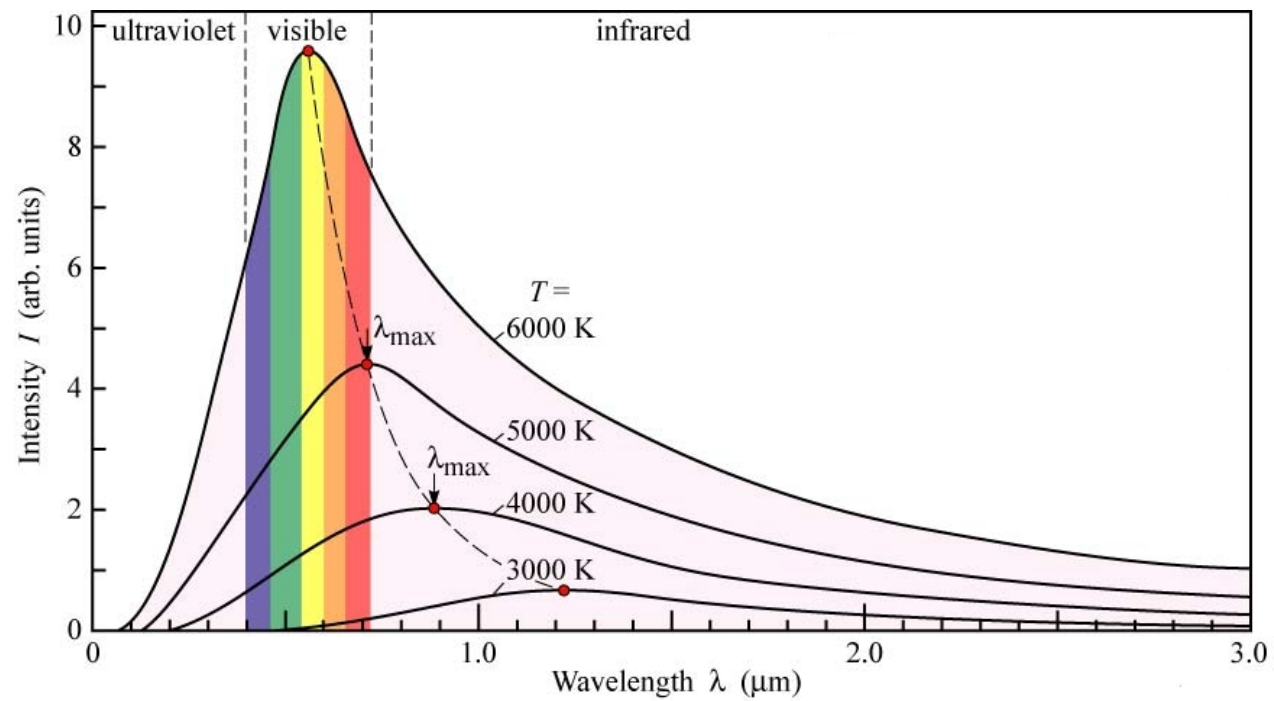


LE ORIGINI DELLA TEORIA QUANTISTICA

LEZIONE N.3

DUALISMO ONDA-PARTICELLA

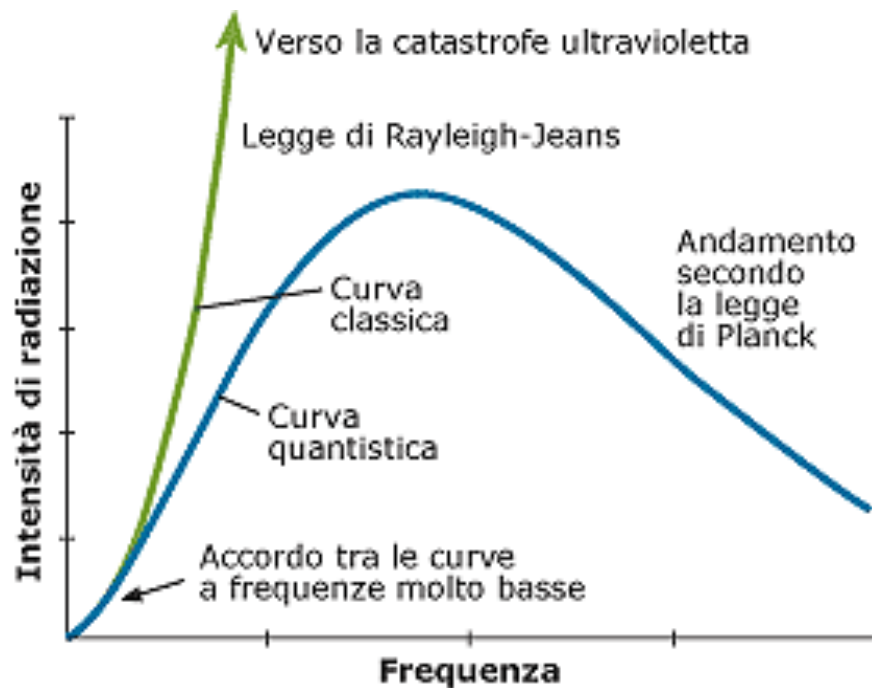
Legge di Wien (1893) $T \lambda_M = b$



POSTULATO DI PLANCK (1900)

L' Energia è quantizzata, con un contenuto proporzionale alla frequenza (n intero):

$$E_n(\nu) = nh\nu$$



$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

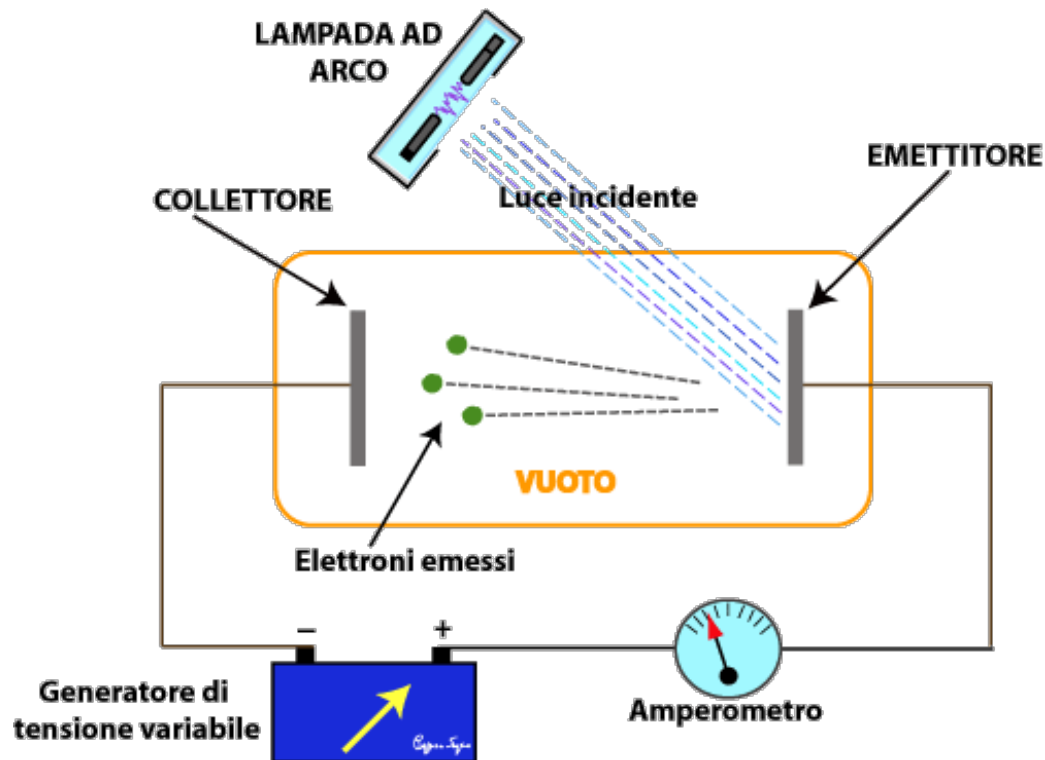
Energia media

$$f(\nu) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Spettro intensità

Spettro di corpo nero di Planck che riproduce perfettamente i dati sperimentali

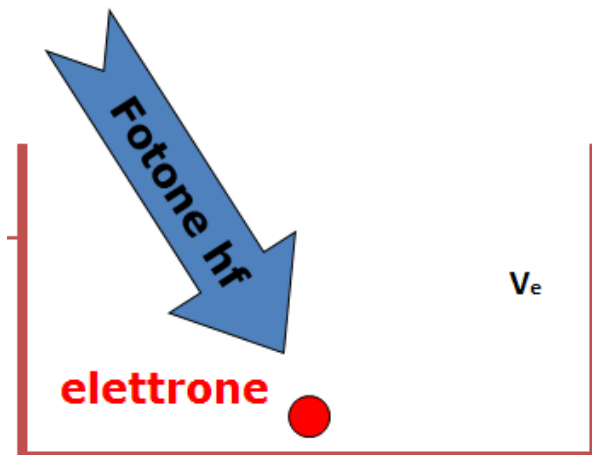
EFFETTO FOTOELETTRICO ESPERIMENTO DI LENARD (1902)



L'effetto Fotoelettrodo fu per la prima volta osservato da Hertz prima del 1880.

Nel 1902 Philipp Lenard avviò una serie di esperimenti per determinare come l'energia dei fotoelettroni emessi dipendesse dall'intensità della luce. Come sorgente luminosa utilizzò una lampada ad arco di notevole potenza che gli permise una escursione in intensità di un fattore mille. Gli elettroni emessi dal fotocatodo finivano su una piastra metallica, il collettore, che era a sua volta collegato al primo mediante un filo conduttore attraverso un sensibile amperometro in tal modo era possibile misurare la corrente di elettroni prodotta dall'illuminazione.

EFFETTO FOTOELETTRICO EINSTEIN (1905)



L'effetto fotoelettrico può essere interpretato come un *urto* tra un fotone e un elettrone (Einstein 1905).

Se l'energia del fotone è *maggiore* del lavoro di estrazione l'elettrone supera la barriera e fuoriesce con una certa energia cinetica

$$E_{cm} = h\nu - L_e$$

L'effetto fotoelettrico può essere interpretato come un *urto* tra un fotone, quanto di radiazione, e un elettrone (Einstein 1905).

$$E_{cm} = h\nu - L_e$$

Appare una evidente contraddizione, ci basiamo sulla teoria ondulatoria per trovare l'energia $h\nu$ del fotone !!!

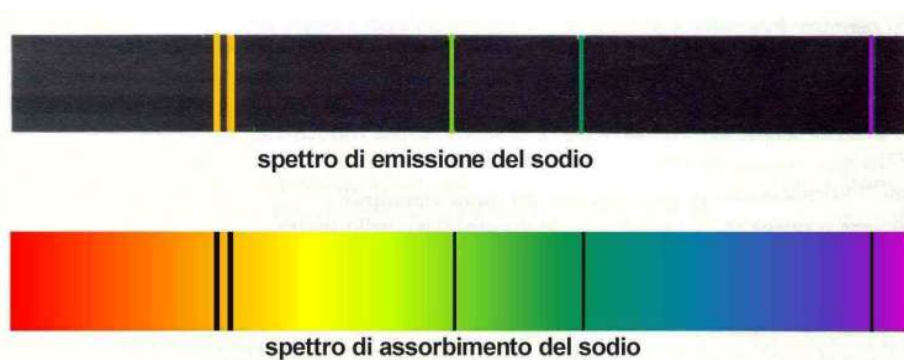
Se il fotone è un corpuscolo, come avviene l'interferenza di due fenditure misurate da Young?

***R. FEYNMAN:** è impossibile prevedere cosa farà il singolo fotone, non siamo in grado di prevedere se il fotone passerà per la fenditura A o B. Possiamo solo parlare di probabilità dell'evento A o B. La natura ci permette solo di calcolare tale probabilità.*

SPETTRO DI ASSORBIMENTO ED EMISSIONE



Un gas reso incandescente (in questo caso l'idrogeno), emette energia solo su alcune frequenze. Lo stesso gas esposto ad una luce assorbe le stesse frequenze che emette quando è riscaldato. Uno spettro di assorbimento (righe in alto) è quindi il negativo dello spettro di emissione (righe in basso).



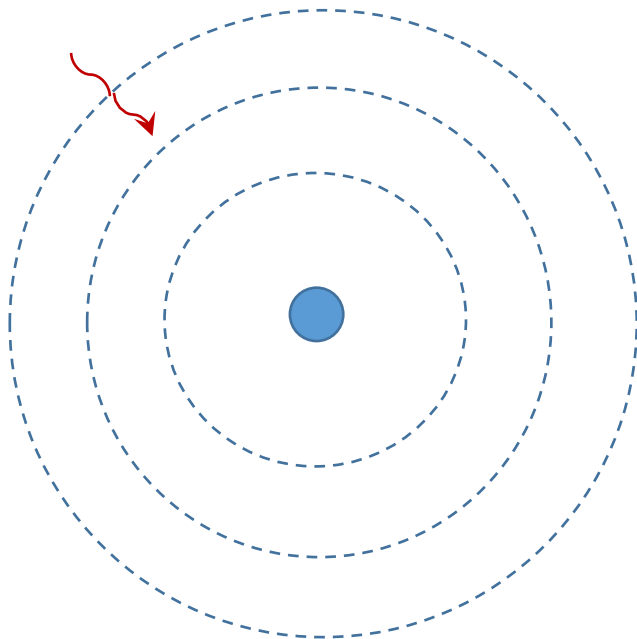
Balmer 1885

$$\lambda = b \frac{n^2}{n^2 - 4}$$

$b = 3645,6$ Angstrom

Sono ammesse solo le orbite stazionarie, l'energia può essere assorbita o emessa mediante un salto da un'orbita all'altra

Il raggio inferiore è detto primo raggio di Bohr dell'atomo di idrogeno



$$r_n = \frac{n^2}{m_e} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2$$

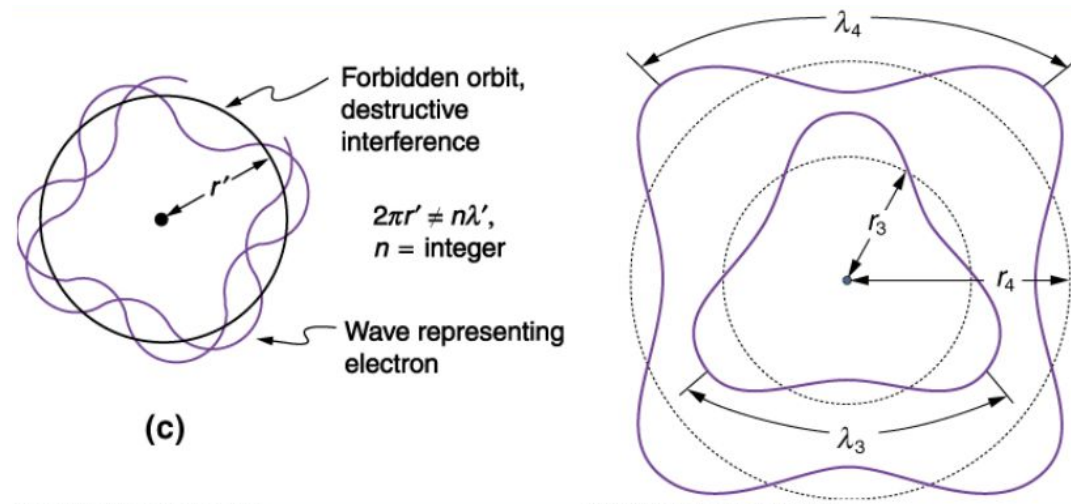
$$r_0 = \frac{1}{m_e} \frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 = 0,529 \text{ Angstrom}$$

$$E_n = -\frac{1}{n^2} \frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0}$$

$$r_n = n^2 r_0$$

$$\nu = \frac{E_n - E_m}{h} = \frac{1}{2h} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_0} \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right)$$

DUALISMO ONDA-PARTICELLA : DE BROGLIE



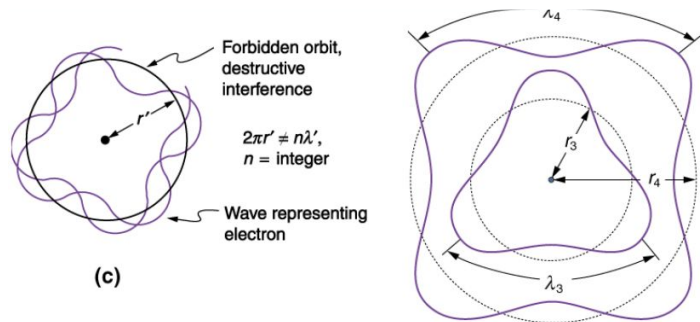
DUALISMO ONDA-PARTICELLA : DE BROGLIE

PLANCK: Quantizzazione del campo elettromagnetico contenuto in una cavità

EINSTEIN: Quantizzazione del campo elettromagnetico che si propaga - fotone

BOHR: Quantizzazione dell'energia degli elettroni legati al nucleo

Ripartiamo dal raggio dell'atomo di Bhor



$$r_n = n^2 \frac{4\pi\epsilon_0}{m_e e^2} \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2$$

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r_n^2} = \frac{m_e v_n^2}{r_n}$$

$$e^2 = 4\pi\epsilon_0 m_e v_n^2 r_n$$

$$(2\pi r_n)^2 = \frac{n^2 h^2}{m_e^2 v_n^2}$$

$$2\pi r_n = n \frac{h}{m_e v_n}$$

nell'ipotesi di De Broglie

$$2\pi r_n = n\lambda$$

otteniamo per la quantità di moto dell'elettrone

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

DUALISMO ONDA-PARTICELLA : DE BROGLIE

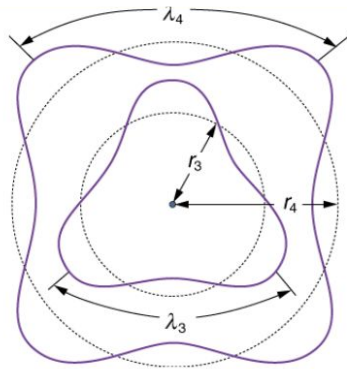
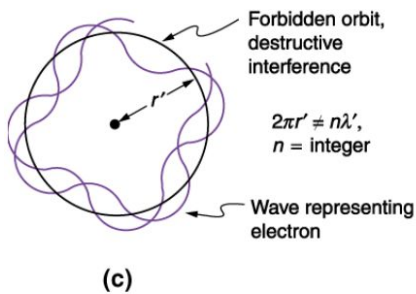
Le uniche orbite consentite sono quelle che contengono un numero intero di onde stazionarie.

$$E = h\nu$$

$$p = \frac{h}{\lambda}$$

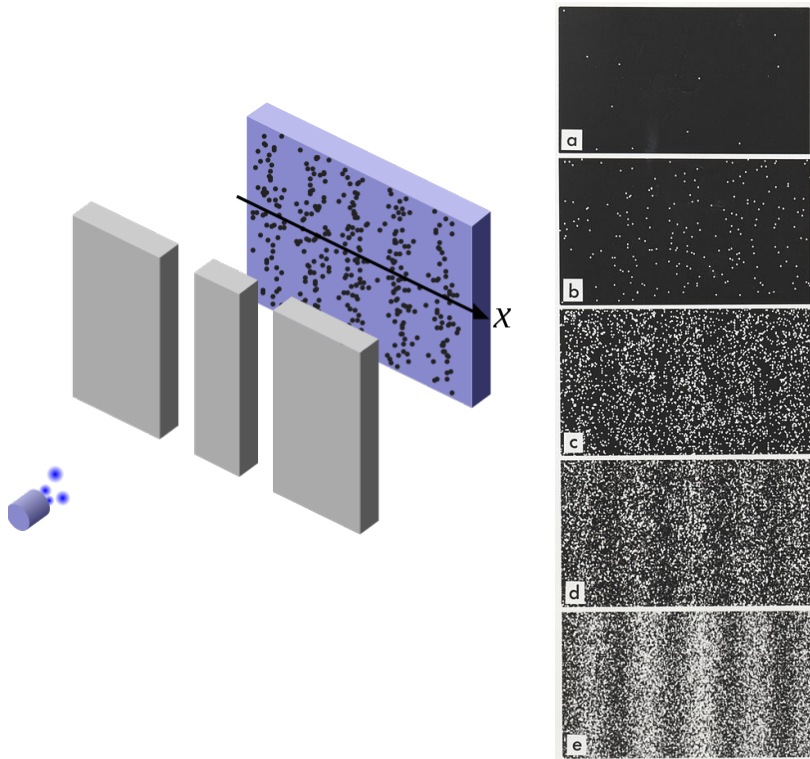
La quantizzazione di Bohr equivale a imporre che sono permesse solo le orbite che contengono un numero intero di lunghezze d'onda

De Broglie introduce di fatto un'onda elettronica associata all'elettrone.



DUALISMO ONDA-PARTICELLA (2)

Esperimento interferenza elettroni attraverso due fenditure (un elettrone alla volta)



Come fa l'elettrone a decidere in quale fenditura passare? Con che legge fisica ?

Per questi fenomeni non possiamo utilizzare leggi deterministiche, riusciamo a descrivere il comportamento della natura solo utilizzando leggi probabilistiche.

Non possiamo più affermare che un elettrone occupi una determinata posizione nello spazio e nel tempo, altrimenti non avremmo l'interferenza!! E sarebbe difficile spiegare l'ipotesi di De Broglie !!

MECCANICA ONDULATORIA EQUAZIONE DI SCHROEDINGER (1)

Assumiamo la natura ondulatoria mediante un'onda piana

Parametri ondulatori	$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -k^2 \psi$	$\begin{cases} k = \frac{2\pi}{\lambda} \\ \omega = \frac{2\pi}{T} \end{cases}$	$\psi(x) = \psi_0 e^{j(kx - \omega t)}$
Onda De Broglie	$\begin{cases} \lambda = \frac{h}{p} \\ E = h\nu \end{cases}$	$\Rightarrow \begin{cases} k = \frac{2\pi p}{h} \\ \omega = \frac{2\pi E}{h} \end{cases}$	$\Rightarrow \psi(x) = \psi_0 e^{j\frac{2\pi}{h}(px - Et)}$

In un potenziale esterno V , l'elettrone possiede una energia meccanica pari a

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

MECCANICA ONDULATORIA EQUAZIONE DI SCHROEDINGER (2)

$$\psi(x) = \psi_0 e^{j\frac{2\pi}{h}(px - Et)}$$

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

Eseguiamo i seguenti passaggi : moltiplichiamo per ψ

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi$$

Eseguiamo le seguenti derivate:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\left(\frac{2\pi}{h}\right)^2 p^2 \psi$$



$$p^2 \psi = -\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -j\left(\frac{2\pi}{h}\right) E \psi$$



$$E\psi = j\left(\frac{h}{2\pi}\right) \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

Sostituiamo, ricaviamo l'equazione di Schroedinger che dipende dal tempo – (premio Nobel 1933)

$$-\left(\frac{h}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = j\left(\frac{h}{2\pi}\right) \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

MECCANICA ONDULATORIA EQUAZIONE DI SCHROEDINGER (3)

In presenza di un potenziale V costante, anche E è costante

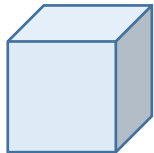
$$\frac{1}{2m} \left(\frac{h}{2\pi} \right)^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + V\psi = -E\psi$$

Equazione di Schroedinger indipendente dal tempo

Costituisce l'equazione fondamentale della meccanica quantistica

FUNZIONE D'ONDA COMPLESSA $\psi(\vec{r}, t)$

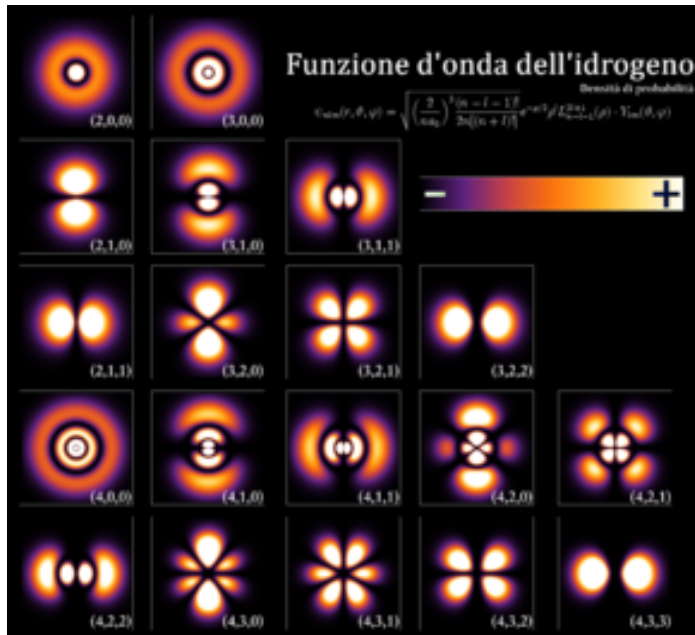
$|\psi(\vec{r}, t)|^2$ rappresenta la probabilità $d\mathcal{P}$ che in un istante t l'elettrone sia contenuto nell'elemento di volume $d\tau$. Integrando su tutto lo spazio otteniamo:



$d\tau$

$$\int |\psi(\vec{r}, t)|^2 d\tau = \int \psi \psi^* d\tau = 1$$

EQUAZIONE DI SCHROEDINGER – ORBITALI ATOMICI



Il **numero quantico di spin** m_s ($m_s = \pm \frac{1}{2}$) indica il valore di spin che può essere assunto dall'elettrone

Mentre il modello atomico di Bohr considerava gli elettroni intorno al nucleo secondo orbite circolari, il modello atomico di Schroedinger definisce regioni dello spazio in cui il quadrato della funzione d'onda raggiunge i valori più elevati. Tali regioni furono chiamate orbitali e rappresentano le zone in cui è massima la probabilità di trovare un elettrone.

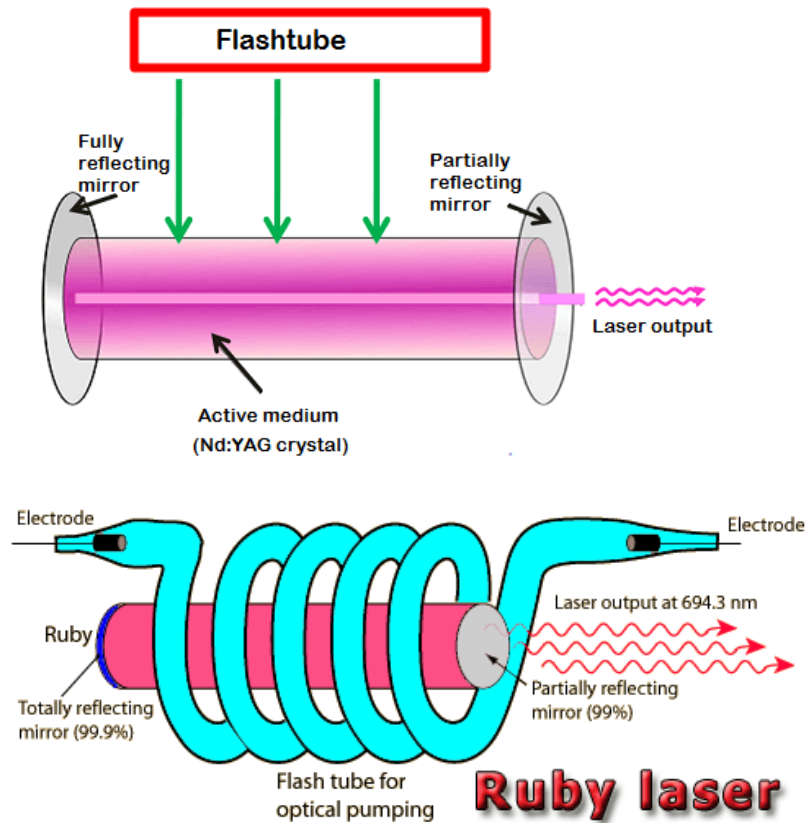
La funzione d'onda contiene tre numeri interi, detti **numeri quantici** (n, l e m)

Il **numero quantico principale** n ($n = 1, 2, 3, \dots, 7$) definisce il livello energetico dell'elettrone

Il **numero quantico secondario** l ($l = 0, 1, \dots, n-1$) determina le caratteristiche geometriche dell'orbitale

Il **numero quantico magnetico** m ($m = -l, 0, +l$) definisce quanti orbitali della stessa forma, ma con orientazione diversa

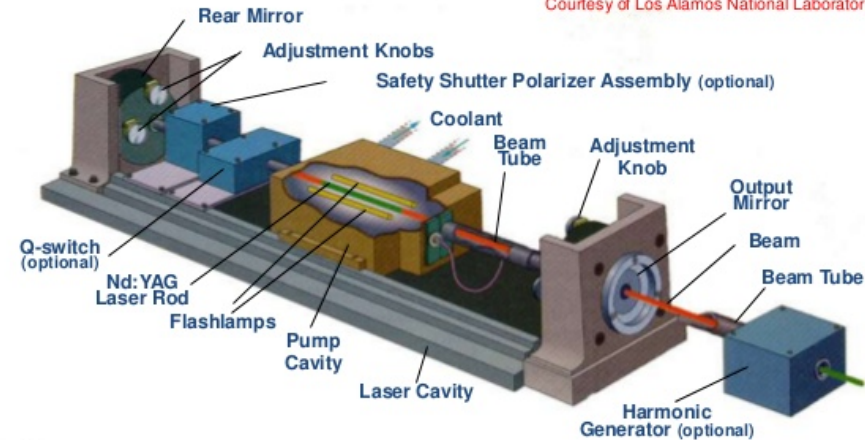
IL LASER (Light Amplifier Stimulated Emission Radiation)



Intro to
lasers

NEODYMIUM YAG LASER

Courtesy of Los Alamos National Laboratory



Medium :- Neodymium-Doped Yttrium Aluminum Garnet Crystal

State :- Solid

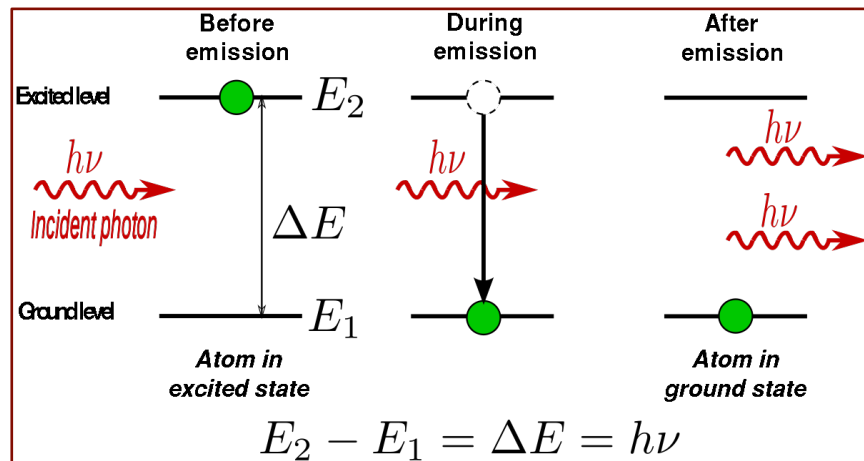
Excitation :- Diode Laser

Beam :- 1064 nm infrared

Uses :- Cataract , Glaucoma , Gingivectomy surgeries

IL LASER (Light Amplifier Stimulated Emission Radiation)

Sfrutta l'assorbimento stimolato e l'emissione di quanti di radiazione da parte di un materiale

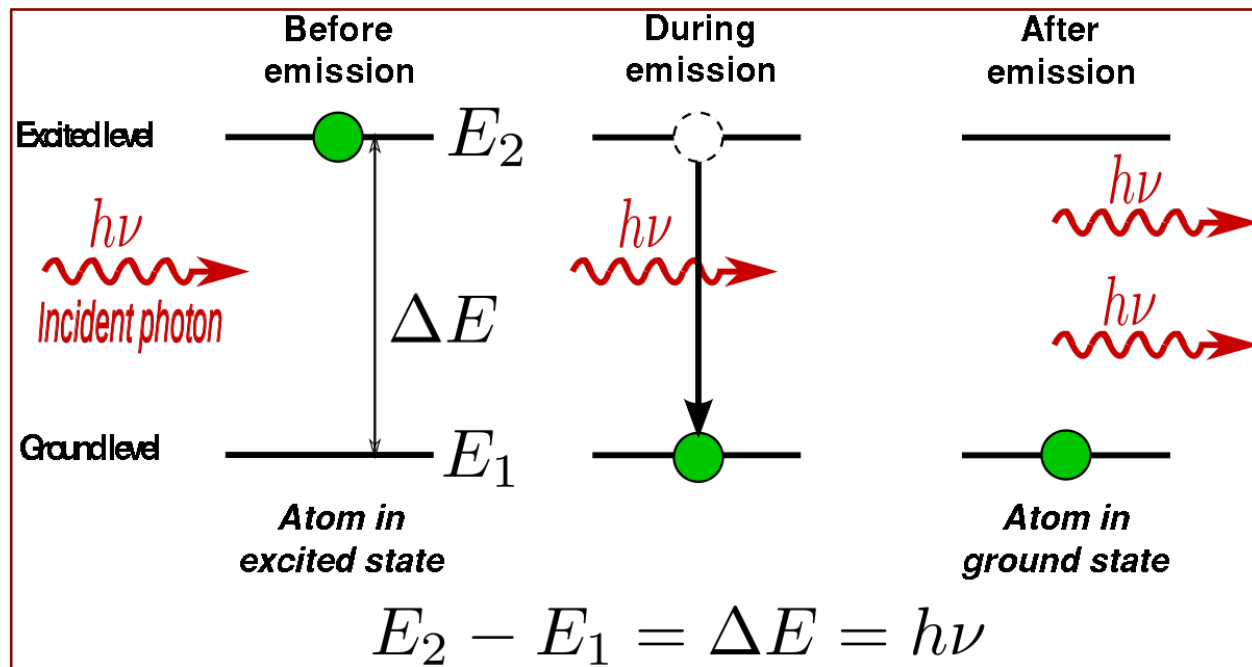


1) A partire da uno stato fondamentale E_1 (ground level) l'atomo può assorbire fotoni di frequenza ν tale che salta ad uno stato di energia superiore E_2 (livello eccitato).

2) L'atomo tende a decadere nello stato fondamentale emettendo radiazione:

- a) Emissione Spontanea
- b) Emissione Stimolata

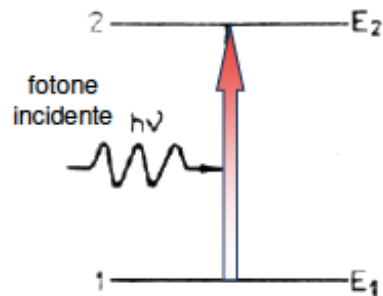
IL LASER (Light Amplifier Stimulated Emission Radiation)



IL LASER (Light Amplifier Stimulated Emission Radiation)

Assorbimento

- Il fotone incidente viene assorbito generando la transizione $E_1 \rightarrow E_2$.



$$dN_1/dt = -W_{12}N_1$$

N_1 – popolazione su livello 1

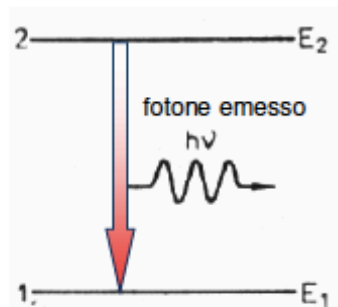
dN_1/dt – variazione nel unità del tempo della popolazione nel livello 1

W_{12} – probabilità di assorbimento (funzione del materiale e dell'intensità dell'onda stimolante)

IL LASER (Light Amplifier Stimulated Emission Radiation)

Emissione spontanea

$E_2 > E_1$ → l'atomo tende a diseccitarsi spontaneamente dal livello 2 su livello 1 emettendo un fotone.



$$(dN_2/dt)_{sp} = -AN_2$$

N_2 – popolazione su livello 2

dN_2/dt – variazione nel unità del tempo della popolazione nel livello 2

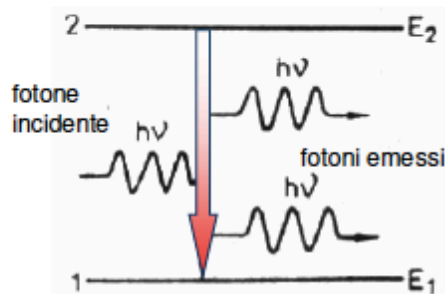
A – probabilità di emissione spontanea (*coef. A di Einstein*)
(funzione del materiale)

Nell'emissione spontanea, i fotoni vengono emessi in modo casuale, essi non hanno nessuna relazione di fase fra di loro → luce incoerente.

IL LASER (Light Amplifier Stimulated Emission Radiation)

Emissione stimolata

- Il fotone incidente stimola la transizione 2 – 1, risultando 2 fotoni (stimolatore e stimolato)



$$(dN_2/dt)_{st} = -W_{21} N_2$$

All'equilibrio termico il numero di transizioni tra assorbimento ed emissione deve essere uguale

$$N_2(W_{21} + A) = N_1 W_{12}$$

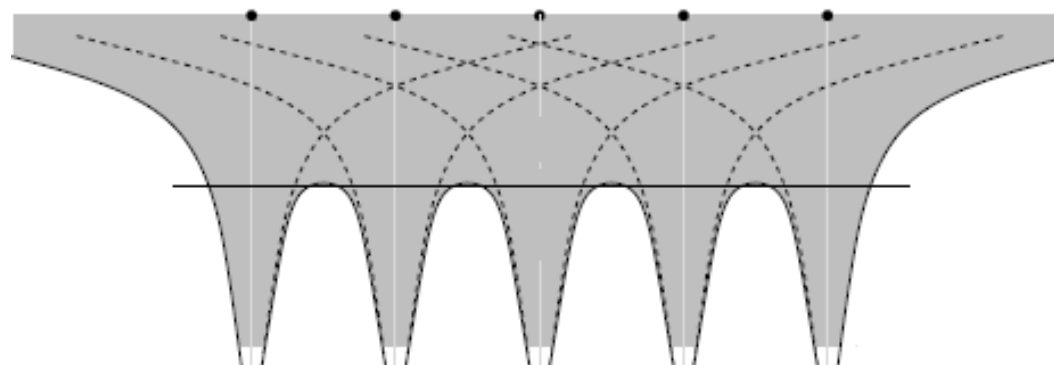
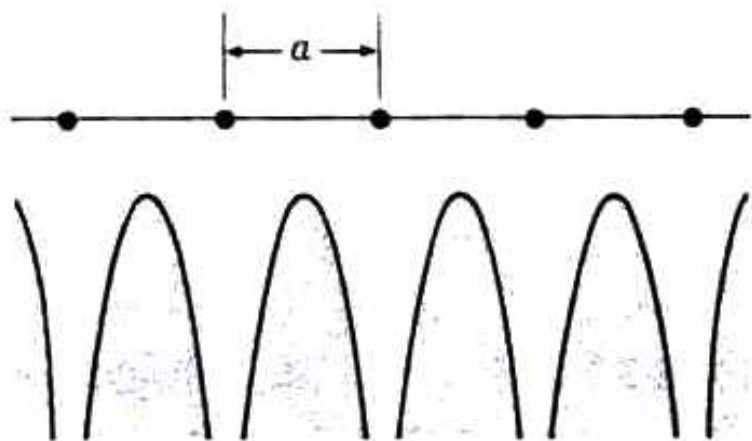
N_2 – popolazione su livello 2

dN_2/dt – variazione nel unità del tempo della popolazione nel livello 2

W_{21} – probabilità di emissione stimolata (funzione del materiale e dell'intensità dell'onda stimolante)

CONDUZIONE NEI SOLIDI

CONDUZIONE NEI SOLIDI



gli elettroni nei cristalli

esempio in una dimensione: $V(x)=V(x+a)$

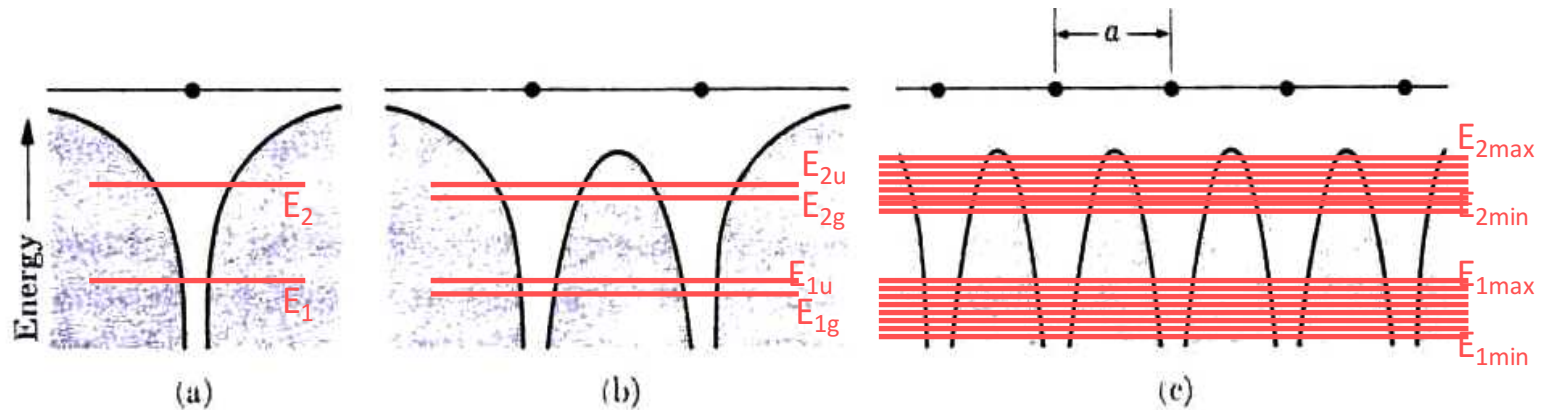
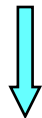
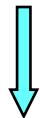


Fig. 6-15. Coulomb potential energy due to (a) a single ion, (b) two ions, (c) several ions in a row.



atomo singolo
↓
livelli energetici
singoli



due atomi
↓
livelli energetici
sdoppiati



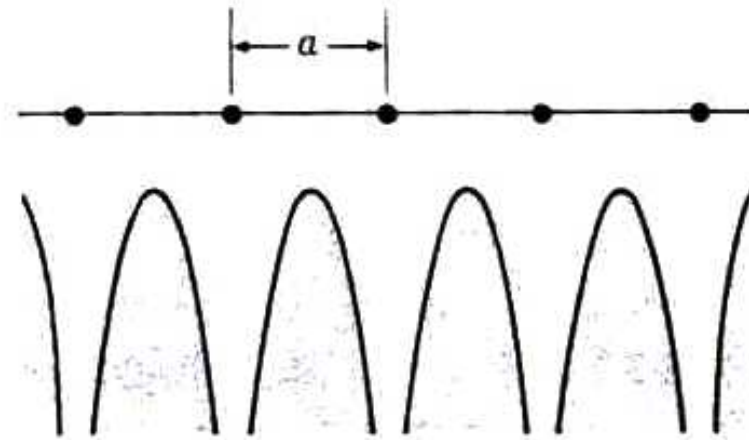
molti atomi
↓
multipletti di livelli
energetici

*moto di un elettrone in un
potenziale periodico:
soluzione formale*

Hamiltoniana:

$$H(x) = \frac{p_x^2}{2m} + V(x)$$

esempio in una dimensione: $V(x)=V(x+a)$



l'hamiltoniana è **invariante per traslazioni di passo a** (periodica): $H(x)=H(x+a)$

funzione d'onda: $H(x)\psi(x) = E\psi(x)$

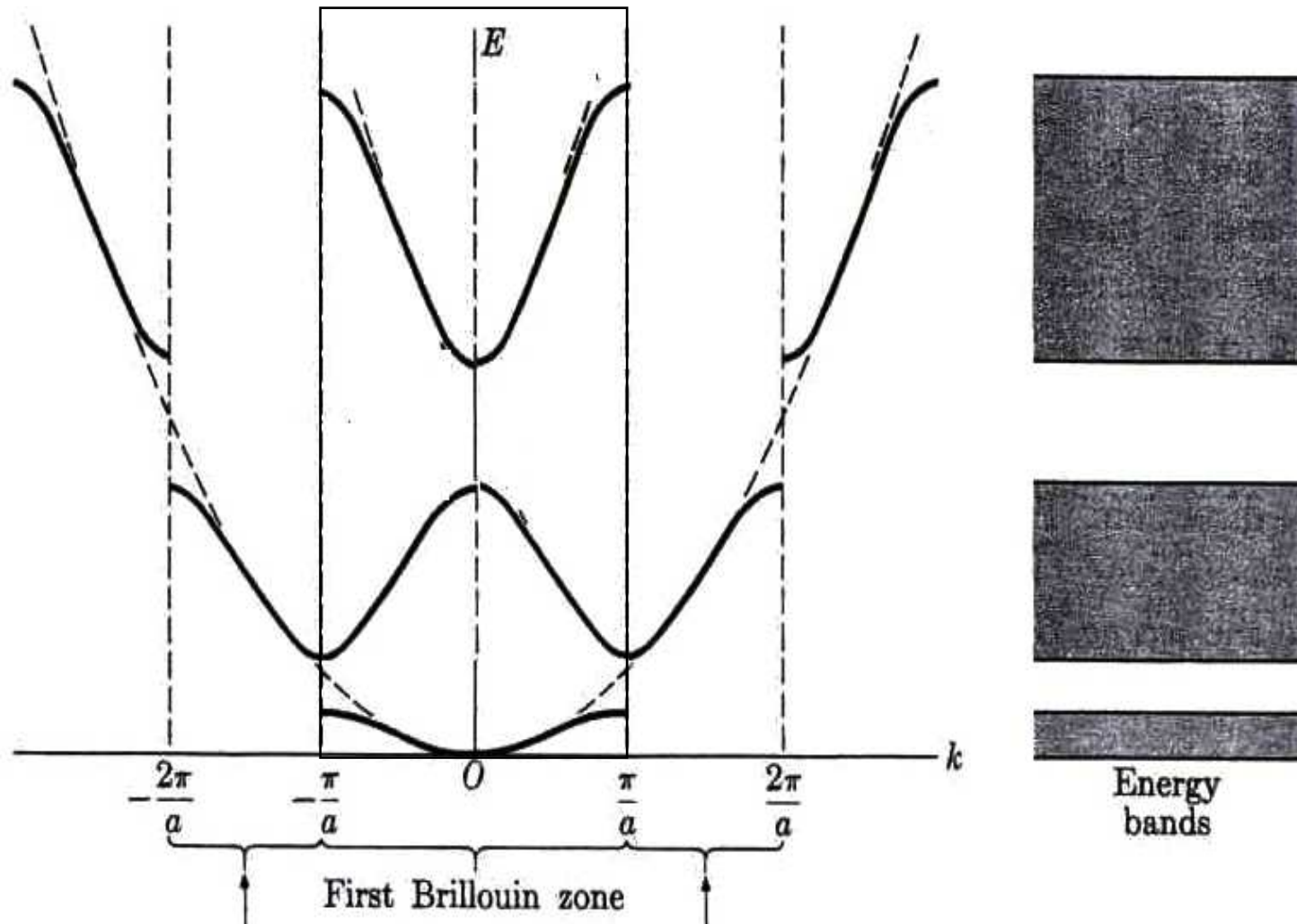


anche $\psi(x)$ deve essere **invariante per traslazioni** ?

Non necessariamente, ma $|\psi(x)|^2$ deve esserlo

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(x+a)|^2$$

bande di energia permesse e bande proibite



il teorema di Bloch

per soddisfare la condizione $|\psi(x)|^2 = |\psi(x+a)|^2$ la funzione d'onda deve poter essere scritta come

$$\psi(x) = e^{ikx} u(x)$$

con $u(x)$ invariante per traslazioni : $u(x) = u(x+a)$

$\psi(x)$ è chiamata “onda di Bloch”

verifica del teorema di Bloch:

come conseguenza dell'invarianza traslazionale, $\psi(x)$ può differire da $\psi(x+a)$ al più per una fase:

$$\psi(x+a) = e^{i\alpha} \psi(x)$$

infatti:

$$\psi(x+a) = e^{ik(x+a)} u(x+a) = e^{ika} e^{ikx} u(x) = e^{ika} \psi(x) = e^{i\alpha} \psi(x)$$

con $\alpha = ka$, $u(x+a) = u(x)$

significato fisico dell'**onda di Bloch**: è il prodotto di

- un'onda piana e^{ikx} → **elettrone libero**
- una funzione $u(x)$ identica sotto traslazioni di un passo reticolare a $u(x)$ → **funzione d'onda "in vicinanza" del singolo atomo**

funzione d'onda di Bloch

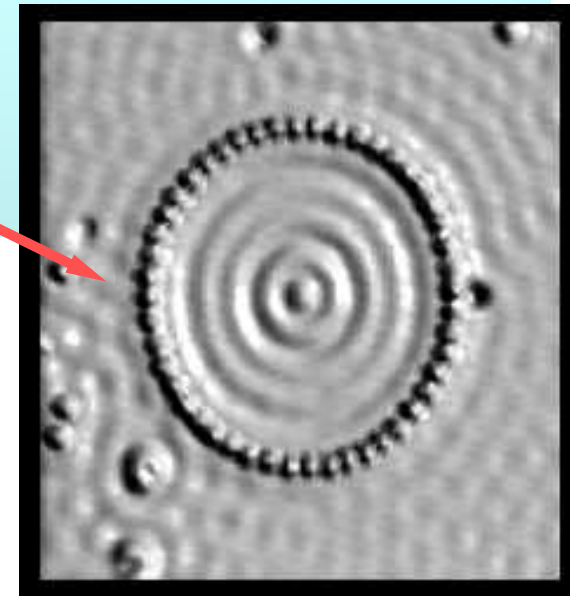
$$\frac{p_x^2}{2m} e^{ikx} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} e^{ikx}$$

p_x → costante del moto
→ k buon numero quantico

potenziale modulatore periodico $V(x)$ grande:
→ si parte dalla funzione d'onda periodica e si include l'effetto della fase e^{ikx}
→ **approssimazione di legame forte**

potenziale modulatore periodico $V(x)$ piccolo:

- si parte dall'onda di elettrone libero e si corregge per l'effetto di $V(x)$
- elettroni di conduzione nei metalli;
- "quantum corral"



CONDUZIONE NEI SOLIDI

La meccanica quantistica dimostra che quando gli atomi isolati si uniscono per formare il cristallo, la struttura dei livelli energetici degli elettroni più esterni e le corrispondenti funzioni d'onda viene drasticamente modificata. Mentre, infatti, i livelli energetici e le funzioni d'onda degli elettroni degli strati interni non vengono apprezzabilmente cambiati, di modo che tali elettroni rimangono vincolati ai singoli atomi, i livelli della shell più esterna risultano sensibilmente alterati dalla presenza degli atomi vicini; al posto dei singoli livelli energetici nettamente distinti presenti nell'atomo isolato, l'accoppiamento tra le funzioni d'onda degli elettroni porta alla formazione di una fitta banda di livelli energetici a cui corrispondono stati elettronici delocalizzati. In altri termini, un elettrone che occupa uno dei livelli della banda non è vincolato ad un atomo ma è condiviso da diversi atomi del cristallo. Sono proprio gli elettroni appartenenti a tale banda, chiamata *banda di valenza*, che non essendo confinati all'interno di un singolo atomo, possono contribuire alla conduzione elettrica.

CONDUZIONE NEI SOLIDI

Al disopra della banda di valenza (ma, in genere, anche al disotto) si ha la formazione di altre bande di energia, separate una dall'altra da intervalli *proibiti* di energia, chiamati *gaps energetici*

