Fisica I, *a.a.* 2014–2015 – Primo Appello

4 Giugno 2015, Ore 8:30 Aula PN1 Polo Porta Nuova

Anna M. Nobili

1 Moto degli atomi in una molecola biatomica

[1]Esistono molecole formate da due atomi (molecole biatomiche) che emettono e assorbono radiazione ad una data frequenza. Questo vuol dire che i due atomi "vibrano" a quella frequenza, e quindi sono accoppiati da una costante elastica. Consideriamo atomi con la stessa massa m (stesso isotopo) e assumiamo, per semplicità, che il loro moto avvenga lungo una retta, indicando con la variabile x la distanza relativa tra i due atomi.

1. L'esistenza e la stabilità della molecola biatomica indicano che essa ha una posizione di equilibrio, con gli atomi a distanza x_{eq} tra loro, che deve corrispondere al minimo dell'energia potenziale $V(x)$. In questa posizione di riposo la molecola ha la minima energia possibile, gli atomi sono fermi alla distanza x_{eq} e se si fornisce alla molecola una energia pari a questa energia di riposo (detta energia di legame) è possibile staccare gli atomi e portarli a grande distanza tra loro (e fermi) con energia potenziale e cinetica entrambe nulle. Infine, sappiamo che a piccolissima distanza entrano in gioco forze repulsive tra i nuclei, e quindi l'energia potenziale deve crescere al diminuire della distanza. Si conclude che l'energia potenziale della molecola biatomica ha una forma del tipo:
$$V(x) = \frac{\alpha_1}{2x^2} - \frac{\alpha_2}{x} \quad \text{con} \quad \alpha_1, \alpha_2 > 0 \tag{1}$$
Fate un grafico di questa funzione (per $x > 0$, dato che x è la distanza relativa).

2. Scrivete le dimensioni fisiche di V(x), di α_1 e di α_2. Scrivete in termini delle costanti α_1, α_2: a) la distanza tra i due atomi $x_\circ$ per la quale $V(x_\circ) = 0$; b) la distanza tra i due atomi all'equilibrio x_{eq}; c) l'energia potenziale $V(x_{eq})$.

3. Per studiare il moto dei due atomi vicino alla posizione di equilibrio x_{eq} sviluppate l'energia potenziale $V(x)$ per valori di x vicini al valore x_{eq}, cioè per piccoli valori della variabile $(x - x_{eq})$, cioè per piccole oscillazioni, fino al secondo ordine in questa variabile. Troverete che nelle vicinanze di x_{eq} il moto è quello di un oscillatore armonico isocrono, cioè con una sola frequenza indipendente dall'ampiezza, come per le piccole oscillazioni del pendolo.

4. Considerate il caso in cui la molecola vibra attorno alla posizione di equilibrio x_{eq} alla frequenza $\nu \simeq 7 \cdot 10^{13}$ Hz e gli atomi hanno ciascuno massa $m \simeq 2 \cdot 10^{-26}$ kg. Scrivete la costante elastica k di accoppiamento tra i due atomi e l'energia potenziale elastica quando l'ampiezza di (piccola) oscillazione è $x - x_{eq}$. Calcolate il valore numerico di k.

5. Calcolate i valori di α_1 ed α_2 sapendo: a) che la distanza tra i due atomi all'equilibrio è $x_{eq} \simeq 10^{-10}$ m; b) che la costante elastica k scritta al punto 4 compare anche nello sviluppo in serie fatto al punto 3. Infine, calcolate il valore dell'energia di legame (definita al punto 1).

[1]**Le risposte ai quesiti devono essere numerate come i quesiti stessi. Le grandezze cui il testo ha assegnato uno specifico simbolo devono conservare nelle risposte lo stesso simbolo. Ogni simbolo deve essere definito.**

2 Soluzione

1. Vedi Fig. 1

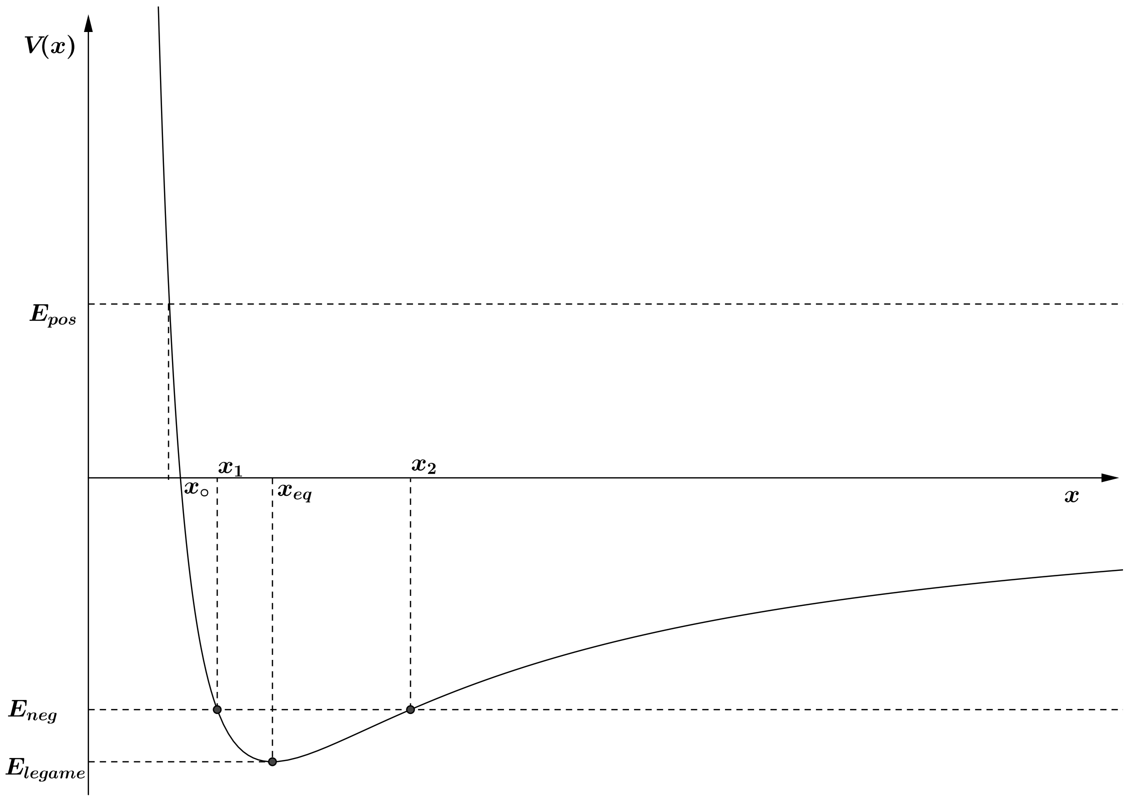

Figure 1: Grafico della funzione energia potenziale della molecola biatomica $V(x) = \frac{\alpha_1}{2x^2} - \frac{\alpha_2}{x}$. Il grafico è stato fatto con il software Geogebra (accessibile pubblicamente in rete e di cui si raccomanda l'uso agli studenti) con i valori numerici $\alpha_1 = 1$, $\alpha_2 = 1.4$ (questi valori sono usati solo a titolo di esmpio e non hanno alcuna relazione con i valori effettivi per la molecola biatomica considerata che verranno calcolati al punto 5).

2. Le dimensioni fisiche delle grandezze richieste sono:
   $[V(x)] = [\mathrm{J}] = [\mathrm{kg}][\mathrm{m}]^2[\mathrm{s}]^{-2}$ (energia)
   $[\alpha_1] = [\mathrm{J}][\mathrm{m}]^2 = [\mathrm{kg}][\mathrm{m}]^4[\mathrm{s}]^{-2}$
   $[\alpha_2] = [\mathrm{J}][\mathrm{m}] = [\mathrm{kg}][\mathrm{m}]^3\mathrm{s}^{-2}$.
   L'energia potenziale si annulla quando la distanza relativa tra gli atomi è $x_\circ$:
   $$V(x_\circ) = \frac{\alpha_1}{2x_\circ^2} - \frac{\alpha_2}{x_\circ} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_\circ = \frac{\alpha_1}{2\alpha_2} \tag{2}$$
   L'energia potenziale ha un minimo quando la distanza relativa è $x = x_{eq}$:
   $$\left.\frac{dV}{dx}\right|_{x=x_{eq}} = -\frac{\alpha_1}{x_{eq}^3} + \frac{\alpha_2}{x_{eq}^2} = 0 \quad \Rightarrow \quad x_{eq} = \frac{\alpha_1}{\alpha_2} = 2x_\circ \tag{3}$$
   dove l'energia potenziale vale:
   $$V(x_{eq}) = \frac{\alpha_1\alpha_2^2}{2\alpha_1^2} - \frac{\alpha_2^2}{\alpha_1} = -\frac{\alpha_2^2}{2\alpha_1} \tag{4}$$

Se l'energia totale ha questo valore minimo gli atomi sono alla distanza x_{eq} e fermi, perché l'energia cinetica deve essere nulla. Questo valore dell'energia è l'energia di legame $E_{legame} = V(x_{eq}) = -\frac{\alpha_2^2}{2\alpha_1} < 0$ come definita al punto 1: se agli atomi si fornisce esattamente questa quantità di energia (positiva), essi avranno energia totale nulla e quindi saranno a distanza teoricamente infinita l'uno dall'altro senza più alcuna interazione. Questa è l'energia di dissociazione della molecola: $E_{dissociazione} = -E_{legame} = \frac{\alpha_2^2}{2\alpha_1} > 0$.

Se l'energia totale è negativa ma maggiore di $V(x_{eq})$, cioè $0 > E_{neg} > V(x_{eq})$ gli atomi sono confinati a muoversi con distanze relative tra x_1 ed x_2 (vedi Fig. 1.

Se l'energia totale è nulla la distanza relativa tra gli atomi va tra il valore minimo $x_\circ$ all'infinito con energia cinetica nulla (molecola dissociata).

Se l'energia totale è positiva $E_{pos} > 0$ gli atomi vanno da una distanza relativa $x_\circ > x_{min} > 0$ fino all'infinito dove l'energia cinetica vale E_{pos} (dato che l'energia potenziale all'infinito è nulla).

3. Lo sviluppo in serie di Taylor dell'energia potenziale molto vicino alla posizione di equilibrio (cioè per valori molto piccoli della variabile $x - x_{eq}$) è dato dalla formula:

$$\begin{aligned} V(x - x_{eq}) \simeq V(x_{eq}) + \frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_{eq}}(x - x_{eq}) + \frac{1}{2}\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=x_{eq}}(x - x_{eq})^2 \simeq \\ \simeq V(x) + \frac{1}{2}\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=x_{eq}}(x - x_{eq})^2 \end{aligned} \tag{5}$$

essendo $\frac{dV}{dx}\Big|_{x=x_{eq}} = 0$ dato che la posizione di equilibrio è un punto di minimo dell'energia potenziale. La derivata seconda nel punto di equilibrio è:

$$\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=x_{eq}} = 3\frac{\alpha_1}{x_{eq}^4} - 2\frac{\alpha_2}{x_{eq}^3} \tag{6}$$

e usando la (3) per $x_{eq} = \alpha_1/\alpha_2$ e la (4) per l'energia potenziale minima :

$$\frac{d^2V}{dx^2}\Big|_{x=x_{eq}} = 3\frac{\alpha_2^4}{\alpha_1^3} - 2\frac{\alpha_2^4}{\alpha_1^3} = \frac{\alpha_2^4}{\alpha_1^3} \tag{7}$$

quindi l'energia potenziale nelle vicinanze del punto di equilibrio é:

$$V(x - x_{eq}) \simeq -\frac{\alpha_2^2}{2\alpha_1} + \frac{\alpha_2^4}{2\alpha_1^3}(x - x_{eq})^2 \tag{8}$$

dove il termine costante è esattamente $V(x_{eq}) = -\alpha_2^2/2\alpha_1$ l'energia potenziale nel punto di equilibrio che possiamo assumere come energia potenziale di riferimento e porre uguale a zero. Quindi l'energia potenziale degli atomi nelle vicinanze del punto di equilibrio è:

$$V(x - x_{eq}) \simeq \frac{1}{2}\frac{\alpha_2^4}{\alpha_1^3}(x - x_{eq})^2 \tag{9}$$

che ha l'andamento di una parabola, come nel caso dell'energia potenziale elastica di un oscillatore armonico con costante elastica k con:

$$k = \frac{\alpha_2^4}{\alpha_1^3} \tag{10}$$

4. Sappiamo dalle lezioni che un oscillatore armonico fatto di due masse puntiformi m_1, m_2 accoppiate da una molla di costante elastica k ha una frequenza angolare ω ($\omega = 2\pi\nu$):

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \tag{11}$$

dove $\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1+m_2}$ è la massa ridotta. Poiché i due atomi hanno la stessa massa m, $\mu = \frac{m}{2}$ e con i dati del testo risulta:

$$k = \frac{m(2\pi\nu)^2}{2} \simeq \frac{2 \cdot 10^{-26}(6.28 \, \cdot 7 \cdot 10^{13})^2}{2}\,\mathrm{N/m} \simeq 1.9 \cdot 10^3\,\mathrm{N/m} \tag{12}$$

5. Abbiamo 2 equazioni nelle 2 incognite α_1, α_2:

$$\frac{\alpha_1}{\alpha_2} \simeq x_{eq} \simeq 10^{-10}\,\mathrm{m} \tag{13}$$

$$\frac{\alpha_2^4}{\alpha_1^3} \simeq k \simeq 1.9 \cdot 10^3\,\mathrm{N/m} \tag{14}$$

da cui otteniamo:

$$\alpha_1 \simeq x_{eq}\alpha_2 \simeq 1.9 \cdot 10^{-37}\,\mathrm{Jm}^2 \tag{15}$$

$$\alpha_2 \simeq k\frac{\alpha_1^3}{\alpha_2^3} \simeq 1.9 \cdot 10^{-27}\,\mathrm{Jm} \tag{16}$$