- *Accordo molto buon con gli esperimenti:  $R = \frac{m}{4\pi\hbar^3} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\right)^2 = 109737\text{cm}^{-1}$  vs  $109677 \text{ exp}$*
- *Per  $Z$  grandi effetti relativistici saranno più rilevanti: La velocità dell'e- nel ground state è data da  $v/c = \alpha Z = Z/137$  (con  $Z$  maggiori le correzioni relativistiche saranno più rilevanti)*



Energy levels of the hydrogen atom with some of the transitions between them that give rise to the spectral lines indicated

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_a^2} - \frac{1}{n_b^2} \right) \text{ con } b \text{ ed } a \text{ interi e } b > a$$

- Modello di Bohr Dell'atomo di Idrogeno

Non descrive bene:

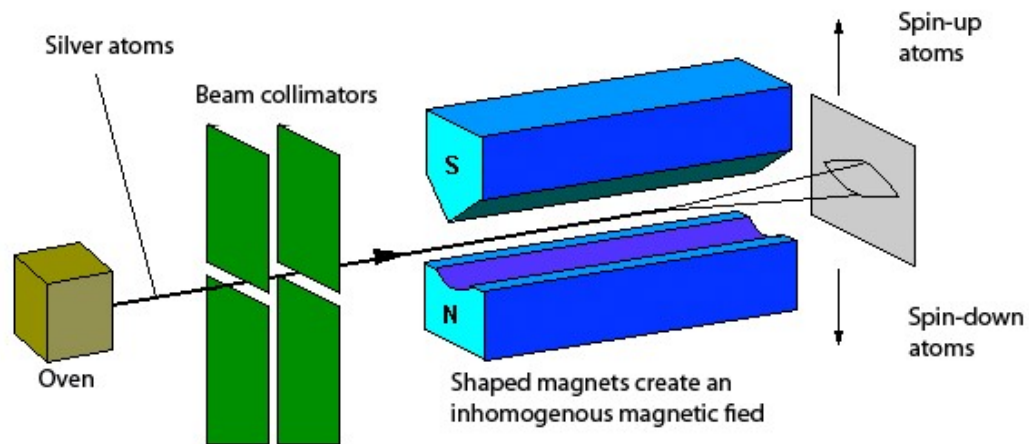
- *E' sostanzialmente un modello classico!*
- *Non può essere generalizzato a sistemi a più elettroni*
- *Le assunzioni fatte sono arbitrarie (i.e. Orbite circolari)*
- *Non si possono calcolare probabilità di transizione tra i diversi livelli*
- *E non descrive le strutture a multipletto delle transizioni ottiche osservate.*

- L'esperienza di Stern Gerlach

- *Misura del **momento angolare** degli elettroni*
- *Scoperta (non rivelata) dello Spin dell'elettrone*
- *Misura del **momento di dipolo magnetico associato ad un momento angolare***

*Relazione generale e fattore di Lande'*

*Quantizzazione delle proiezioni del momento angolare*



## Descrizione quantistica dell'atomo di Idrogeno, la nascita della meccanica quantistica

### Ipotesi ondulatoria della materia:

- *Il crollo definitivo della formulazione di Bohr è determinato dal principio di indeterminazione di Heisemberg*

$$\Delta x \Delta p \approx \hbar \quad (\Delta E \Delta t)$$

*Se consideriamo un errore sulla misura della velocità del 2% otteniamo una incertezza sulla posizione di 50Å (circa 200 volte il raggio atomico); i.e. L'elettrone è completamente delocalizzato*

### L'ipotesi di De Broglie (1924):

- *Così come le onde possono avere un comportamento particellare*
- *De broglie ipotizza che anche la materia possa avere un comportamento ondulatorio:*  
*La frequenza di un onda è associata alla sua energia mentre la lunghezza d'onda al momento*

$$v = \frac{E}{h} \quad e \quad \lambda = \frac{h}{p}$$

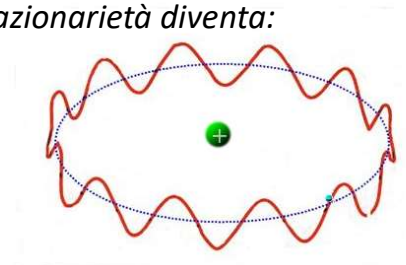
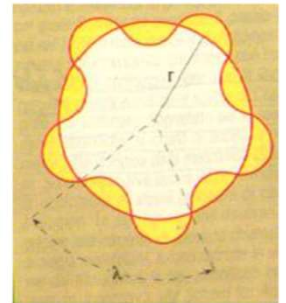
- *Di conseguenza per una particella di massa  $m$  e velocità  $v$   $\lambda = \frac{h}{mv}$*
- *L'ipotesi di de Broglie da una spiegazione **qualitativa** del postulato di Bohr:*

*Perchè l'onda associata al movimento di un e- in orbita circolare attorno ad un nucleo la cond. Di stazionarietà diventa:*

$$n\lambda = 2\pi r$$

*Che (sostituendo la cond. precedente) è esattamente la condizione di quantizzazione del momento angolare postulato da Bohr:*

$$mvr = n\hbar$$



L'ipotesi di De Broglie guida Schroedinger (1926)

*-formulazione della meccanica quantistica*

*-Introduce il concetto **la funzione d'onda**  $\psi(r)$*

*-E scrive un equazione che lega energia potenziale e cinetica all'energia del sistema in esame*

$$H\psi(r) = E\psi(r)$$

*-La l'ampiezza della funzione d'onda  $\psi(r)$ , ha il significato della densità di probabilità di trovare un elettrone in un punto dell spazio*

*La probabilità di trovare un elettrone nel volume infinitesimo  $dr$  attorno ad  $r$  è data da  $|\psi(r)|^2$  ed ha la proprietà di normalizzazione per cui*

$$\int |\psi(r)|^2 dr = 1$$