

Comprende versione

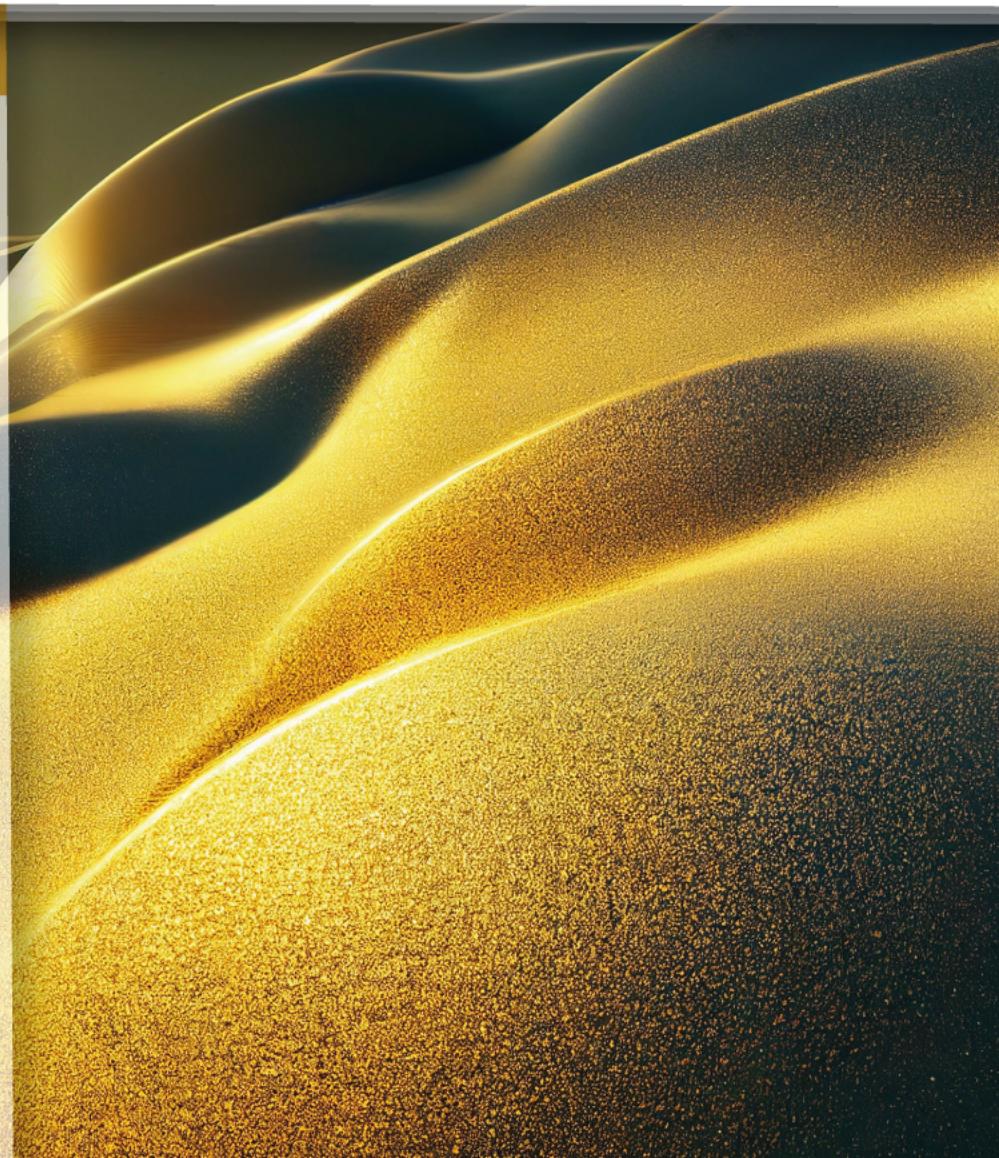
ebook



Franco Ciccacci

Fondamenti di Fisica Atomica e Quantistica

IV Edizione



Franco Ciccacci

Fondamenti di
Fisica Atomica
e Quantistica

IV Edizione



Franco Ciccacci
Fondamenti di Fisica Atomica e Quantistica – IV Edizione
Copyright © 2024, EdiSES Edizioni S.r.l. – Napoli

9 8 7 6 5 4 3 2 1 0
2028 2027 2026 2025 2024

Le cifre sulla destra indicano il numero e l'anno dell'ultima ristampa effettuata

A norma di legge è vietata la riproduzione, anche parziale, del presente volume o di parte di esso con qualsiasi mezzo.

L'Editore

L'Editore ha effettuato quanto in suo potere per richiedere il permesso di riproduzione del materiale di cui non è titolare del copyright e resta comunque a disposizione di tutti gli eventuali aventi diritto.

Stampato presso
Vulcanica S.r.l. – Nola (NA)

per conto della
EdiSES Edizioni S.r.l. – Piazza Dante Alighieri, 89 – Napoli

www.edises.it
assistenza.edises.it

ISBN 978 88 3623 174 4

I curatori, l'editore e tutti coloro in qualche modo coinvolti nella preparazione o pubblicazione di quest'opera hanno posto il massimo impegno per garantire che le informazioni ivi contenute siano corrette, compatibilmente con le conoscenze disponibili al momento della stampa; essi, tuttavia, non possono essere ritenuti responsabili dei risultati dell'utilizzo di tali informazioni e restano a disposizione per integrare la citazione delle fonti, qualora incompleta o imprecisa.

Realizzare un libro è un'operazione complessa e, nonostante la cura e l'attenzione poste dagli autori e da tutti gli addetti coinvolti nella lavorazione dei testi, l'esperienza ci insegna che è praticamente impossibile pubblicare un volume privo di imprecisioni. Saremo grati ai lettori che vorranno inviarci le loro segnalazioni e/o suggerimenti migliorativi sulla piattaforma assistenza.edises.it

INDICE DEI CONTENUTI

PREFAZIONE	<i>ix</i>
1 INTRODUZIONE	
1.1 Quantizzazione ovvero atomismo del mondo	1
1.2 Campi e particelle	5
1.3 Cenni storici: tappe fondamentali	9
2 COMPLEMENTI DI FISICA CLASSICA 1: Meccanica Analitica	
2.1 Formalismo Lagrangiano	13
2.2 Lagrangiana di particella carica in campo elettromagnetico	17
2.3 Formalismo Hamiltoniano	20
2.4 Complementi, applicazioni, esempi	22
2.4.1 Oscillatore armonico 1D	
2.4.2 Sistema di due corpi interagenti con forza centrale: centro di massa	
2.4.3 Particella in campo centrale, forza $\sim r^{-2}$	
2.4.4 Parentesi di Poisson	
3 COMPLEMENTI DI FISICA CLASSICA 2: Meccanica Statistica	
3.1 Metodo degli ensemble	35
3.2 Ensemble microcanonico, canonico e gran canonico	43
3.3 Ensemble canonico: distribuzione di Boltzmann	45
3.3.1 Funzione partizione e suo uso	
3.3.2 Teorema dell'equipartizione dell'energia	
3.4 Complementi, applicazioni, esempi	50
3.4.1 Paramagnetismo: funzione di Langevin	
3.4.2 Gas perfetto: distribuzione delle velocità (Maxwell)	
3.4.3 Calori specifici	
3.4.4 Ensemble microcanonico e entropia	
4 ATOMI, PARTICELLE, RADIAZIONI	
4.1 Atomi: massa e dimensioni	65
4.2 Altre particelle e radiazioni	71
4.3 Sezione d'urto	75
4.4 Modelli atomici	78
4.5 Complementi, applicazioni, esempi	85
4.5.1 Angolo solido	
4.5.2 Misura del numero di Avogadro	
4.5.3 La scoperta di nuove particelle e radiazioni	
4.5.4 Raggio classico dell'elettrone	
4.5.5 Derivazione della formula di Rutherford	
5 LUCE: ONDE ELETTRONAGNETICHE E FOTONI	
5.1 Radiazione termica	97

5.2 Il corpo nero	101
5.3 Dalla formula di Rayleigh-Jeans a quella di Planck	104
5.4 L'effetto fotoelettrico	109
5.5 La diffusione Compton	115
5.6 Onde o particelle?	118
5.7 Complementi, applicazioni, esempi	119
5.7.1 Richiamo sui principali fenomeni ondulatori	
5.7.2 Difrazione dei raggi X	
5.7.3 Radiazione cosmica di fondo	
5.7.4 Oscillatori quantizzati: da Planck a Einstein	
5.7.5 Congelamento dei gradi di libertà nei calori specifici	
5.7.6 Calore specifico dei solidi	
5.7.7 Derivazione dello spostamento Compton	
6 ATOMO DI BOHR	
6.1 Principi base della spettroscopia	131
6.2 Spettro dell'atomo di idrogeno	132
6.3 Postulati e modello di Bohr	135
6.4 Moto del nucleo	140
6.5 La "vecchia" Fisica dei Quanti	142
6.6 Complementi, applicazioni, esempi	143
6.6.1 Esperimento di Franck ed Hertz	
6.6.2 Regole di quantizzazione di Wilson-Sommerfeld	
6.6.3 Modello atomico di Sommerfeld: effetti relativistici nell'idrogeno	
6.6.4 Atomo di Bohr e principio di corrispondenza	
6.6.5 Sviluppi recenti: atomi di Rydberg e anti-idrogeno	
7 ONDE DI MATERIA	
7.1 Lunghezza d'onda di de Broglie	153
7.2 Difrazione degli elettroni	156
7.3 Dualismo onda-particella	158
7.4 Pacchetto d'onde	165
7.5 Principio di indeterminazione di Heisenberg	169
7.6 Complementi, applicazioni, esempi	176
7.6.1 Lunghezza d'onda di de Broglie e atomo di Bohr	
7.6.2 Il microscopio elettronico	
7.6.3 Natura ondulatoria delle particelle: esperimenti moderni	
7.6.4 Principio di indeterminazione e stati legati	
7.6.5 Principio di indeterminazione e stati eccitati	
7.6.6 Particelle instabili	
8 FUNZIONE D'ONDA ED EQUAZIONE DI SCHRÖEDINGER	
8.1 Equazione per le onde di materia	185
8.2 Interpretazione della funzione d'onda	188
8.3 Proprietà delle funzioni d'onda	191
8.4 Valori di aspettazione	194

8.5 Funzione d'onda nello spazio dei momenti	197
8.6 Equazione di Schrödinger non dipendente dal tempo	199
8.7 Stati stazionari	202
8.6 Quantizzazione dell'energia	206
8.9 Complementi, applicazioni, esempi	208
8.9.1 Densità di corrente di probabilità	
8.9.2 Limite classico: teorema di Ehrenfest	
8.9.3 La delta di Dirac	
8.9.4 Effetti gravitazionali in Fisica dei Quanti	
9 STATI QUANTISTICI E GRANDEZZE FISICHE	
9.1 Richiami di algebra lineare	217
9.2 Spazio di Hilbert	221
9.3 Osservabili e operatori	222
9.4 Espansione sulla base delle atuofunzioni	228
9.5 Interpretazione statistica generalizzata	231
9.6 Sommario dei postulati	235
9.7 Complementi, applicazioni, esempi	236
9.7.1 Comutatori notevoli	
9.7.2 Formulazione generale del teorema di Ehrenfest	
9.7.3 Sistema a due livelli	
10 PROBLEMI UNIDIMENSIONALI	
10.1 Particella confinata su un segmento	241
10.2 Autofunzioni del momento e particella libera	248
10.3 Energia potenziale costante a tratti	254
10.4 Gradino di potenziale	258
10.5 Barriera di potenziale	266
10.6 Buca di potenziale di profondità finita	270
10.7 Oscillatore armonico	273
10.8 Complementi, applicazioni, esempi	276
10.8.1 Buca infinita e onde su corda	
10.8.2 Particella confinata in 1D: limite classico e densità di stati	
10.8.3 Onde piane e flusso di probabilità	
10.8.4 Normalizzazione nella scatola	
10.8.5 Limite classico per l'oscillatore armonico	
10.8.6 Soluzione dell'equazione per l'oscillatore armonico	
10.8.7 Esempi di effetto tunnel	
11 SISTEMI 3D E ATOMO DI IDROGENO	
11.1 Funzione d'onda in tre dimensioni	291
11.2 Particella confinata in una scatola	292
11.3 Particelle libere e densità di stati in 3D	295
11.4 Campo centrale	299
11.5 Armoniche sferiche	304
11.6 Momento angolare	309

11.7 Equazione di Schrödinger per l'atomo di idrogeno	316
11.8 Atomo di idrogeno: autovalori e autofunzioni	321
11.9 Complementi, applicazioni, esempi	330
11.9.1 Modello degli elettroni liberi nei metalli	
11.9.2 Problema dei due corpi in meccanica quantistica	
11.9.3 Hamiltoniana in campo centrale: caso classico e quantistico	
11.9.4 Polinomi e funzioni associate di Legendre	
\ 11.9.5 Armoniche sferiche in forma reale	
11.9.6 Armoniche sferiche e simmetria sferica	
11.9.7 Rotatore rigido	
11.9.8 Gas nobili e atomi alcalini	
12. INTERAZIONE ATOMO-RADIAZIONE ELETTRONI MAGNETICA	
12.1 Campo di radiazione nel vuoto	343
12.2 Teoria quantistica dell'interazione radiazione-materia	346
12.3 Probabilità di transizione e regola d'oro	352
12.4 Assorbimento ed emissione	353
12.5 Elemento di matrice e regole di selezione	355
12.6 Complementi, applicazioni, esempi	359
12.6.1 Interazione radiazione-materia: modello dell'oscillatore di Lorentz	
12.6.2 Sistema a due livelli: coefficienti di Einstein	
12.6.3 Integrazione sugli angoli e regole di selezione	
12.6.4 Regola d'oro, pacchetti d'onda e transizioni nel continuo	
12.6.5 Utilità dell'allargamento di riga: raffreddamento laser.	
13. SPIN	
13.1 Spire e dipoli magnetici	373
13.2 Dipoli magnetici elementari: esperimento di Stern e Gerlach	378
13.3 Spin 1/2	388
13.4 Somma di momenti angolari	391
13.5 Momento angolare totale	395
13.6 Interazione spin-orbita	396
13.7 Complementi, applicazioni, esempi	402
13.7.1 Esperimenti SG in serie	
13.7.2 Elettrone in campo magnetico	
13.7.3 Effetto Einstein-de Haas	
13.7.4 Spin del fotone e regola di selezione per j	
13.7.5 Struttura fine dell'idrogeno	
13.7.6 Momento di dipolo magnetico totale e fattore di Landé	
14. PARTICELLE IDENTICHE	
14.1 Approssimazione di particelle indipendenti	415
14.2 Indistinguibilità di particelle identiche	419
14.3 Bosoni e fermioni	422
14.4 Obbligo di simmetrizzazione e spin	423
14.5 Complementi, applicazioni, esempi	426
14.5.1 Distanza media tra particelle indistinguibili	
14.5.2 Determinanti di Slater	

15 SISTEMI QUANTISTICI A MOLTE PARTICELLE NON INTERAGENTI	
15.1 Dalla meccanica statistica classica a quella quantistica	431
15.2 Densità di stati	434
15.3 Numeri di occupazione	436
15.4 Gas perfetto quantistico	438
15.5 Distribuzioni di Fermi-Dirac e di Bose-Einstein	442
15.6 Gas di fermioni degenere	446
15.7 Gas di bosoni degenere	449
15.8 Complementi, applicazioni, esempi	450
15.8.1 Gas di elettroni liberi nei metalli	
15.8.2 Fermioni nelle stelle	
15.8.3 He liquido superfluido	
15.8.4 Gas di fotoni	
15.8.5 Gas di fononi	
16 ATOMI A MOLTI ELETTRONI	
16.1 Impostazione del problema	459
16.2 Atomo di elio e interazione di scambio	462
16.3 Approssimazione di campo centrale	470
16.4 Sistema periodico degli elementi chimici	477
16.5 Metodo autoconsistente di Hartree	484
16.6 Spettri di emissione di raggi X	489
16.7 Oltre l'approssimazione di campo centrale	494
16.8 Accoppiamento LS e regole di Hund	495
16.9 Complementi, applicazioni, esempi	500
16.9.1 Correzione al prim'ordine delle energie per l'atomo di He	
16.9.2 Spin e antisimmetria per il campo centrale: metodo di Hartree-Fock	
16.9.3 Spettri di assorbimento di raggi X	
16.9.4 Livelli energetici dell'atomo di carbonio	
APPENDICE: FORMALISMO DELLA TEORIA DEI QUANTI	
A.1 Misura: incertezza e perturbazione	A1
A.2 Misure ideali e stati quantistici	A3
A.3 Ampiezza di probabilità	A6
A.4 Osservabili e insieme completo di ampiezze	A9
A.5 Spazi vettoriali: ket e bra	A11
A.6 Interpretazione statistica generalizzata	A19
A.7 Teoria delle rappresentazioni	A27
A.7.1 Operatori con spettro discreto	
A.7.2 Operatori con spettro continuo: spazi funzionali	
A.7.3 Rappresentazione posizione	
A.7.4 Rappresentazione momento	
A.8 Evoluzione temporale	A42

A.9 Sommario dei postulati	A46
A.10 Complementi, applicazioni, esempi	A47
A.10.1 Autovalori del momento angolare con metodi operatoriali	
A.10.2 Operatori innalzamento e abbassamento per l'oscillatore armonico	
A.10.3 Dimostrazione del principio di indeterminazione generalizzato	
A.10.4 Operatore momento nella rappresentazione posizione	

BIBLIOGRAFIA

INDICE ANALITICO

COSTANTI FISICHE FONDAMENTALI

Prefazione

Questo libro, ormai giunto alla quarta edizione, nasce dall'esperienza maturata in molti anni di insegnamento in corsi dedicati all'introduzione dei concetti base della fisica moderna rivolti agli studenti della Laurea Triennale delle Facoltà di Ingegneria. Si tratta in particolare dell'elaborazione di note preparate per diversi corsi che si sono susseguiti negli anni sotto vari titoli e che utilizzo ormai da oltre un decennio per il corso di Introduzione alla Fisica dei Quanti che tengo per gli studenti del Corso di Sudi in Ingegneria Fisica presso il Politecnico di Milano.

L'utenza di riferimento è costituita da studenti universitari che siano già stati sufficientemente esposti a corsi di fisica di base, da cui ci aspetta una discreta conoscenza dei fondamenti della meccanica (del punto e dei sistemi) della termodinamica, dell'elettromagnetismo e ottica, dei fenomeni ondulatori in genere. Per quanto riguarda le conoscenze matematiche, è sufficiente una discreta familiarità con i numeri complessi, l'algebra lineare e il calcolo differenziale e integrale, anche se al solito conoscenze ulteriori (equazioni differenziali, analisi di Fourier, spazi funzionali), pur se non necessarie, risultano senz'altro utili. Poiché in ogni caso ci si rivolge a studenti relativamente alle prime armi, si è scelto di dare un'impostazione molto fenomenologica alla trattazione, privilegiando per quanto possibile gli aspetti sperimentali e introducendo i concetti quantistici in maniera molto graduale.

Il libro si apre con un capitolo introduttivo in cui le idee quantistiche vengono presentate in una prospettiva storica, volto sia a richiamare i fenomeni classici rilevanti che a familiarizzare con il radicale cambiamento della visione del mondo imposto dalle nuove scoperte e relative interpretazioni teoriche. Nonostante il taglio volutamente semplificato e non formale (o forse proprio per questo), ho ritenuto opportuno far precedere l'introduzione dei concetti quantistici da due capitoli dedicati a importanti branche della fisica classica, tradizionalmente non coperte nei corsi di fisica di base e in genere non presenti in quelli di fisica quantistica: la Meccanica Analitica (Cap. 2) e la Meccanica Statistica (Cap. 3). La scelta di trattare tali discipline, seppure in maniera solo accennata e sicuramente non rigorosa, è motivata da un lato dall'esigenza di fornire un luogo istituzionale a tali argomenti (sono consapevole che si tratta di un'esigenza di

completezza del tutto personale), dall'altro dalla loro efficacia per la migliore comprensione della fisica quantistica (si pensi ad esempio all'utilità di poter contare sulla conoscenza del formalismo hamiltoniano classico per introdurre quello quantistico, oppure sulla teoria degli ensemble di Gibbs per discutere il processo di misura in ambito quantistico).

L'impostazione fenomenologica torna protagonista nel Cap. 4 dedicato alla discussione del concetto di atomo, basata sull'analisi di numerosi fatti sperimentali. Lo stesso vale per il successivo Cap. 5, in cui, dopo aver discusso la termodinamica della radiazione (altro argomento che tradizionalmente ha sempre faticato a trovare spazio nei corsi di base) e il corpo nero, si introduce il concetto di fotone e si affronta il problema del dualismo onda-particella. Il Cap. 6 tratta in dettaglio del modello atomico di Bohr, uno dei massimi risultati dell'approccio fenomenologico, e si chiude con una discussione sulla “vecchia fisica dei quanti”, che per quanto ormai superata permette tuttavia una visualizzazione dei vari fenomeni e processi, a mio modo di vedere molto utile per chi affronta temi quantistici per la prima volta, come appunto il pubblico cui il libro è rivolto. La meccanica quantistica vera e propria, nella formulazione di meccanica ondulatoria, viene affrontata nei successivi tre capitoli: il Cap. 7, contenente la descrizione ondulatoria della materia a partire dall'ipotesi di de Broglie; il Cap. 8, dedicato all'equazione di Schrödinger e in cui viene introdotto il concetto di operatore, e il Cap. 9, in cui vengono presentati stati quantistici e grandezze fisiche come descritti dal formalismo della teoria dei quanti (pur rinviano a testi specialistici per una trattazione rigorosa).

Nel Cap. 10 vengono discussi semplici ma rilevanti problemi unidimensionali, per passare poi al caso tridimensionale nel Cap. 11, in cui vengono trattati in particolare i sistemi a simmetria sferica introducendo l'operatore momento angolare. Nello stesso capitolo, si riprende anche lo studio degli atomi, fornendo una giustificazione teorica basata sull'equazione di Schrödinger dei risultati del modello di Bohr e discutendo le funzioni d'onda per l'atomo di idrogeno e idrogenoidi. Il successivo Cap. 12 è dedicato alla trattazione dell'interazione radiazione materia, le transizioni ottiche e le conseguenti regole di selezione, che consentono un'interpretazione coerente degli spettri atomici. Lo spin, nuova grandezza puramente quantistica senza analogo classico, viene introdotto nel successivo Cap. 13, che include l'analisi dei fenomeni magnetici interni all'atomo e

della struttura fine degli spettri atomici. I sistemi a molte particelle sono l'oggetto del Cap. 14, in cui vengono analizzate le conseguenze dell'indistinguibilità delle particelle, mentre le statistiche quantiche sono discusse nel Cap. 15, completando quanto fatto nel capitolo 3 per il caso classico. Infine, nel Cap. 16 sono trattati gli atomi a molti elettroni, fino a discutere e giustificare la tavola periodica degli elementi chimici, con accenni anche agli effetti che vanno oltre l'approssimazione di campo centrale (struttura a multipletti e struttura fine).

Il libro contiene numerosi esempi, in buona parte numerici, in cui, tra l'altro, si è cercato di sottolineare l'importanza dei conti quantitativi, con l'obiettivo di richiamare l'attenzione degli studenti su questo aspetto troppo spesso trascurato, ritenendo essenziale che ci si renda conto del valore numerico dei risultati, almeno come ordine di grandezza. Approfondimenti vari vengono poi trattati nel paragrafo “Complementi, applicazioni, esempi” che chiude ogni capitolo.

Il materiale qui presentato copre una serie di argomenti di fisica atomica e quantistica che possono essere trattati a un buon livello di approfondimento in un corso da 10 crediti formativi unitari (o cfu, l'unità di misura per i corsi universitari introdotta dalla riforma del 2000). Questo è il caso del corso di Laurea Triennale in Ingegneria Fisica al Politecnico di Milano, che prevede appunto un corso da 10 cfu dedicato a queste tematiche (al secondo semestre del secondo anno), il cui programma ricalca il contenuto del presente libro. A seconda delle esigenze didattiche, si può anche utilizzare solo parte del volume per un corso introduttivo da 5 cfu, che possa servire o come unica esposizione alle idee moderne della fisica (auspicabile per tutti i corsi di Laurea a carattere scientifico-tecnologico in genere e di Ingegneria in particolare), oppure come primo avvicinamento in vista di corsi ulteriori.

Rispetto all'edizione precedente sono stati reintrodotti nel corpo del testo cenni alla meccanica statistica classica e quantistica (prima relegati nelle Appendici), mentre è stato di molto ridotto lo spazio dato al formalismo. Scelte queste conseguenti al cambiamento del programma intervenuto a causa dell'introduzione al terzo anno della Laurea Triennale del Corso di Studio in Ingegneria Fisica del Politecnico di Milano del corso di Complementi di Meccanica Quantistica, dedicato all'approfondimento delle tematiche quantistiche. Per completezza, una trattazione più estesa del formalismo della teoria dei quanti, basata sull'uso estensivo della notazione di Dirac con ket e bra e sulla

teoria delle rappresentazioni, è riportata in Appendice. Anche in questo caso, fedele all'impostazione fenomenologica, si è tenuto a sottolineare come l'introduzione di nuovi concetti e relativi strumenti matematici sia strettamente legata al processo di misura: è essenziale prendere atto dei limiti e delle possibilità dell'indagine sperimentale, che è alla base di ogni discorso di tipo scientifico.

È poi previsto un minimo di bibliografia, scelta con criteri del tutto personali tra le opere di più facile accesso, per chi volesse andarsi a rivedere concetti appena richiamati oppure approfondire gli argomenti trattati o in ogni caso guardarli da un altro punto di vista.

Milano, Settembre 2023

14.3 Bosoni e fermioni

La forma (14.17) della funzione d'onda di un sistema di due particelle, o la relazione (14.15) per il caso generale, mostrano che esistono due modi per soddisfare la richiesta derivante dall'indistinguibilità di particelle identiche: con funzione d'onda complessiva simmetrica (ψ_S , segno +) oppure antisimmetrica (ψ_A , segno -). Le proprietà di simmetria della funzione d'onda si riflettono sulle proprietà statistiche delle particelle da essa descritte, il che porta a identificare due specie diverse di particelle. Come si dimostra nell'ambito della meccanica quantistica relativistica, le *proprietà statistiche sono a loro volta connesse con lo spin* della particella. Le particelle con spin intero, dette **bosoni**, sono descritte da funzioni d'onda simmetriche, mentre quelle con spin semintero, dette **fermioni**, da funzioni d'onda antisimmetriche:

$$\begin{aligned} \text{segno (+)} &\leftrightarrow \psi_{tot} = \psi_S \leftrightarrow \text{spin intero} \leftrightarrow \text{\textbf{bosoni}} \\ \text{segno (-)} &\leftrightarrow \psi_{tot} = \psi_A \leftrightarrow \text{spin semintero} \leftrightarrow \text{\textbf{fermioni}} \end{aligned}$$

Nella prima categoria rientrano molti atomi, come l'idrogeno e l'elio, i fotoni, i fononi, i mesoni, ..., nella seconda gli elettroni, i protoni, i neutroni e i quark.

Gli elettroni hanno spin $\frac{1}{2}$ e vanno descritti da funzioni d'onda antisimmetriche: la funzione d'onda per un sistema di due elettroni (lo stesso vale per qualsiasi coppia di fermioni) risulta pertanto

$$\psi_{tot}(1,2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1) \} \quad (14.19),$$

da cui si vede che se si prova a mettere entrambe le particelle nello stesso stato, $a = b$, la funzione si annulla. È questo il **principio di esclusione di Pauli**, la cui formulazione originale asseriva che *2 elettroni di un atomo non possono occupare lo stesso stato con tutti i numeri quantici uguali*⁴. In maniera più generale possiamo dire che non è possibile mettere nello stesso stato quantistico due particelle uguali descritte da funzioni d'onda antisimmetriche (cioè due fermioni). Da questa discussione si vede che il principio di esclusione è una conseguenza dell'obbligo di simmetrizzazione, di cui costituisce un enunciato debole, nel senso che la richiesta (14.15) pone maggiori vincoli sulla forma

⁴ Pauli introdusse il principio di esclusione per spiegare la tabella periodica degli elementi sulla base del modello atomico di Bohr-Sommerfeld. Egli propose anche di attribuire all'elettrone nell'atomo, oltre a n , l e m , un quarto numero quantico, che ora sappiamo essere associato allo spin (o meglio alla sua componente z).

della funzione d'onda di quanto non faccia la regola di Pauli.

Esempio 14.4: due particelle indistinguibili in una buca infinita. Riconsideriamo l'Es. 14.2 per due particelle quantistiche indistinguibili. Se le particelle sono bosoni, potremo ancora metterle in tutti i livelli senza alcuna limitazione, come nel caso classico, e avremo la stessa sequenza di energie per il sistema totale $E_{tot} = 2\beta, 5\beta, 8\beta, \dots$. Le particelle sono però indistinguibili e le autofunzioni devono soddisfare all'obbligo di simmetrizzazione (col segno +). Questo non modifica le autofunzioni dello stato fondamentale e del 2° stato eccitato, che nell'Es. 14.2 erano già simmetriche rispetto allo scambio, ma cambia quella del 1° stato eccitato. Infatti in tal caso per la (14.19) l'autofunzione diventa

$$\psi_{tot}^{1^\circ} = \psi_S^{1^\circ} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(1)\psi_2(2) + \psi_1(2)\psi_2(1) \} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) + \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \right\},$$

cioè un solo stato e senza più degenerazione.

Le modifiche sono più sostanziali nel caso di due fermioni: il principio di Pauli impedisce di mettere due fermioni nello stesso livello, per cui gli stati corrispondenti a quello fondamentale e al secondo eccitato per i bosoni non sono più possibili. La situazione è rappresentata schematicamente in Fig. 14.2. Lo stato fondamentale di due fermioni ha un'energia $E_{sf} = \beta + 4\beta = 5\beta$, con autofunzione antisimmetrica

$$\psi_{tot}^{sf} = \psi_A^{sf} = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(1)\psi_2(2) - \psi_1(2)\psi_2(1) \} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) - \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \right\},$$

mentre l'energia del primo stato eccitato vale $E_{1^\circ} = \beta + 9\beta = 10\beta$.

E' bene sottolineare che in quanto precede abbiamo per semplicità trascurato la variabile di spin. Il caso più realistico di fermioni con spin verrà trattato nel prossimo paragrafo.

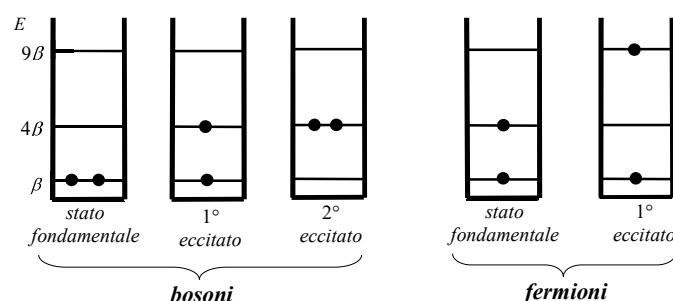


Figura 14.2. Due particelle quantistiche indistinguibili in una buca infinita. Rispetto al caso classico di Fig. 14.1, per i bosoni (sinistra) cambia la degenerazione e la forma di alcune autofunzioni, ma la sequenza delle energie rimane immutata. Nel caso dei fermioni (destra) anche la sequenza risulta del tutto diversa.

14.4 Obbligo di simmetrizzazione e spin.

Consideriamo adesso in maniera esplicita anche la variabile di spin, che gioca un ruolo di rilievo anche nella simmetrizzazione delle funzioni d'onda. Trattiamo in particolare il caso di due soli fermioni, che, pur essendo sufficientemente semplice, ben si presta a mettere in luce l'essenza del problema.

Come discusso alla fine del Par. 13.3, equazione (13.24), la funzione d'onda si fattorizza

in una parte che dipende solo dalla posizione per una che dipende solo dallo spin: $\psi = \varphi_{\text{spazio}} \chi_{\text{spin}}$. La prima parte, φ_{spazio} , è una funzione del tipo solito come quelle incontrate finora e quindi potrà essere simmetrica (φ_S) o antisimmetrica (φ_A) rispetto allo scambio dei due elettroni. La seconda parte, χ_{spin} , è invece composta da due variabili discrete ciascuna con due possibilità (corrispondenti ai due possibili valori $m_1 = +\frac{1}{2}$ e $m_2 = -\frac{1}{2}$ della componente z dello spin dei due elettroni). Come discusso nell'Es. 13.9, per la componente z dello spin totale delle due particelle si hanno quattro possibilità: $m_{\text{tot}} = m_1 + m_2 = -1, 0, 0, +1$. Questi quattro stati di spin possono essere combinati in maniera da formare stati simmetrici o antisimmetrici, generando lo stato di singoletto e i tre stati di tripletto (cf. Es. 13.9)

$$\begin{aligned} \text{singoletto } (s = 0, m_s = 0) : & \quad \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] \\ \text{tripletto } (s = 1) : & \quad \begin{cases} m_s = +1 & \chi_+(1)\chi_+(2) \\ m_s = 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)] \\ m_s = -1 & \chi_-(1)\chi_-(2) \end{cases} , \end{aligned}$$

in cui il primo è evidentemente antisimmetrico (χ_A) e gli altri tre simmetrici (χ_S).

L'obbligo di simmetrizzazione richiede che la funzione d'onda complessiva dei due elettroni (che sono fermioni) sia antisimmetrica rispetto allo scambio delle due particelle. Se la scriviamo come prodotto, $\psi = \varphi_{\text{spazio}} \chi_{\text{spin}}$, si vede che ci sono due possibilità: o si prende una funzione spaziale simmetrica (φ_S) e quella di spin antisimmetrica (χ_A), oppure si fa il contrario ($\varphi_A \times \chi_S$).

Se consideriamo lo stesso stato spaziale, la soluzione spaziale antisimmetrica è identicamente nulla (è sostanzialmente identica alla (14.19) con $a = b$) e quindi deve essere esclusa. Rimane quella simmetrica (spaziale) che comporta prendere quella antisimmetrica per la parte di spin, ossia il singoletto. Si ritrova la ben nota situazione secondo cui nello stesso stato quantico (per quanto riguarda le coordinate spaziali) possono essere messi due elettroni, uno con spin su ($m_1 = +\frac{1}{2}$) e l'altro con spin giù ($m_2 = -\frac{1}{2}$) a formare uno stato di singoletto. Se gli elettroni sono su stati diversi (spazialmente) allora potremo avere sia lo stato di singoletto ($s_{\text{tot}} = 0$) moltiplicato per la funzione spaziale simmetrica che lo stato di tripletto ($s_{\text{tot}} = 1$) moltiplicato per quella antisimmetrica.

Possiamo pensare, per fissare le idee, a due elettroni in una buca di potenziale infinita, nell'ipotesi di poter trascurare completamente la loro interazione coulombiana di modo da poterli trattare come indipendenti. Si tratta della stessa situazione dell'Es. 14.4, ma adesso teniamo conto esplicitamente anche dello spin. In questo caso, lo stato fondamentale si ottiene mettendo entrambi gli elettroni nel livello con $n = 1$ con spin opposto (o meglio nello stato di singoletto). Per questo stato (Fig. 14.9), l'energia totale vale $E = 2\beta$. Mettendo poi un elettrone nel livello $n = 1$ e l'altro in quello $n = 2$ si ottengono due stati, uno con spin paralleli (o più correttamente lo stato di tripletto con $s_{\text{tot}} = 1$) e l'altro con spin opposti (o più correttamente lo stato di singoletto con $s_{\text{tot}} = 0$).

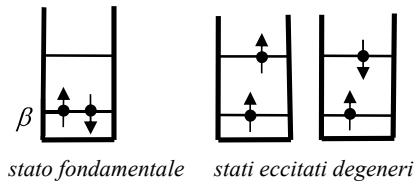


Figura 14.9. Due elettroni in una buca infinita. Lo stato eccitato è degenero corrispondentemente allo stato di tripletto e a quello di singoletto.

I due stati eccitati sono degeneri con energia $E = 5\beta$. Le autofunzioni corrispondenti si ottengono dal prodotto delle funzioni spaziali simmetriche e antisimmetriche dell'Es. 14.4, moltiplicate per quelle di spin (rispettivamente singoletto e tripletto)

$$\psi^{sf}(1,2) = \varphi_S \chi_A = \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \times \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)]$$

$$\begin{aligned} \psi^1(1,2) = \varphi_A \chi_S = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) - \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \right\} \times \begin{cases} \chi_+(1)\chi_+(2) \\ \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) + \chi_+(2)\chi_-(1)] \\ \chi_-(1)\chi_-(2) \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi^2(1,2) = \varphi_S \chi_A = \\ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_1\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_2\right) + \frac{2}{a} \sin\left(\frac{\pi}{a}x_2\right) \sin\left(\frac{2\pi}{a}x_1\right) \right\} \times \frac{1}{\sqrt{2}} [\chi_+(1)\chi_-(2) - \chi_+(2)\chi_-(1)] \end{aligned}$$

Gli ultimi due stati sono chiaramente molto diversi pur avendo la stessa energia.

In realtà, come discusso nel Par. 14.5.1 risulta che nello stato con funzione spaziale antisimmetrica (tripletto per lo spin) le particelle sono mediamente più lontane tra loro che nello stato con funzione spaziale simmetrica (singololetto per lo spin). Questo ha una conseguenza diretta non appena si considera anche l'interazione coulombiana repulsiva tra gli elettroni, che ha l'effetto di aumentare l'energia della coppia di particelle. Per il

tripletto, con elettroni lontani, l'aumento è minore che per il singoletto e la degenerazione viene rimossa. A causa dell'interazione (che tra particelle cariche c'è *sempre*) gli stati di tripletto risultano sempre più stabili (con energia minore) di quelli di singoletto. Fa eccezione lo stato fondamentale che è di singoletto, essendo il tripletto escluso dal principio di Pauli.

14.5 Complementi, applicazioni, esempi

14.5.1 Distanza media tra particelle indistinguibili. L'obbligo di simmetrizzazione con la conseguente richiesta di simmetria (o antisimmetria) delle funzioni d'onda dà luogo a un nuovo fenomeno, del tutto assente in fisica classica. Ciò può essere discusso con un semplice esempio, considerando due particelle in una dimensione e andando a calcolare il valor medio della loro distanza (o meglio del suo quadrato) nei vari casi di particelle classiche distinguibili, di particelle indistinguibili con funzione d'onda spaziale simmetrica (φ_S) e particelle indistinguibili con funzione d'onda spaziale antisimmetrica (φ_A). Si tratta cioè di calcolare il valore di aspettazione

$$\langle(\Delta x)^2\rangle = \langle(x_1 - x_2)^2\rangle = \langle x_1^2 \rangle + \langle x_2^2 \rangle - 2\langle x_1 x_2 \rangle$$

usando come funzioni d'onda spaziali le tre diverse espressioni

$$\begin{aligned}\varphi_{tot}^{classiche} &\Rightarrow \varphi_a(x_1)\varphi_b(x_2) \\ \varphi_S &= \{\varphi_a(x_1)\varphi_b(x_2) + \varphi_a(x_2)\varphi_b(x_1)\}/\sqrt{2} \\ \varphi_A &= \{\varphi_a(x_1)\varphi_b(x_2) - \varphi_a(x_2)\varphi_b(x_1)\}/\sqrt{2}\end{aligned}$$

Considerando al solito funzioni d'onda ortonormali, $\int \varphi_a^*(x)\varphi_b(x)dx = \delta_{ab}$, per particelle

classiche si trova

$$\langle x_1^2 \rangle = \int x_1^2 |\varphi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\varphi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_a ; \quad \langle x_2^2 \rangle = \int |\varphi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2^2 |\varphi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x^2 \rangle_b$$

cioè i valori di aspettazione del quadrato della coordinata negli stati di particella singola (notare che sono diversi per le due particelle, come giusto se sono distinguibili); inoltre

$$\langle x_1 x_2 \rangle = \int x_1 |\varphi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\varphi_b(x_2)|^2 dx_2 = \langle x \rangle_a \langle x \rangle_b$$

e quindi

$$\langle(x_1 - x_2)^2\rangle_{classiche} = \langle x^2 \rangle_a + \langle x^2 \rangle_b - 2\langle x \rangle_a \langle x \rangle_b \quad (14.20).$$

Nel caso di particelle indistinguibili il conto è leggermente più complicato

$$\begin{aligned}
 < x_1^2 >_{\pm} &= \frac{1}{2} \left\{ \int x_1^2 |\varphi_a(x_1)|^2 dx_1 \int |\varphi_b(x_2)|^2 dx_2 + \int x_1^2 |\varphi_b(x_1)|^2 dx_1 \int |\varphi_a(x_2)|^2 dx_2 + \right. \\
 &\quad \left. \pm \int x_1^2 \varphi_a(x_1)^* \varphi_b(x_1) dx_1 \int \varphi_b(x_2)^* \varphi_a(x_2) dx_2 \pm \int x_1^2 \varphi_b(x_1)^* \varphi_a(x_1) dx_1 \int \varphi_a(x_2)^* \varphi_b(x_2) dx_2 \right\} = \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ < x^2 >_a + < x^2 >_b \pm 0 \pm 0 \right\} = \frac{1}{2} \left\{ < x^2 >_a + < x^2 >_b \right\}
 \end{aligned}$$

dove il segno superiore e inferiore corrispondono rispettivamente alla funzione simmetrica e antisimmetrica e nell'ultimo passaggio si è tenuto conto dell'ortogonalità delle funzioni di particella singola. Il valor medio del quadrato della coordinata della seconda particella, $< x_2^2 >$, si calcola allo stesso modo e si trova ovviamente lo stesso risultato, essendo le particelle indistinguibili. Infine il termine misto vale

$$\begin{aligned}
 < x_1 x_2 >_{\pm} &= \frac{1}{2} \left\{ \int x_1 |\psi_a(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_b(x_2)|^2 dx_2 + \int x_1 |\psi_b(x_1)|^2 dx_1 \int x_2 |\psi_a(x_2)|^2 dx_2 + \right. \\
 &\quad \left. \pm \int x_1 \psi_a(x_1)^* \psi_b(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_b(x_2)^* \psi_a(x_2) dx_2 \pm \int x_1 \psi_b(x_1)^* \psi_a(x_1) dx_1 \int x_2 \psi_a(x_2)^* \psi_b(x_2) dx_2 \right\} = \\
 &= \frac{1}{2} \left\{ < x >_a < x >_b + < x >_b < x >_a \pm < x >_{ab} < x >_{ba} \pm < x >_{ba} < x >_{ab} \right\} = < x >_a < x >_b \pm |< x >_{ab}|^2
 \end{aligned}$$

dove si è introdotto l'integrale di sovrapposizione

$$< x >_{ab} = \int x \varphi_a(x)^* \varphi_b(x) dx \equiv < a | x | b > \quad (14.21).$$

Il valor medio $<(\Delta x)^2>$ per funzioni simmetriche (segno superiore) e antisimmetriche (segno inferiore) vale pertanto

$$< (x_1 - x_2)^2 >_{\pm} = < x^2 >_a + < x^2 >_b - 2 < x >_a < x >_b \mp 2 |< x >_{ab}|^2 .$$

Confrontando questo risultato con la (14.20) si vede che la presenza del termine di sovrapposizione dà luogo a una variazione rispetto al caso classico: particelle identiche con funzione d'onda spaziale simmetrica distano tra loro mediamente meno delle particelle classiche indistinguibili, mentre quelle con funzione d'onda spaziale antisimmetrica distano di più. In altri termini, particelle descritte da funzione d'onda spaziale simmetrica tendono a stare vicine tra loro mentre quelle descritte da funzione d'onda spaziale antisimmetrica tendono a stare lontane, come se ci fosse una qualche interazione che fa sì che le prime si attraggano e le seconde si respingano: è questa la cosiddetta **interazione di scambio**, su cui torneremo nel seguito. Questa interazione, manifestazione dell'obbligo di simmetrizzazione imposto dall'indistinguibilità delle particelle quantistiche, è presente solo finché c'è una certa sovrapposizione tra le funzioni d'onda delle particelle singole, cioè se c'è una regione di spazio dove le due funzioni $\varphi_a(x)$ e $\varphi_b(x)$ sono entrambe diverse da zero, il che rende il termine (14.21) non nullo.

Franco Ciccacci

Fondamenti di Fisica Atomica e Quantistica

Accedi ai contenuti digitali ➤ Espandi le tue risorse ➤ con un libro che **non pesa** e si **adatta** alle dimensioni del tuo lettore



All'interno del volume il **codice personale** e le istruzioni per accedere ai **contenuti digitali**. L'accesso alle risorse digitali è **gratuito** ma limitato a **18 mesi dalla attivazione del servizio**.