# Regole di quantizzazione di Bohr

Nel 1913 Bohr propose un modello di atomo che spiegava la stabilitá della materia e lo spettro di emissione dell'atomo di idrogeno. La teoria di Bohr si base su 3 postulati

1. Un elettrone in un atomo, sotto l'effetto dell'attrazione coulombiana, si muove in una orbita circolare intorno al nucleo, obbedendo alle leggi della fisica classica, ma, invece dell'infinitá di orbite permesse dalle leggi della meccanica classica, per un elettrone sono possibili sono le orbite per le quali il momento angolare $L$ é un multiplo intero di $\hbar = h/2\pi$ (regola di quantizzazione di Bohr)
$$L = n\,\hbar \quad \Longrightarrow \quad m\,v\,r = n\,\hbar \quad \Longrightarrow \quad r = \frac{n\,\hbar}{m\,v} \qquad n \in \mathbf{Z}_{>} \tag{1}$$

2. L'elettrone in moto nelle orbite circolari che soddisfano l'eq.(1), nonostante sia sottoposto ad una accelerazione costante, non emette radiazione elettromagnetica, quindi la sua energia rimane costante ed il sistema é stabile.

3. La radiazione elettromagnetica é emessa se un elettrone, inizialmente in una orbita, che soddisfa l'eq.(1), con energia $E_i$ varia in maniera discontinua il suo moto saltando su un'altra orbita, che soddisfa sempre l'eq.(1), con energia $E_f < E_i$. La frequenza $\nu$ della radiazione emessa soddisfa
$$h\nu = E_i \,-\, E_f \tag{2}$$

Ricaviamo, dai postulati di Bohr, lo spettro dell'atomo di idrogeno. Per il postulato n. 1 si ha, assumendo il nucleo posto all'origine e di massa infinita (si ricordi che la massa del nucleo dell'atomo di idrogeno, protone, é 1838 volte maggiore della massa dell'elettrone)

$$\frac{e^2}{r^2} = \frac{m\,v^2}{r} \tag{3}$$

Inserendo l'eq.(1) nell'eq.(3) si trova

$$e^2 = \frac{m\,r^2\,v^2}{r} = \frac{n^2\,\hbar^2}{mr} \quad \Longrightarrow \quad r = \frac{n^2\,\hbar^2}{m\,e^2} \qquad\qquad v = \frac{e^2}{n\,\hbar} \tag{4}$$

L'energia $E$ di un elettrone che ruota intorno intorno al protone é la somma dell'energia cinetica $K$ e dell'energia potenziale coulombiana $E_c$

$$E = K \,+\, E_c = 1/2\,mv^2 \,-\, e^2/r = e^2/2r \,-\, e^2/r = -e^2/2r \tag{5}$$

Inserendo l'eq.(4) si trova che, in corrispondenza delle orbite permesse eq.(1), l'elettrone ha energia

$$E_n = -\frac{me^4}{2\,n^2\,\hbar^2} \tag{6}$$

Lo stato fondamentale, corrispondente al valore minimo dell'energia, corrisponde all'orbita con $n = 1$

$$E_1 \equiv E_0 = -\frac{me^4}{2\,\hbar^2} \approx -13.6\,eV \qquad\qquad r(n=1) \equiv r_0 = \frac{\hbar^2}{m\,e^2} \approx 0,53 \cdot \mathring{A} \tag{7}$$

$r_0$ é chiamato **raggio di Bohr**. La separazione in energia tra due livelli consecutivi non é costante e diventa sempre piú piccola al crescere di $n$

$$\Delta E_n = E_{n+1} - E_n = \frac{me^4}{2\,n^2\,\hbar^2} - \frac{me^4}{2\,(n+1)^2\,\hbar^2} \approx_{n>>1} \frac{me^4}{n^3\,\hbar^2} + O(1/n^4) \tag{8}$$

Per il postulato n. 3, l'elettrone saltando da un'orbita $n_i$ ad un'orbita $n_f < n_i$ emette un fotone di frequenza

$$\nu = \frac{E_i\,-\,E_f}{h} = \frac{me^4}{4\,\pi\,\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \tag{9}$$

Introducendo il numero d'onda $k = 1/\lambda$ si trova ($\nu\lambda = c$)

$$k = \frac{me^4}{4\,\pi\,c\,\hbar^3}\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) = R\left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2}\right) \tag{10}$$

dove $R$ é la costante di Rydberg che viene adesso calcolata teoricamente

$$R = \frac{me^4}{4\,\pi\,c\,\hbar^3} \tag{11}$$

L'eq.(10) riproduce le formule empiriche di Balmer ($n_f = 2$) e Paschen ($n_f = 3$), ma prevede altre serie di righe spettrali ($n_f = 1, 4, \ldots$), la cui successiva scoperta fornisce un ulteriore supporto alla validitá dell'ipotesi di Bohr ($n_f = 1$, serie di Lyman, nell'ultravioletto; $n_f = 4$, serie di Brackett, nell'infrarosso; $n_f = 5$, serie di Pfund, nell'infrarosso). Dall'eq.(10), per $n_f \to \infty$, si ottiene l'energia di ionizzazione, cioé l'energia che occorre fornire all'elettrone per portarlo a distanza infinita dal nucleo, cioé per ionizzare l'atomo. Tale energia vale $-E_{n=1} = 13.6\,eV$. L'eq.(6) e l'eq.(10) sono i punti essenziali della teoria di Bohr, che possiamo cosí sintetizzare:

- Lo stato normale dell'atomo che corrisponde allo stato di piú bassa energia (stato fondamentale) é lo stato con $n = 1$,

- Se l'atomo riceve energia dall'esterno, per esempio per urto o per assorbimento di radiazione elettromagnetica, puó saltare in uno stato eccitato con $n > 1$, cioé con energia maggiore dello stato fondamentale. La transizione ad uno stato eccitato avviene se l'energia assorbita $\Delta E$ é uguale alla differenza di energia tra lo stato eccitato e lo stato fondamentale, $\Delta E = E_n - E_1$.

- Obbedendo alla tendenza generale di ogni sistema fisico di ritornare allo stato fondamentale, l'atomo emette l'eccesso di energia $\Delta E$ attraverso una serie di transizioni dallo stato $n > 1$ allo stato fondamentale $n = 1$, in ognuna di questa transizioni un fotone di energia uguale alla differenza tra lo stato iniziale e lo stato raggiunto é emesso. Per esempio, in un caso tipico in cui l'atomo é stato eccitato nello stato con $n = 7$, si osservano le linee spettrali corrispondenti alle seguenti transizioni

$$n = 7 \quad\longrightarrow\quad n = 4 \quad\longrightarrow\quad n = 3 \quad\longrightarrow\quad n = 1 \tag{12}$$

  Si noti che la teoria di Bohr non spiega né perché avviene il processo di diseccitazione né quali transizioni avvengono con maggiore frequenza.

Il modello di Bohr funziona altrettanto bene per atomi con nucleo di carica $Ze$, ad esempio l'atomo di elio ionizzato, corrispondente a $Z = 2$, e puó prendere in conto l'effetto della massa finita del nucleo sostituendo nell'eq.(1) la massa dell'elettrone $m$ con la massa ridotta $\mu = mM(/m + M)$ dove $M$ é la massa del nucleo. Tuttavia la regola di quantizzazione eq.(1) era enunciata solo per un moto circolare. Una formulazione piú generale, che includeva la regola di Bohr confermata con successo dagli esperimenti, venne fatta da Wilson e Sommerfeld nel 1918 che enunciarono il seguente postulato di quantizzazione.

**Postulato - Per ogni sistema fisico, in cui le coordinate $q_i$ sono funzioni periodiche del tempo, esiste una condizione di quantizzazione per ogni coordinata che si scrive**

$$\oint p_{q_i}\, dq_i = n_{q_i}\, h \qquad n_{q_i} \in \mathbf{Z}_{>} \tag{13}$$

**dove $p_{q_i}$ é il momento coniugato alla variabile $q_i$ e l'integrale circolare significa integrazione su un periodo della coordinata $q_i$.**

Per esempio l'eq.(13) per un moto circolare diventa

$$\oint p_\theta\, d\theta = \oint L\, d\theta = L \int_0^{2\pi} d\theta = 2\pi L = n\, h \tag{14}$$

che é la condizione di Bohr, eq.(1). Un'applicazione importante dell''eq.(13) fu nell'atomo di idrogeno, in cui essendo adesso possibili anche le orbite ellittiche, si introducono due numeri quantici $n_{q_i}$, $(q_i = r, \theta)$ permettendo un fit piú accurato delle linee spettrali, di cui misure piú precise mostravano una ulteriore separazione (detta separazione fine) delle linee dello spettro rispetto all'eq.(10).