



UNIMORE
UNIVERSITÀ DEGLI STUDI DI
MODENA E REGGIO EMILIA

Dipartimento di Scienze Fisiche,
Informatiche e Matematiche

Dalla fisica classica alla fisica moderna



Spettri di emissione e assorbimento di gas di atomi

Dal modello di Rutherford al modello di Bohr

Il modello atomico di Bohr

Cenni di spettroscopia atomica

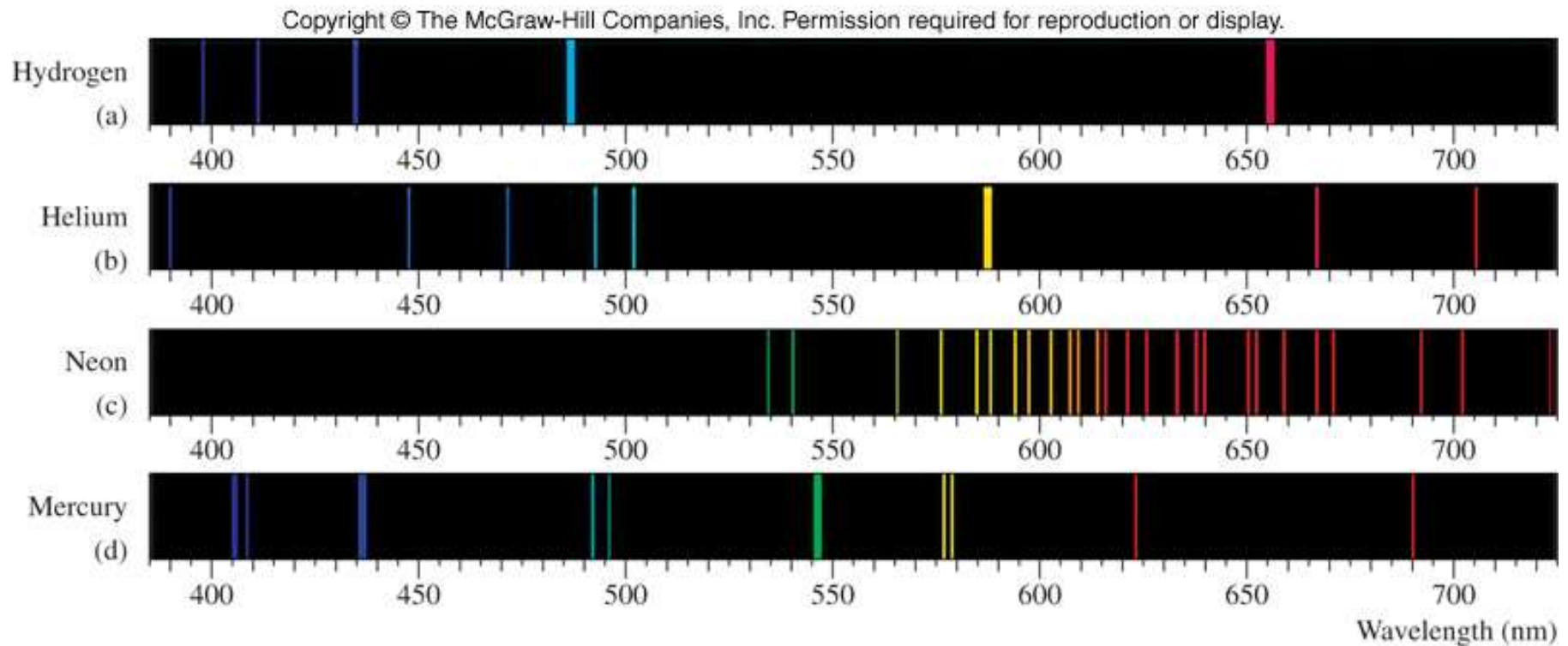
Dai livelli discreti alle bande di energia dei solidi

Spettroscopia di emissione/assorbimento di gas e solidi

Un gas portato ad alta temperatura emette luce secondo uno spettro a righe (righe luminose su fondo nero). Ogni elemento ha il suo proprio insieme di righe spettrali.

Un solido portato ad alta temperatura emette, invece, luce con spettro continuo.

Esempi di spettri di emissione



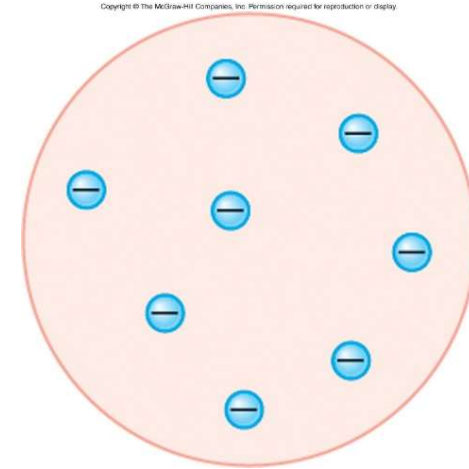
Questa è la luce che emette un gas di atomi eccitati.

Il fisico sperimentale Balmer trovò che la seguente formula rende conto della distribuzione delle lunghezze d'onda emesse da un gas di atomi di Idrogeno nel visibile (serie di Balmer).

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right)$$

$R = 1.097 \times 10^7, \text{ m}^{-1}$ è una costante, detta costante di Rydberg, e $n \geq 3$.

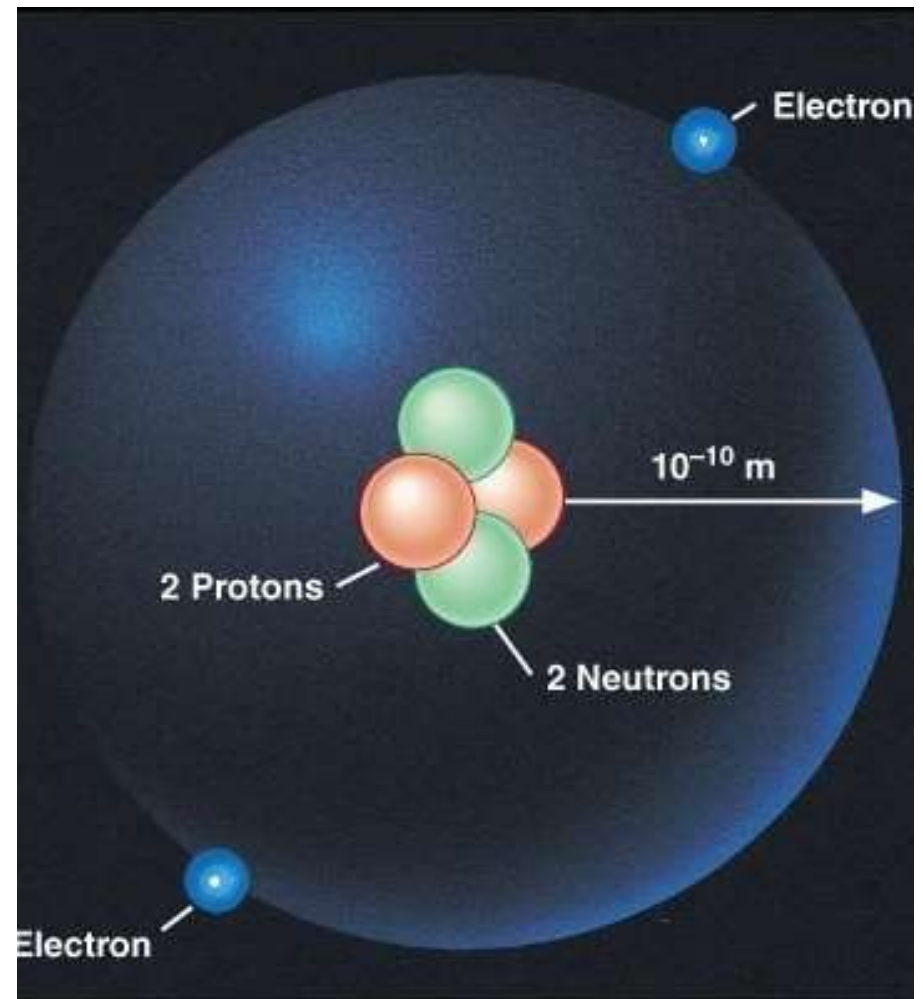
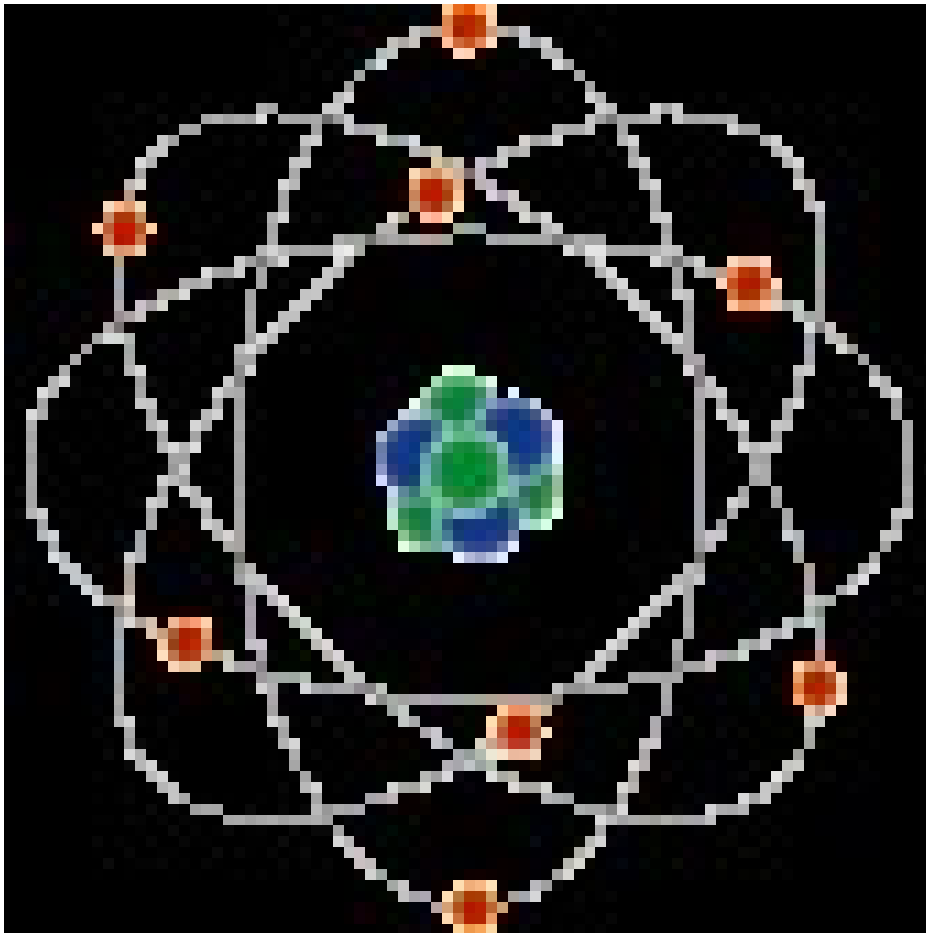
Il primo modello atomico, proposto da **Thomson**, prevedeva la carica positiva distribuita uniformemente sul volume atomico e la carica negativa (elettroni) immersa in questo volume.



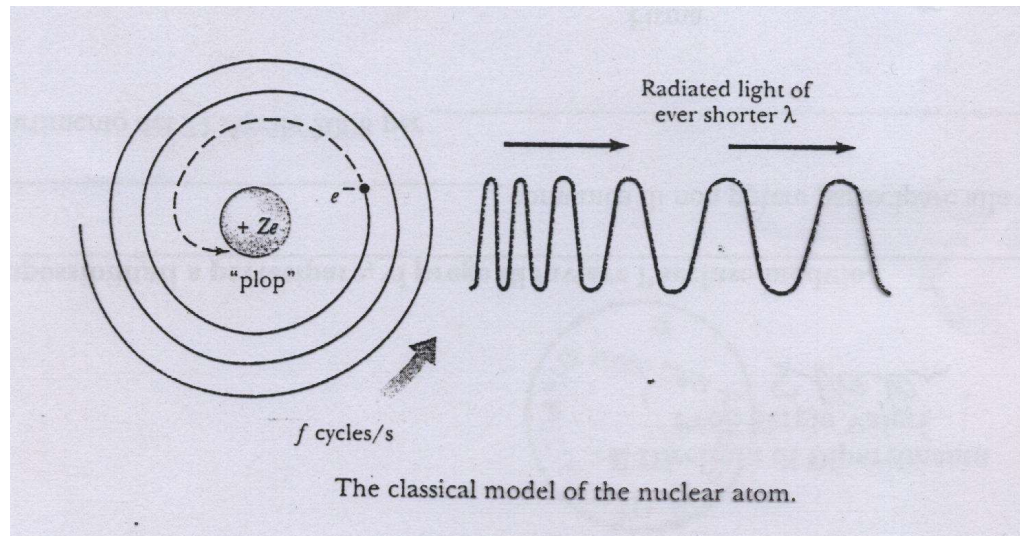
Rutherford realizzò un esperimento in cui fasci di nuclei di He venivano focalizzati su una lastra di oro praticamente monoatomica. L'interpretazione dei dati dell'esperimento portò alla conclusione che **l'atomo ha un nucleo molto piccolo di carica positiva** (10^{-5} volte più piccolo della dimensione dell'atomo) che contiene praticamente tutta la massa dell'atomo, e che **questo nucleo è circondato dagli elettroni**.

Il modello di Rutherford

<https://www.youtube.com/watch?v=s4rTK3MkmE8>



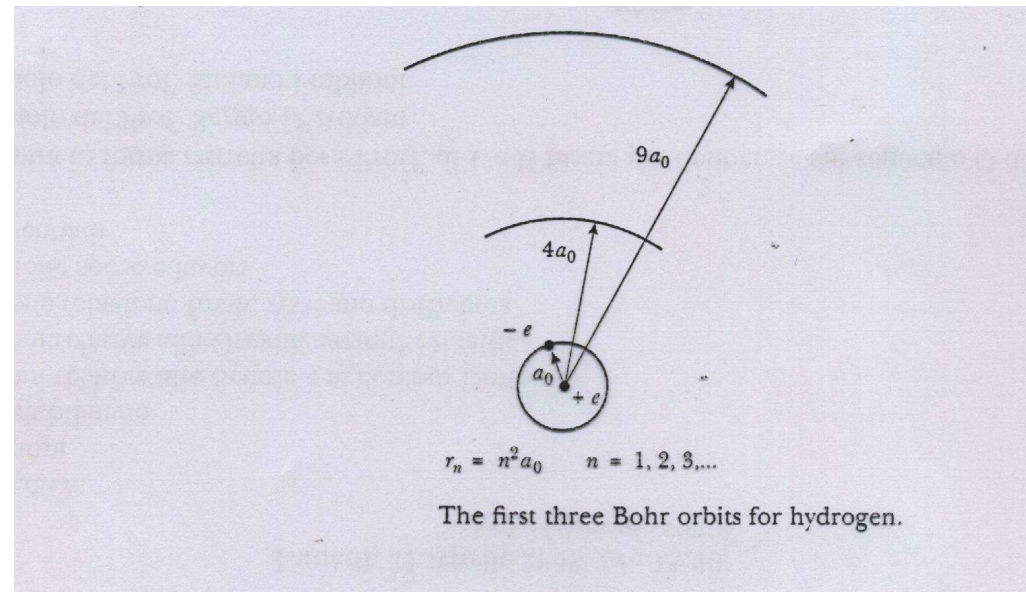
PROBLEMONE



Secondo le leggi della fisica classica gli elettroni sulle loro orbite dovrebbero emettere energia (in quanto cariche accelerate) . Questo comporterebbe una riduzione progressiva del raggio dell'orbita, fino al collasso degli elettroni sul nucleo. Gli atomi quindi non sarebbero stabili, che è ovviamente falso. Inoltre rimangono non spiegati gli spettri a righe dei gas.

Il modello di Bohr per l'atomo di Idrogeno

Gli elettroni occupano stabilmente solo stati di fissata energia, (momento angolare) e raggio, chiamati **stati stazionari**. Negli stati stazionari sono quindi quantizzati l'energia, (il momento angolare) e il raggio dell'orbita.



Grandezze continue e quantizzate

Una grandezza fisica si dice **continua** se i possibili valori che essa può assumere sono distribuiti in modo continuo in un intervallo di valori. Ad esempio, la velocità di una particella accelerata dalla forza gravitazionale.

Una grandezza fisica si dice **quantizzata** se i possibili valori che essa può assumere sono limitati ad un insieme discrete. Ad esempio, la carica elettrica è quantizzata:

$$Q=Nq$$

In fisica classica ci sono alcuni altri esempi di grandezze quantizzate. Per esempio le frequenze delle onde che si posso eccitare su una corda che vibra mantenendo gli estremi fissati (per esempio, la corda di una chitarra).

Nel modello di Bohr valgono le leggi della fisica classica per l'elettrone nello stato stazionario.

Tuttavia l'elettrone può passare da uno stato stazionario ad un altro assorbendo o emettendo energia pari alla differenza di energia tra gli stati stazionari di arrivo e partenza: $\Delta E = hf$.

La condizione di quantizzazione di Bohr che identifica gli stati stazionari è la seguente:

$$mv_n 2\pi r_n = nh$$

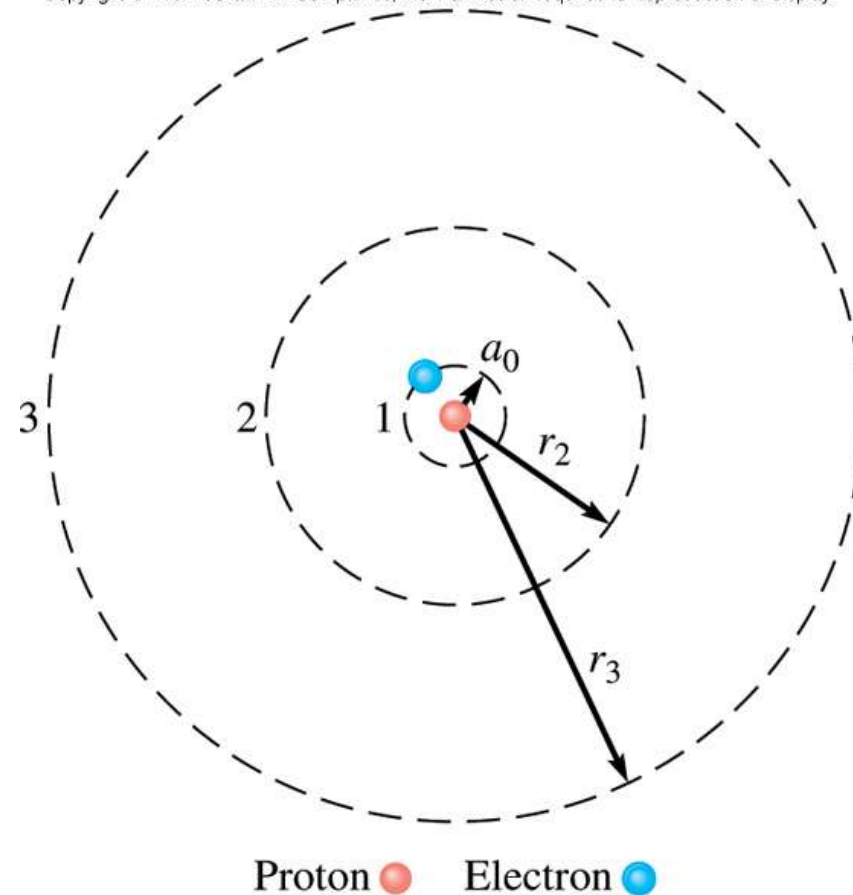
n è un intero positivo e h
è la costante di Planck.

I raggi delle orbite stazionarie per l'elettrone dell'atomo di Idrogeno sono:

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e k e^2} = n^2 a_0$$

dove $a_0 = 52.9 \text{ pm}$ è chiamato *raggio di Bohr*.

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Le energie degli stati stazionari sono:

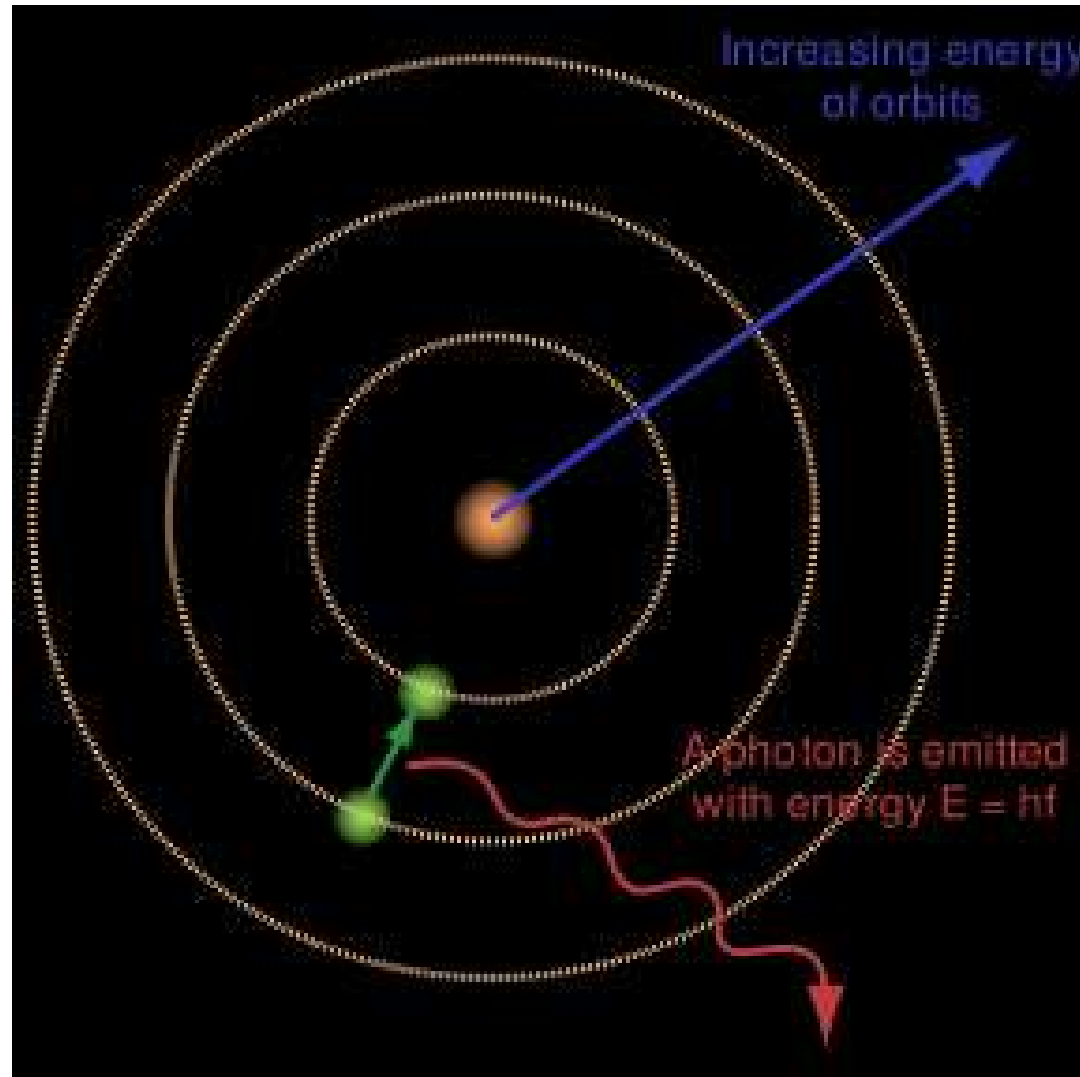
$$E_n = -\frac{m_e k^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = \frac{E_1}{n^2}$$

dove $E_1 = -13.6$ eV è **l'energia dello stato fondamentale** dell'atomo di Idrogeno, la più bassa possibile.

Se $n > 1$ l'elettrone è in uno stato eccitato. L'intero n è detto **numero quantico principale**.

Il modello di Bohr

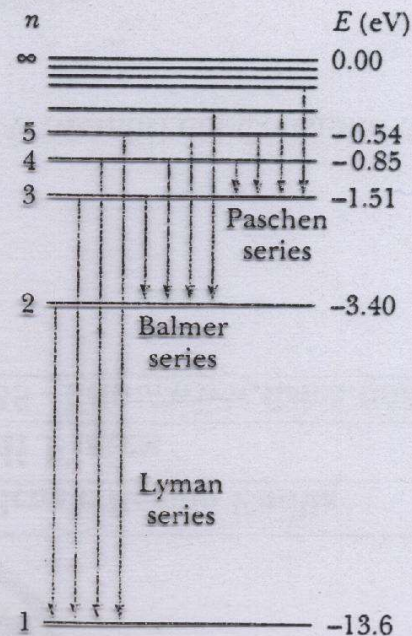
<http://www.raiscuola.rai.it/articoli/atomo-il-modello-di-bohr-la-scienza-per-concetti/9100/default.aspx>



Spiegazione degli spettri di assorbimento ed emissione dell'Idrogeno

Some Spectral Series for the Hydrogen Atom

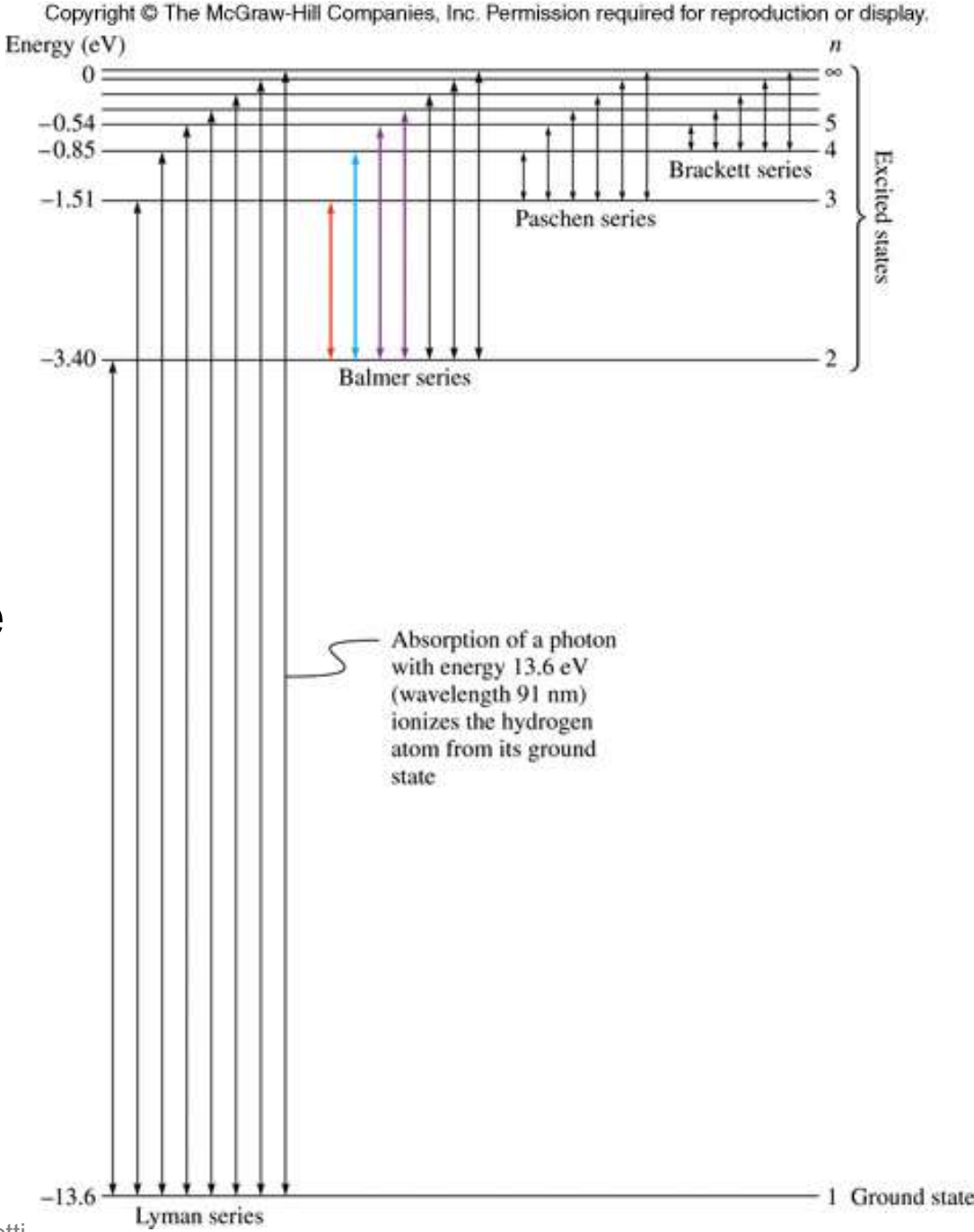
Lyman Series (uv)	$n_f = 1$	$n_i = 2, 3, 4 \dots$
Balmer Series (vis-uv)	$n_f = 2$	$n_i = 3, 4, 5 \dots$
Paschen Series (IR)	$n_f = 3$	$n_i = 4, 5, 6 \dots$
Brackett Series (IR)	$n_f = 4$	$n_i = 5, 6, 7 \dots$
Pfund Series (IR)	$n_f = 5$	$n_i = 6, 7, 8 \dots$



An energy level diagram for hydrogen. In such diagrams the discrete allowed energies are plotted on the vertical axis. Nothing is plotted on the horizontal axis, but the horizontal extent of the diagram is made large enough to show allowed transitions. Note that the quantum numbers are given on the left.



Distribuzione dei livelli energetici dell'elettrone nell'atomo di Idrogeno.



Il modello di Bohr interpreta correttamente la distribuzione delle linee spettrali dell'idrogeno nel visibile.

L'energia emessa (o assorbita) sotto forma di luce da un elettrone nella transizione è

$$E = \frac{hc}{\lambda} = E_i - E_f = -E_1 \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

$$\frac{1}{\lambda} = -\frac{E_1}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right)$$

dove $-\frac{E_1}{hc} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1} = R$ è la costante di Rydberg

Per $n_f=2$, abbiamo la formula di Balmer.

Il modello di Bohr rende anche correttamente conto degli spettri degli atomi idrogenoidi (cioè degli atomi con un solo elettrone , per esempio Li^{2+}).

Fallisce per atomi a molti elettroni.

Raggi degli stati
stazionari

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{m_e k Z e^2} = \frac{n^2 a_0}{Z}.$$

Energie degli stati
stazionari

$$E_n = -\frac{m_e k^2 Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = \frac{Z^2 E_{1\text{H}}}{n^2}$$

Z è il numero atomico e $E_{1\text{H}} = -13.6 \text{ eV}$.



Trovare il raggio di Bohr per Li^{2+}

$$r_n = \frac{n^2 a_0}{Z}$$

$$r_1 = \frac{1^2 a_0}{3} = \frac{1}{3} a_0 = 17.6 \text{ pm}$$

L'elettrone dello stato fondamentale di questo atomo è più vicino al nucleo di quanto avverrebbe per l'atomo di Idrogeno.



Trovare l'energia in eV richiesta per rimuovere l'elettrone dello ione Li^{2+} .

$$E_n = \frac{Z^2 E_{1\text{H}}}{n^2}$$

L'elettrone è nello stato fondamentale ($n=1$), quindi

$$E_1 = \frac{3^2 E_{1\text{H}}}{1^2} = 9 E_{1\text{H}} = -122 \text{ eV}.$$

Questa è l'energia richiesta per rimuovere l'elettrone.



Un atomo di Idrogeno ha un elettrone nello stato stazionario con $n=5$. (a) Se l'elettrone transisce allo stato fondamentale, qual'è il minimo (massimo) numero di fotoni che possono essere emessi?

Il minimo numero è un fotone, associate alla transizione da $n = 5$ a $n = 1$.

Il massimo numero di fotoni è cinque, corrispondenti alle transizioni da $n = 5$ a $n=4$, poi a $n=3$ poi a $n=2$ poi a $n = 1$.

Altri numeri quantici

L'energia non è l'unica quantità ad essere quantizzata per un elettrone atomico.

Momento angolare orbitale $L = \left(\sqrt{l(l+1)}\right)\hbar$ $l=0, 1, 2, \dots, n-1$

**La componente del momento
angolare lungo un arbitrario asse z**

$$L_z = m_l \hbar$$

$$m_l = -l, -l+1, \dots, -1, 0, +1, \dots, l-1, l$$

**Il grado di rotazione intrinseco,
detto “spin”. Lungo una qualunque
direzione z:**

$$S_z = m_s \hbar \quad m_s = \pm 1/2$$

Principio di esclusione di Pauli

Due elettroni atomici non possono occupare lo stesso stato (cioè devono avere ALMENO un numero quantico differente)

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.

Table 28.1

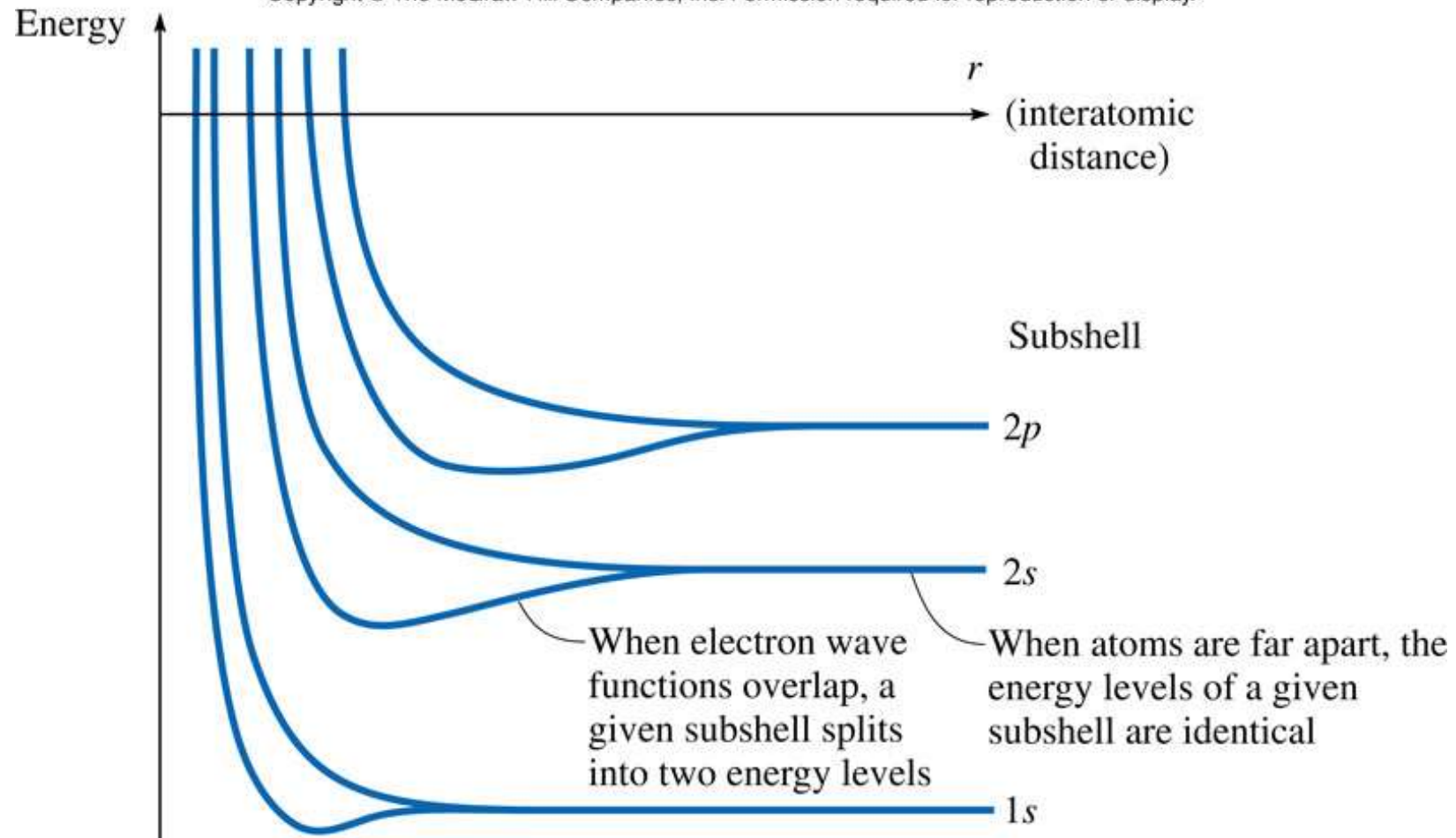
Quantum Numbers for Electron States in an Atom

Symbol	Quantum Number	Possible Values
n	principal	$1, 2, 3, \dots$
ℓ	orbital angular momentum	$0, 1, 2, 3, \dots, n-1$
m_ℓ	orbital magnetic	$-\ell, -\ell+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell-1, \ell$
m_s	spin magnetic	$-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$

Energie permesse nei solidi

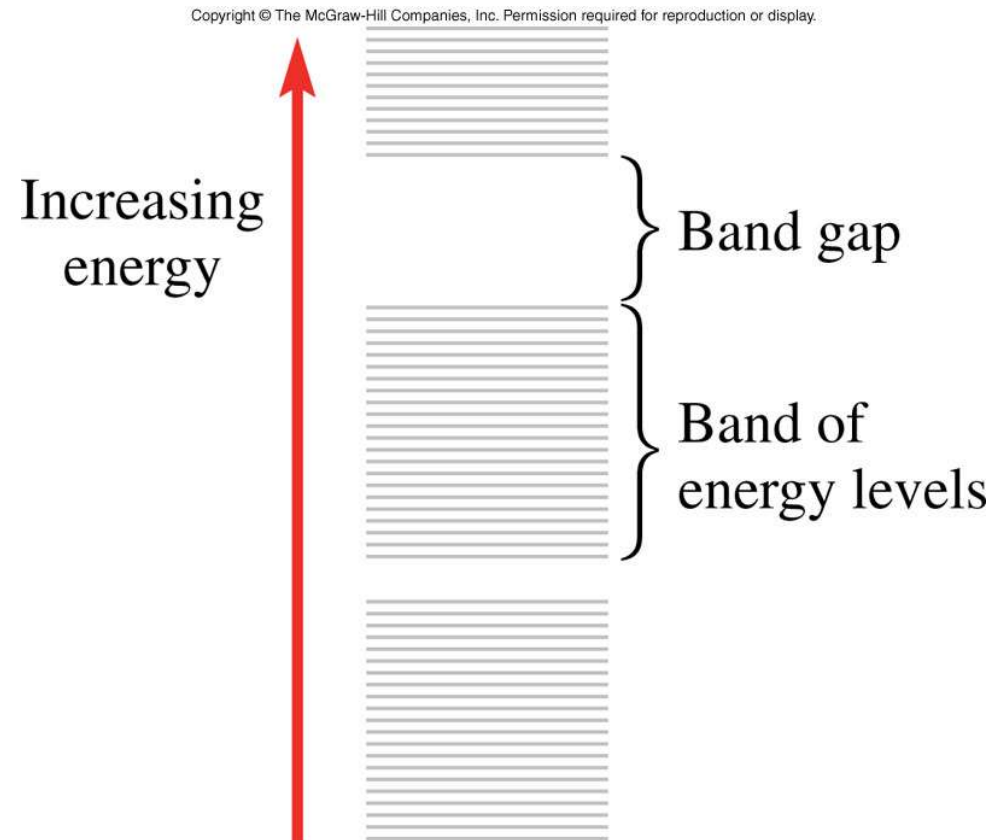
Un atomo isolato può emettere soltanto fotoni di energia E corrispondente alla differenza di energia tra due diversi livelli atomici (spettro a righe).

Quando due atomi interagiscono i livelli energetici atomici si differenziano.



In un solido formato da un numero molto grande N di atomi, ogni livello energetico atomico, nel formare il solido, dà luogo alla formazione di una **banda** di N valori tanto vicini da poter essere considerati un continuo di energie.

Tra una banda e l'altra possono esserci dei **gap** di energia, cioè degli intervalli di energie proibite agli elettroni.



Un materiale è un **conduttore** se l'ultima banda piena a $T=0$ lo è solo parzialmente, oppure se l'ultima banda piena si sovrappone alla prima vuota.

Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Gap

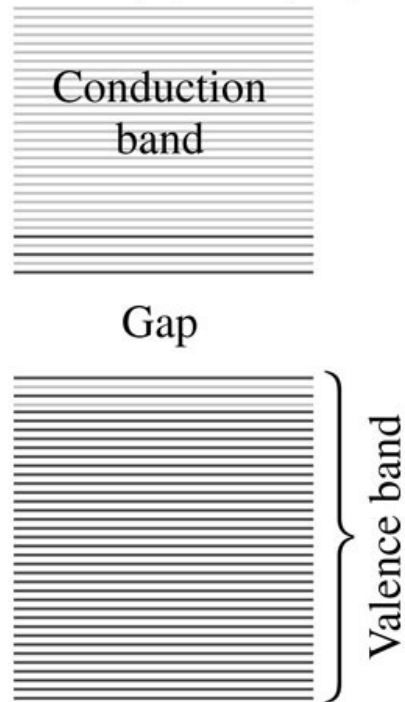


Conductor

(a)

Se invece gli elettroni del material riempiono completamente le bande in cui sono collocati, il materiale può essere o un **semiconduttore** o un **isolante**.

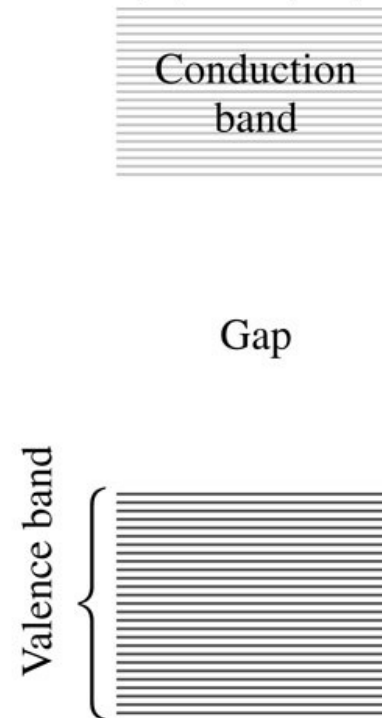
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Semiconductor

(b)

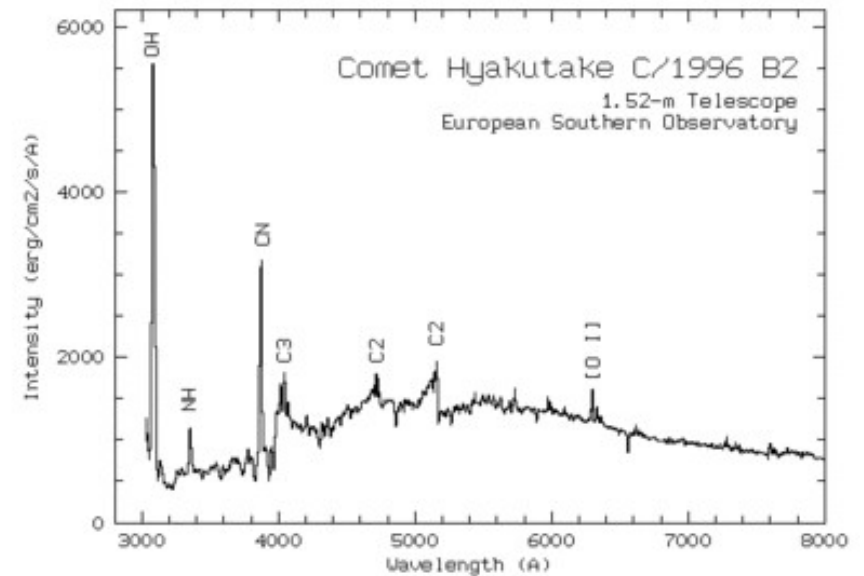
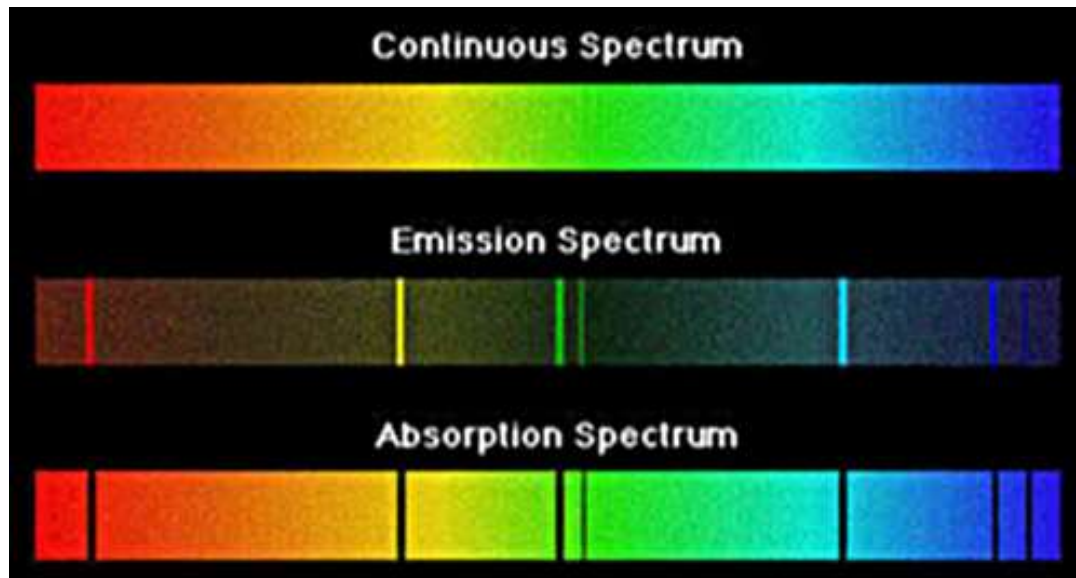
Copyright © The McGraw-Hill Companies, Inc. Permission required for reproduction or display.



Insulator

(c)
20

La presenza di bande di energia porta come conseguenza spettri di emissione e assorbimento continui



SOMMARIO

Il modello di Rutherford e il fallimento della fisica classica

Il modello atomico di Bohr: i livelli energetici

Cenni ai numeri quantici

Dagli atomi isolati ai solidi: le bande di energia