

Einstein 1916, Emissione e assorbimento di radiazione secondo la teoria quantistica

ABSTRACT

Lo studio di Albert Einstein (1879-1955) *Emissione e assorbimento di radiazione secondo la teoria quantistica*, [Einstein, 1916], propose una originale interpretazione per le probabilità degli scambi tra livelli energetici atomici, prevedendo le *emissioni spontanee*, oltre agli *assorbimenti* e alle *emissioni stimulate* dalla radiazione stessa, da parte di *molecole* in equilibrio termodinamico. Questo studio ha reso famosi il coefficiente associato alle emissioni spontanee A_{ji} , il coefficiente di assorbimento B_{ij} e quello associato alle emissioni stimulate B_{ji} ; ha inoltre posto le basi teoriche per lo sviluppo dei laser.

Nell'approfondimento: una parafrasi delle congetture della pubblicazione originale di Einstein, un approfondimento sul parametro associato ai coefficienti detto *forza dell'oscillatore* (ricavato con procedimenti diversi sia per l'emissione spontanea sia per l'assorbimento di radiazione), alcuni esempi di utilizzo del *coefficiente di Einstein* A_{ji} nell'ambito della spettroscopia astronomica.

§ 1 Premessa sul contesto

§ 2.1 [Einstein, 1916] Osservazioni sugli oscillatori di Planck in un campo di radiazione

§ 2.2 [Einstein, 1916] Teoria quantistica e radiazione

§ 2.3 [Einstein, 1916] Osservazioni sulla legge fotochimica dell'equivalenza

§ 3.1 Sulle misurazioni delle transizioni tra livelli energetici

§ 3.2 Forza dell'oscillatore per l'emissione spontanea

§ 3.3 Sezione d'urto classica e forza dell'oscillatore per l'assorbimento

§ 4 Alcune applicazioni del coefficiente di Einstein A_{ji} in spettroscopia astronomica

§ 5 Unità di misura e costanti fisiche

§ 6 Letteratura e fonti

§ 1 Premessa sul contesto¹

La teoria sulla legge di distribuzione dell'energia presentata da Max Planck (1858-1947) in [Planck, 1900] era basata su oscillatori di radiazione con livelli di energia determinati, uniformemente spazati; l'idea originale di Planck prevedeva che la materia fosse quantizzata ma la luce no, gli oscillatori materiali non potevano prendere una quantità qualsiasi di energia ma solo a blocchi. Niels Bohr (1885-1962) in realtà aveva rilevato che qualsiasi sistema di atomi aveva livelli di energia ma non necessariamente spazati in modo uniforme come negli oscillatori di Planck. Prima che fosse sviluppata la meccanica quantistica intorno al 1927, Einstein propose un diverso punto di vista nell'idea che la luce fosse in realtà composta da *quanti di luce* (dal 1926 chiamati fotoni) e che questi potessero essere considerati come particelle di energia quantizzata, soddisfacendo la condizione di Bohr sulle

¹ Il paragrafo fa riferimento a Richard Feynman (1918-1988) in [Feynman, 1963] pag. 42.11-12

transizioni energetiche² $\epsilon_m - \epsilon_n = h \nu$.

In [Einstein, 1916] egli assunse che la formula finale di Planck (cfr [9]) fosse corretta ma individuò delle nuove relazioni sulle transizioni tra diversi livelli energetici, presupponendo che la probabilità delle transizioni tra questi livelli, oltre che dipendere dai livelli stessi, fosse *proporzionale all'intensità del campo di radiazione*.

Ipotizzò inoltre che ci fossero tre tipi di processi: un *assorbimento* proporzionale all'intensità della radiazione, un'emissione proporzionale all'intensità della radiazione chiamata *emissione indotta* (o *stimolata*) e una *emissione spontanea* indipendente dalla radiazione.

Nel terzo paragrafo dello studio Einstein suppose una possibile conseguenza dell'emissione indotta, in particolari condizioni dove fosse possibile gestire la popolazione dei livelli energetici nelle *molecole*, basandosi sulla *legge fotochimica dell'equivalenza*. In sostanza la base teorica sulla quale fu sviluppato il dispositivo noto come *laser* (acronimo della funzione in inglese: light amplification by stimulated emission of radiation).

Le considerazioni di Einstein si possono considerare euristiche, frutto di un suo tipico *gedankenexperiment* (esperimento mentale). Egli ne era molto soddisfatto, come scrisse all'amico Michele Besso (1873-1955) nella lettera dell'11 agosto 1916³:

A brilliant idea dawned on me about radiatio absorption and emission; it will interest you. An astonishingly simple derivation, I should say, *the* derivation of Planck's formula. A thoroughly quantized affair.

Il lavoro fu pubblicato prima in *Physikalische Gesellschaft* nel 1916 e poi in *Physikalische Zeitschrift* nel 1917.

§ 2.1 [Einstein, 1916] Osservazioni sugli oscillatori⁴ di Planck in un campo di radiazione

Einstein analizza il comportamento di un oscillatore monocromatico come aveva fatto inizialmente per i *moti browniani*⁵, considerando la variazione di energia dopo un tempo τ (molto maggiore del periodo dell'oscillatore), infinitamente piccola rispetto all'energia totale.

Si possono individuare due tipi di cambiamenti:

- uno effettuato dalle emissioni

$$\Delta_1 E = - A E \tau$$

² Secondo il modello di Bohr le orbite erano circolari attorno al nucleo, quantizzate secondo il modulo del momento angolare orbitale e gli assorbimenti o emissioni di energia avvenivano solo assorbendo o emettendo un *quanto* di energia $h \nu$, transazioni per le quali non valevano le leggi della meccanica classica

³ Citazione reperita in inglese in *The Collected Papers of Albert Einstein*, einsteinpapers.press.princeton.edu

⁴ Gli *oscillatori* (dipoli elettrici oscillanti) sono originariamente indicati come *risonatori*

⁵ Oggetto della pubblicazione del 1905 *Sulla teoria cinetico-molecolare del movimento dovuto al calore di particelle sospese in liquidi a riposo*; titolo originale *Über die von der molekularkinetischen Theorie der Wärme geforderte Bewegung von in ruhenden Flüssigkeiten suspendierten Teilchen*

- uno associato all'aumento della densità di radiazione ρ_ν , con valore e segno che dipendono dalla probabilità, definito da considerazioni elettromagnetiche statistiche che portano alla relazione del valore medio

$$\overline{\Delta_2 E} = B \rho_\nu \tau .$$

Le costanti A e B possono essere calcolate in modo noto. La differenza di energia $\Delta_1 E$ è dovuta all'emissione di radiazione, la differenza $\overline{\Delta_2 E}$ è dovuta all'assorbimento di radiazione⁶. Il valore medio di E si suppone indipendente dal tempo, quindi deve essere

$$\overline{E + \Delta_1 E + \Delta_2 E} = \overline{E} \quad \text{ovvero} \quad \overline{E} = \frac{B}{A} \rho_\nu .$$

Einstein osserva quindi che questo risultato è equivalente alla relazione individuata in [Planck, 1900] tra l'energia dell'oscillatore e la densità di radiazione⁷

$$\overline{E} = \frac{c^3}{8 \pi \nu^2} \rho ,$$

senza aver fatto specifiche supposizioni sulle interazioni tra la radiazione e quelle strutture che aveva definito *molecole*.

§ 2.2 [Einstein, 1916] Teoria quantistica e radiazione

Sulla base del *principio di Boltzmann*⁸ e da semplici considerazioni termodinamiche (il sistema si presuppone in equilibrio termodinamico), la probabilità w_n di uno stato z_n (o la densità numerica di *molecole* che sono nello stato z_n) è data da

$$W_n = p_n e^{-\frac{E_n}{k_B T}} \quad [1]$$

dove p_n peso statistico dello stato z_n , ad esempio una costante che dipende dallo stato quantico della molecola ma non dipende dalla temperatura del gas

E_n energia del livello n della molecola

k_B costante di Boltzmann

T temperatura del sistema in equilibrio termodinamico

Einstein ipotizza che la molecola possa passare dallo stato z_n allo stato z_m *assorbendo* una radiazione di frequenza $\nu = \nu_{nm}$ e analogamente dallo stato z_m allo stato z_n *emettendo* tale radiazione (quindi il livello m è superiore a n). L'energia coinvolta è $\epsilon_m - \epsilon_n$.

⁶ La radiazione assorbita è originariamente indicata come *radiazione incidente*

⁷ La relazione è espressa in [Planck, 1900] in forma differenziale come $u_\nu d\nu = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} U_\nu d\nu$, dove u_ν è la densità di energia e U_ν è l'energia dell'oscillatore o di un gruppo di oscillatori

⁸ Ludwig Boltzmann (1844-1906); il *fattore di Boltzmann* $\exp\left(-\frac{E_n}{k_B T}\right)$ determina la distribuzione di particelle per le possibili energie in tutti i sistemi che obbediscono alla statistica classica

In condizioni di equilibrio termodinamico deve esserci anche un equilibrio statistico, quindi ci si può limitare a un singolo processo elementare che corrisponda ai due indici m, n . Nel caso della teoria classica, per unità di tempo ci saranno tante *molecole* che vanno dallo stato Z_n allo stato Z_m *assorbendo* radiazione, quante dallo stato Z_m allo stato Z_n *emettendo* radiazione⁹.

Einstein considera due tipi di transizioni: *spontanee* indipendenti dalla radiazione presente e *indotte* dalla presenza di radiazione, proporzionalmente alla densità ρ_ν della stessa (alla frequenza ν *efficace*), cfr figura 1.

Emissione spontanea di radiazione

L'*emissione spontanea* è una transizione che avviene senza influenza esterna (similmente a un decadimento radioattivo), dallo stato Z_m allo stato Z_n , con differenza di energia pari a $\epsilon_m - \epsilon_n$.

Il numero di transizioni per unità di tempo e di volume (densità numerica) è

$$A_m^n N_m^n \quad \text{dove} \quad A_m^n \quad \text{coefficiente associato alle } \textit{emissioni spontanee} \text{ tra} \\ \text{gli stati } Z_m \text{ e } Z_n \\ N_m \quad \text{densità numerica di } \textit{molecole} \text{ nello stato } Z_m$$

Scambi indotti dalla presenza di radiazione

L'incidenza degli scambi energetici è determinata dalla radiazione nella quale è immersa la *molecola*: è proporzionale alla densità di radiazione ρ_ν (alla frequenza ν *efficace*), che può determinare sia una perdita sia un incremento di energia, in una transizione $Z_m \rightarrow Z_n$ come in una $Z_n \rightarrow Z_m$.

Il numero di transizioni per unità di tempo e di volume (densità numerica) è

$$B_m^n N_m \rho_\nu \quad \text{dove} \quad B_m^n \quad \text{coefficiente associato alle } \textit{emissioni indotte} \text{ tra} \\ \text{gli stati } Z_m \text{ e } Z_n \\ N_m \quad \text{densità numerica di } \textit{molecole} \text{ nello stato } Z_m \\ B_n^m N_n \rho_\nu \quad \text{dove} \quad B_n^m \quad \text{coefficiente associato agli } \textit{assorbimenti} \text{ tra gli stati} \\ Z_n \text{ e } Z_m \\ N_n \quad \text{densità numerica di } \textit{molecole} \text{ nello stato } Z_n$$

La condizione di equilibrio termodinamico implica anche l'equilibrio statistico tra le transizioni $Z_m \rightarrow Z_n$ e $Z_n \rightarrow Z_m$ (cfr figura 1), quindi si può considerare

$$A_m^n N_m^n + B_m^n N_m \rho_\nu = B_n^m N_n \rho_\nu \quad \text{ovvero}$$

⁹ Principio del *bilancio dettagliato*: all'equilibrio, la densità media di occupazione di ogni stato in un sistema di particelle è una costante, perché le transizioni dallo stato Z_m allo stato Z_n sono in numero uguale alle transizioni dallo stato Z_n allo stato Z_m .

$$A_m^n + B_m^n \rho_v = \frac{N_n}{N_m} B_n^m \rho_v . \quad [2]$$

Nelle quantità statistiche si può sostituire la probabilità w con il numero di *molecole* N (la loro densità numerica) e facendone il rapporto la relazione [1] si può scrivere

$$\frac{N_n}{N_m} = \left(\frac{p_n}{p_m} \right) \frac{e^{-\frac{\epsilon_n}{k_B T}}}{e^{-\frac{\epsilon_m}{k_B T}}} = \left(\frac{p_n}{p_m} \right) e^{\frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{k_B T}} , \quad [3]$$

quindi sostituendo la [3] nella [2] si ottiene

$$A_m^n = \left(\frac{p_n}{p_m} \right) \rho_v \left(e^{\frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{k_B T}} B_n^m - B_m^n \right) , \quad [4]$$

dove ρ_v è la densità di radiazione della frequenza che ha stimolato l'*emissione* nella transizione $z_m \rightarrow z_n$ e l'*assorbimento* nella transizione $z_n \rightarrow z_m$.

Immaginando che $\rho_v \rightarrow \infty$ all'aumentare della temperatura T , si dovrà avere¹⁰

$$B_n^m p_n = B_m^n p_m \quad \text{ovvero} \quad B_m^n = \left(\frac{p_n}{p_m} \right) B_n^m \quad [5]$$

e la [4] può essere riscritta come

$$A_m^n = \rho_v B_m^n \left(e^{\frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{k_B T}} - 1 \right) . \quad [6]$$

Introducendo il valore

$$\alpha_{mn} = \frac{A_m^n}{B_m^n} \quad [7]$$

la [6] diventa

$$\rho_v = \alpha_{mn} \frac{1}{e^{\frac{\epsilon_m - \epsilon_n}{k_B T}} - 1} , \quad [8]$$

relazione analoga alla seguente [9], ottenuta in [Planck, 1900], tra la densità di energia ρ_v e la temperatura T , dove le costanti sono lasciate indeterminate.

Einstein osserva che la densità di energia ρ_v è una funzione universale di T e ν quindi le quantità α_{mn} ed $\epsilon_m - \epsilon_n$ non possono dipendere dalle specifiche *molecole* ma solo dalla specifica frequenza ν della radiazione, confermando quindi la relazione di Bohr $\epsilon_m - \epsilon_n = h\nu$.

Ricordando la relazione finale in [Planck, 1900] per la densità di energia¹¹

$$u_\nu = \frac{8 \pi h}{c^3} \nu^3 \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1} , \quad [9]$$

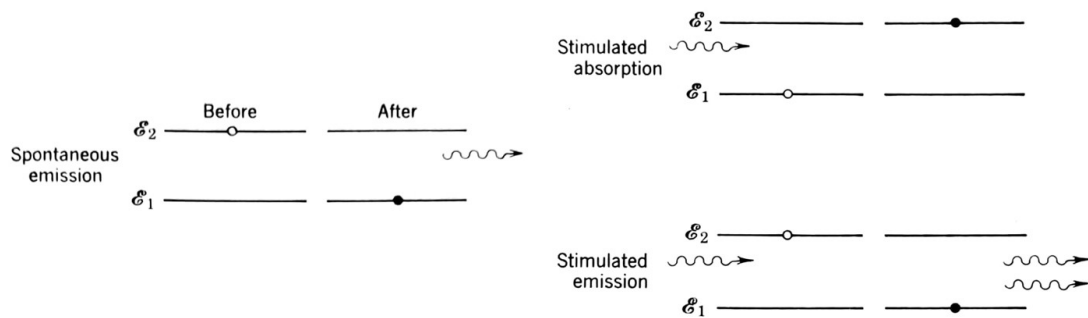
¹⁰ Il principio generabile applicabile è quello della *reversibilità microscopica*, che attribuisce gli stessi coefficienti cinetici per processi che sono uno l'inverso dell'altro, come in questo caso per l'assorbimento e l'emissione indotta

¹¹ La relazione originale in [Planck, 1900] corrisponde alla *radianza spettrale*, che è una *intensità specifica media di energia* (indicata anche J_ν): $B_\nu(\nu, T) = \frac{2h}{c^2} \nu^3 \frac{1}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$, posto $u_\nu = \frac{4\pi}{c} B_\nu$

sostituendo la [7] nella [8] e confrontandola con la [9] (sostituendo il termine densità di radiazione ρ_ν con densità di energia u_ν) si ottiene una relazione tra i coefficienti di *emissione spontanea* e di *assorbimento* di radiazione in funzione della frequenza ν

$$A_m^n = \frac{8 \pi h}{c^3} \nu^3 B_m^n . \quad [10]$$

Figura 1 Schema delle transizioni tra i due livelli energetici $\mathcal{E}_1$ ed $\mathcal{E}_2$ in condizioni di equilibrio termodinamico, in assenza (a sinistra) e in presenza (a destra) di campo di radiazione. [Eisberg e Resnick, 1974] pag. 427



Come osservazione a margine, a proposito della relazione [5] quindi del fatto per cui, se è valida la legge della radiazione di Planck, le probabilità di assorbimento e di emissione indotta sono uguali, Max Born (1882-1970), scrisse:

Questa osservazione indicò per la prima volta che l'interazione dei sistemi atomici coinvolge sempre due stati in modo simmetrico. Nella meccanica classica un agente esterno come la radiazione agisce su un solo stato ben definito, e l'effetto dell'azione può essere calcolato in base alle proprietà di questo stato e dell'agente esterno. Nella meccanica quantistica ogni processo è una transizione fra due stati che intervengono simmetricamente nelle leggi di interazione con un agente esterno. Questa proprietà simmetrica fu uno degli elementi decisivi che condussero alla formulazione della meccanica delle matrici, la prima forma della meccanica quantistica moderna.¹²

§ 2.3 [Einstein, 1916] Osservazioni sulla legge fotochimica dell'equivalenza

Nell'osservazione finale Einstein esplora una possibile conseguenza dell'*emissione indotta*, in particolari condizioni dove sia possibile gestire la popolazione dei livelli energetici nelle *molecole*.

Con riferimento alla legge fotochimica dell'equivalenza¹³, egli considera un gas con tem-

¹² [Born, 1949] edizione italiana pag. 78; nonostante le divergenze sulle interpretazioni deterministiche della fisica, che Einstein avrebbe voluto ottenere, scettico sull'interpretazione probabilistica della meccanica quantistica, Born definì Einstein il suo «amato maestro» ([Born, 1949] edizione italiana pag. 83)

¹³ La legge fotochimica dell'equivalenza, detta anche di Stark-Einstein perché proposta indipendentemente dai due fisici intorno al 1910, prevede che per ogni quanto $h\nu$ di energia assorbita reagisca una molecola di

peratura bassa in modo tale che l'irraggiamento termico di frequenza ν , che porta dallo stato z_m allo stato z_n , non si verifichi. In accordo con la [1] e la [8], lo stato z_m sarà piuttosto raro rispetto allo stato z_n e si potrà assumere che quasi tutte le molecole del gas siano in uno stato z_n .

Oltre a questo processo $z_m \rightarrow z_n$, si suppone che la molecola nello stato z_m abbia anche la capacità di un altro processo chimico elementare, ad esempio la dissociazione monomolecolare e che la velocità di questa dissociazione sia grande rispetto alla frequenza della reazione $z_m \rightarrow z_n$.

Irraggiando quindi il gas con la frequenza efficace ν , con l'assorbimento dell'energia radiante $\epsilon_m - \epsilon_n = h\nu$ le molecole passeranno costantemente dallo stato z_n allo stato z_m e solo una piccola parte tornerà allo stato z_n per emissione o assorbimento. La maggior parte subirà una dissociazione chimica, corrispondente alla ipotizzata maggior velocità di reazione di questo processo. L'energia di radiazione $h\nu$ viene praticamente assorbita dalla molecola in dissociazione, come richiesto dalla legge fotochimica dell'equivalenza.

L'essenza di questa interpretazione è che l'assorbimento della luce non porta alla dissociazione della molecola direttamente ma attraverso lo stato quantico z_m , generando una specie di reazione a catena per la quale quando gli atomi cominciano a emettere anche altri atomi emettono e l'intero complesso scarica insieme l'energia: un fenomeno ingegnerizzato una cinquantina di anni dopo e chiamato *laser*, per emissioni nella banda ottica, o *maser* per emissioni nel lontano infrarosso.

§ 3.1 Sulle misurazioni delle transizioni tra livelli energetici

La relazione [10] si può generalizzare considerando che i pesi statistici p_n e p_m (modernamente indicati come g_1 e g_2) rappresentano i livelli energetici di degenerazione, dove il livello energetico E_m è degenerato p_m volte, il livello E_n è degenerato p_n volte¹⁴, quindi rappresentano quante molecole si trovano nello stesso livello energetico.

Considerata la [5], si può scrivere la [10] come $A_m^n = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 \left(\frac{p_n}{p_m} \right) B_n^m$, ovvero definiti il livello $2=m$ come superiore e $1=n$ come inferiore¹⁵ si ottiene per le espressioni

$$A_{21} = \frac{8\pi h}{c^3} \nu^3 \left(\frac{g_1}{g_2} \right) B_{12}, \text{ ovvero}$$

sostanza (quindi per ogni mole di sostanza reagita sia assorbito un numero di Avogadro di quanti di luce)

¹⁴ Si definisce *degenere* un livello di energia che corrisponde a stati diversi di un sistema quantistico, analogamente stati quantistici diversi sono detti degeneri se hanno lo stesso livello di energia; si definisce grado di degenerazione il numero di stati diversi che corrispondono al medesimo livello di energia

¹⁵ Nel seguito dell'elaborato sono mantenuti questi indici; modernamente il coefficiente per l'emissione stimolata è indicato anche B'

$$B_{12} = \left(\frac{g_2}{g_1} \right) \frac{c^3}{8 \pi h \nu^3} A_{21} \quad [11]$$

$$B_{21} = \left(\frac{g_1}{g_2} \right) B_{12}$$

$$B_{21} = \frac{c^3}{8 \pi h \nu^3} A_{21} ,$$

quindi entrambi i coefficienti dipendenti dal campo di radiazione possono essere espressi in funzione del coefficiente A_{21} per le emissioni spontanee.

*Nota sulle unità di misura*¹⁶

Numero di *emissioni spontanee* per unità di tempo e di volume

$$N_{es} = A_{21} n_2 \quad [s^{-1} m^{-3}]$$

dove A_{21} $[s^{-1}]$ coefficiente di Einstein per le *emissioni spontanee*
 n_2 $[m^{-3}]$ densità numerica di atomi del livello energetico 2 .

Numero delle eccitazioni (*assorbimenti*) in presenza di campo di radiazione, per unità di tempo e di volume

$$N_{ass} = B_{12} n_1 \rho(\nu_{eff}) \quad [s^{-1} m^{-3}] \quad [12]$$

dove B_{12} $[J^{-1} m^3 s^{-1}]$ coefficiente di Einstein per gli *assorbimenti*
 n_1 $[m^{-3}]$ densità numerica di atomi del livello energetico 1
 $\rho(\nu_{eff})$ $[J m^{-3}]$ densità di radiazione con frequenza efficace $\nu_{12} = \nu_{eff}$
 pari alla differenza energetica tra i livelli 1 e 2 .

Numero delle *emissioni stimulate* (diseccitazioni) in presenza di campo di radiazione, per unità di tempo e di volume

$$N_{disecc} = B_{21} n_2 \rho(\nu_{eff}) \quad [s^{-1} m^{-3}]$$

dove B_{21} $[J^{-1} m^3 s^{-1}]$ coefficiente di Einstein per le *emissioni stimulate*
 n_2 $[m^{-3}]$ densità numerica di atomi del livello energetico 2
 $\rho(\nu_{eff})$ $[J m^{-3}]$ densità di radiazione con frequenza efficace
 $\nu_{21} = \nu_{eff}$ pari alla differenza energetica tra i livelli
 1 e 2 .

Nota sulla frequenza delle transizioni

Dalle considerazioni dimensionali dei precedenti capoversi si possono stimare i tempi di vita di uno stato eccitato o diseccitato, indicati con τ :

¹⁶ Dove non indicato diversamente si adotta il sistema di unità di misura *SI*, per passare al sistema di unità di misura *cgs* si deve considerare $\epsilon_0 = 1/4 \pi$

$$\tau_{21} = \frac{1}{A_{21}} \quad [s] \quad \text{emissioni spontanee} \quad [13]$$

$$\tau_{\text{ecc}} = \frac{1}{B_{12} \rho(v_{\text{eff}})} \quad [s] \quad \text{eccitazioni (assorbimenti)}$$

$$\tau_{\text{disecc}} = \frac{1}{B_{21} \rho(v_{\text{eff}})} \quad [s] \quad \text{diseccitazioni (emissioni stimulate)}$$

Si osserva (come evidenziato nella figura 1) che l'emissione stimolata da parte dei fotoni di frequenza efficace $v_{21} = v_{\text{eff}}$ determina il raddoppio del numero di questi fotoni nel campo di radiazione.

In letteratura si trovano espressioni leggermente diverse tra loro per la relazione [10]¹⁷:

$$A_{21} = 8 \pi h c \bar{v}_{21}^3 B_{21} \quad \text{Herzberg}^{18} \quad \bar{v}_{21} = \frac{v_{21}}{c} \quad \text{numero d'onda transizione} \quad [14a]$$

$$A_{21} = \frac{8 \pi h}{c^3} v^3 B_{21} \quad \text{Yariv}^{19} \quad \text{come nel paper di Einstein, cfr [10]} \quad [14b]$$

$$A_{21} = \frac{2 h}{c^2} v^3 B_{21} \quad \text{Mihalas}^{20} \quad [14c]$$

Il fattore $4 \pi / c$ tra la [14a] e la [14c] dipende dal considerare in [14c] la radianza come intensità specifica (cfr nota 11); normalizzato questo, il fattore c tra la [14a] e la [14b] dipende dal considerare in [14a] la radianza come potenza per unità di area e unità di numero d'onda, in [14b] l'energia per unità di volume per intervallo unitario di frequenza.

La probabilità delle transizioni tra i livelli energetici atomici e molecolari può essere associata a un parametro f detto *forza dell'oscillatore* (*oscillator strenght*), derivato in modo classico (o semiclassico) considerando la *molecola* come dipolo oscillatore armonico e approfondito nei seguenti due paragrafi.

§ 3.2 Forza dell'oscillatore per l'emissione spontanea²¹

In una interpretazione classica e nell'approssimazione che la dimensione del dipolo sia piccola rispetto alla lunghezza d'onda della radiazione (*approssimazione di dipolo elettrico*, valida fino ai raggi X), un elettrone può essere considerato un dipolo oscillatore unidimensionale, per il quale si deve determinare il coefficiente di smorzamento, conseguente

¹⁷ [Hilborn, 2002] pag. 4

¹⁸ Gerhard Herzberg (1904-1999), *Molecular Spectroscopy and Molecular Structure, Vol. 1, Diatomic Molecules*, 2nd ed. (Van Nostrand, New York, 1950)

¹⁹ Amnon Yariv (1930-), *Quantum Electronics*, 2nd ed. (Wiley, New York, 1975)

²⁰ Dimitri Mihalas (1939-2013), *Stellar Atmospheres*, 2nd ed. (Freeman, San Francisco, 1978)

²¹ Nel paragrafo si fa riferimento a [Woodgate, 1980] pag. 43-45, [Landau e Lifšits, 1940] pag. 127-129 e [Hilborn, 2002] pag. 7

alla debole forza di reazione dovuta alla radiazione spontanea *emessa*, tra i livelli 2 (superiore) e 1 (inferiore).

L'equazione generale del moto per l'oscillatore è

$$\ddot{x} + \dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad [15]$$

dove ω_0 è la frequenza dell'oscillazione in assenza di smorzamento.

Per questo oscillatore la perdita di energia in termini di lavoro fatto si determina come

$$\frac{dW}{dt} = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{k\omega_0^3}{c} d_0^2 \cos^2(\omega_0 t - kr) \quad [16]$$

dove d_0 è il momento del dipolo, kr è un termine che può essere omissso scegliendo opportunamente l'origine per t .

La soluzione dell'equazione [15] è

$$x = x_0 \cos(\omega_0 t), \quad \dot{x} = -\omega_0 x_0 \sin(\omega_0 t) \quad [17]$$

e si può considerare $d_0 = e x_0$, dove e è la carica dell'elettrone.

La relazione tra la perdita di energia e la forza di reazione è

$$\int \frac{dW}{dt} = \int F_R dx = \int F_R \dot{x} dt$$

e applicando la [16] e le [17] si ottiene

$$F_R = - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{e^2}{c^2} k \omega_0 \dot{x}. \quad [18]$$

Considerando l'espressione generale per la forza di reazione come $F_R = -m_e \gamma_{cl} \dot{x}$, dove la massa dell'elettrone è m_e e il coefficiente di smorzamento dell'oscillazione è γ_{cl} , dal confronto con la [18] e considerato il numero d'onda $k = \omega_0/c$ per la propagazione nel vuoto, si ottiene

$$\gamma_{cl} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{2}{3} \frac{e^2 \omega_0^2}{m_e c^3}, \quad [19]$$

dove

$$\gamma_{cl} \ll \omega_0 \text{ come si può verificare da } \frac{\gamma_{cl}}{\omega_0} \sim \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e c^3} \omega_0^2 = \alpha \frac{\hbar \omega_0}{m_e c^2} \sim \alpha^3 \quad [20]$$

con α *costante di struttura fine* e considerando ω_0 nella banda ottica, quindi con energia stimabile $\hbar \omega_0 \sim e^2/4\pi\epsilon_0 a_0$, dove $a_0 = \hbar/m_e c \alpha$ è il *raggio di Bohr*.

In queste approssimazioni la [15] può essere riscritta come

$$\ddot{x} + \gamma_{cl} \dot{x} + \omega_0^2 x = 0 \quad [21]$$

e, con condizioni iniziali $x_0=1$, $dx/dt=0$ in $t=0$ e la [20], si ottiene la soluzione reale

$$x = e^{-\frac{\gamma_{cl} t}{2}} \cos(\omega_0 t). \quad [22]$$

Poiché l'ampiezza dell'oscillazione smorzata varia poco nel corso di un periodo $2\pi/\omega$, ha

senso considerare solo i valori medi dei quadrati della coordinata e della velocità, trascurando la variazione del fattore $e^{-\gamma_{cl} t / 2}$; questi quadrati sono proporzionali a $e^{-\gamma_{cl} t}$ quindi anche l'energia del sistema diminuisce in media secondo la legge

$$W(t) = W(0) e^{-\gamma_{cl} t} \quad \text{e si può esprimere come}$$

$$W(t) = \frac{1}{2} m_e \dot{x}_{\max}^2 \approx \frac{1}{2} m_e \omega_0^2 e^{-\gamma_{cl} t} = W(0) e^{-\gamma_{cl} t}$$

dove $w(0)$ è il valore iniziale dell'energia. Quindi la perdita di energia (potenza emessa), considerata la [19], si può esprimere come

$$-\frac{dW}{dt} = \gamma_{cl} W \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{3c^3} \omega_0^4. \quad [23]$$

In modo alternativo, si può moltiplicare per dx/dt la [21] considerata come

$$m_e \frac{d^2 x}{dt^2} + m_e \gamma_{cl} \frac{dx}{dt} + m_e \omega_0^2 x = 0, \text{ ottenendo}$$

$$\frac{d}{dt} \left[\frac{m_e}{2} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 + \frac{m_e}{2} \omega_0^2 x^2 \right] + m_e \gamma_{cl} \left(\frac{dx}{dt} \right)^2 = 0 \quad [24]$$

dove le quantità tra parentesi quadrate rappresentano le energie cinetica e potenziale dell'oscillatore, quindi la sua energia totale. Applicando la [22] alla [24] si ottiene

$$\frac{dW}{dt} = -m_e \gamma_{cl} \omega_0^2 e^{-\gamma_{cl} t} \sin^2(\omega_0 t)$$

e poiché la media temporale della funzione $\sin^2$ su un periodo di rotazione completo è $\frac{1}{2}$ si ottiene la potenza media dissipata

$$\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle = -\frac{1}{2} m_e \gamma_{cl} \omega_0^2 e^{-\gamma_{cl} t} \quad [25]$$

che conferma la [23], se si approssima la [25] e si tiene conto della [19]

$$-\left\langle \frac{dW}{dt} \right\rangle \approx \frac{1}{2} m_e \gamma_{cl} \omega_0^2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{3c^3} \omega_0^4.$$

In termini quantistici il tasso di perdita di energia *emessa* spontaneamente dal dipolo non polarizzato come radiazione di frequenza $\omega_{21} = 2\pi\nu_{21}$ può essere semplificato come²²

$$-\frac{dW}{dt} = A_{21}(\hbar\omega_{21}) \approx \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{4}{3} \frac{e^2}{c^3} \omega_{21}^4 x_{21}^2. \quad [26]$$

Nell'utilizzare il modello di oscillatore unidimensionale come tre oscillatori classici (uno per ogni direzione di polarizzazione) non si tiene conto del fatto che l'atomo può emettere più frequenze ω_{ji} (non solo una come l'oscillatore classico), è quindi necessario considerare un fattore correttivo adimensionale f detto *forza dell'oscillatore*²³, definito f_{ij} positi-

²² Questa relazione, qui espressa con coordinata unidimensionale, è derivata in [Woodgate, 1980] pag. 43-44

²³ I valori di f_{ij} e di f_{ji} sono di corrente utilizzo in ambito astronomico e per gran parte delle transizioni energetiche sono resi disponibili in database dedicati, ad esempio nelle librerie online di VizieR dell'Osser-

vo per gli assorbimenti e f_{ji} negativo per le emissioni, con $0 < |f| < 1$, per indicare la frazione di energia coinvolta per ogni transizione.

Nella soluzione [22] non si è considerato $x \propto (e^{i\omega_0 t} + e^{-i\omega_0 t}) = 2 \cos(\omega_0 t)$, manca quindi un fattore 2, poi ω^2 , alla [23] che nel confronto con la [26] porta a

$$-\frac{dW}{dt} = A_{21}(\hbar \omega_{21}) = \gamma_{cl} W \quad \text{quindi a} \quad A_{21}(\hbar \omega_{21}) = -3 f_{21} \gamma_{cl} (\hbar \omega_{21})$$

e alla *forza dell'oscillatore* per l'emissione (dalla precedente $A_{21} = -3 f_{21} \gamma_{cl}$)

$$f_{21} = -\frac{\epsilon_0 m_e c^3}{2 \pi e^2} \frac{1}{\nu^2} A_{21}.$$

La *forza dell'oscillatore* per l'assorbimento, in base alla relazione $g_1 f_{12} = -g_2 f_{21}$ analoga alla [5], tenuto conto del segno del parametro f_{21} , è

$$f_{12} = \left(\frac{g_2}{g_1} \right) \frac{\epsilon_0 m_e c^3}{2 \pi e^2} \frac{1}{\nu^2} A_{21}. \quad [27]$$

§ 3.3 Sezione d'urto classica e forza dell'oscillatore per l'assorbimento²⁴

Supponendo il campo di radiazione isotropo, non polarizzato e considerando l'atomo come un dipolo oscillante, nell'ambito dell'elettrodinamica classica del modello di Lorentz si può stimare la sezione d'urto, che rappresenta la frazione di radiazione che può essere *assorbita*, proporzionale all'energia del dipolo perché questa determina la 'misura' degli orbitali quindi la sezione d'urto stessa.

Considerando il campo elettrico $E(t) = E_0 e^{i\omega t}$ si può riscrivere l'equazione del moto dell'oscillatore in termini di bilancio tra forze: la forza d'inerzia, di smorzamento e la forza elastica sono pari alla forza di eccitazione del campo elettrico

$$m_e \frac{d^2 x}{dt^2} + m_e \gamma_{cl} \frac{dx}{dt} + m_e \omega_0^2 x = e E_0 e^{i\omega t} \quad [28]$$

che ha soluzione generale del tipo $x(t) = x_0 e^{i\omega t}$ e la [28] può essere riscritta nella forma

$$(-\omega^2 + i \omega \gamma_{cl} + \omega_0^2) x(t) = \frac{e E_0}{m_e} e^{i\omega t} \quad \text{ovvero}$$

$$x(t) = \frac{e E_0}{m_e} e^{i\omega t} \frac{1}{(\omega_0^2 - \omega^2) + i \omega \gamma_{cl}} = \frac{e E_0}{m_e} e^{i\omega t} \frac{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 - i \omega \gamma_{cl}}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma_{cl}^2}$$

della quale si considera la parte reale

vatorio astronomico di Strasburgo: <https://vizier.cds.unistra.fr/index.gml>; cfr esempio in figura 2

²⁴ Nel paragrafo si fa riferimento a materiale didattico di Max-Planck-Gesellschaft (Munich) sulle *Stellar atmospheres*, a [Levi, 2016] cap. V e a [Bresolin, 2022] pag. 82-84; si utilizzano unità di misura *cgs*

$$\text{Re}(x(t)) = \frac{e E_0}{m_e} \left[\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma_{cl}^2} \cos(\omega t) + \frac{\omega \gamma_{cl}}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \omega^2 \gamma_{cl}^2} \sin(\omega t) \right]$$

e con le semplificazioni delle espressioni $\overline{\cos^2(\omega t)} = \overline{\sin^2(\omega t)} = 1/2$ e $\overline{\cos(\omega t) \sin(\omega t)} = 0$ per il valore medio del periodo, si ottiene

$$\overline{(\ddot{x})^2} = \frac{1}{2} \left(\frac{e E_0}{m_e} \right)^2 \left[\frac{\omega^4}{(\omega_0^2 - \omega^2)^2 + \gamma_{cl}^2 \omega^2} \right]. \quad [29]$$

Sostituendo $\omega = 2\pi\nu$ ed esprimendo la potenza media con $\bar{P} = \frac{2 e^2}{3 c^3} \overline{(\ddot{x})^2}$ (equazione di Larmor per una particella carica non relativistica), utilizzando la [29] e considerando la differenza $(\nu - \nu_0)$ in vece di $(\nu_0 - \nu)$, si ottiene

$$\bar{P} = \frac{e^4 E_0^2}{3 m_e^2 c^3} \phi^*(\nu) C_n^* \quad [30]$$

dove
$$\phi^*(\nu) = \frac{\nu^4}{(\nu^2 - \nu_0^2)^2 + (\gamma_{cl}/2\pi)^2 \nu^2} \quad [31a]$$

e C_n^* è una costante da determinarsi (come segue) per la normalizzazione di $\phi^*(\nu)$.

Poiché $\Delta\nu = (\nu - \nu_0) \ll \nu$, ν_0 si può considerare $\nu \approx \nu_0$ e nella [31a] la semplificazione

$$(\nu^2 - \nu_0^2)^2 = [(\nu + \nu_0)(\nu - \nu_0)]^2 = 4\nu_0^2(\nu - \nu_0)^2, \text{ da cui si ottiene}$$

$$\phi(\nu) = \frac{1}{4} \frac{\nu_0^2}{(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma_{cl}/4\pi)^2} \quad [31b]$$

ed effettuando nella [31b] la sostituzione $(\nu - \nu_0) = \gamma_{cl} z/4\pi$ con $d\nu = \gamma_{cl} dz/4\pi$, si ricava

$$\frac{1}{C_n} = \int_{\nu_0 - \infty}^{\nu_0 + \infty} \phi(\nu) d\nu = \frac{1}{4} \frac{4\pi}{\gamma_{cl}} \nu_0^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{1+z^2} = \frac{\pi^2 \nu_0^2}{\gamma_{cl}} \quad \text{da cui} \quad C_n = \frac{\gamma_{cl}}{\pi^2 \nu_0^2}. \quad [32]$$

Si osserva che il prodotto $C_n \phi(\nu)$ è l'equazione lorentziana [40].

Dalla [30], utilizzando la [31b] e il risultato della [32], sostituendo il coefficiente di smorzamento [19] $\gamma_{cl} = \frac{8\pi^2 e^2 \nu_0^2}{3 m_e c^3}$ riscritto in unità di misura *cgs* e in funzione della frequenza, si ottiene l'espressione per la potenza media assorbita

$$\bar{P} = \frac{e^2 E_0^2}{8 m_e} \phi(\nu). \quad [33]$$

La potenza media assorbita dal campo di radiazione si può anche esprimere come intensità specifica di radiazione per la sezione d'urto dell'oscillatore che la intercetta, ovvero in funzione del campo elettrico corrispondente per la sezione d'urto

$$\bar{P} = \sigma_\nu I_\nu = \sigma_\nu \frac{c}{8\pi} E_0^2. \quad [34]$$

Confrontando la [33] e la [34] si ottiene infine la relazione per la sezione d'urto classica, dove $\phi(\nu)$ rappresenta l'allargamento della riga (cfr § 4)

$$\sigma_v = \frac{\pi e^2}{m_e c} \varphi(v) = 0.0265 \text{ cm}^2 \text{ Hz}.$$

Considerando la sezione d'urto così individuata nelle componenti indipendenti dalla frequenza della specifica transizione (omettendo quindi $\varphi(v)$), è necessario aggiungere il fattore quantomeccanico f_{12} , detto *forza dell'oscillatore*, definito positivo per l'assorbimento e limitato al range $0 < f_{12} < 1$, per correggere la sovrastima

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{m_e c} f_{12}. \quad [35]$$

L'energia *assorbita* per angolo solido si può esprimere in funzione dell'intensità specifica media di energia, considerata la [12] e ricordandone la relazione $\rho(v_{12}) = \frac{4\pi}{c} J_v$ con la densità di energia, ottenendo

$$E_{\text{ass}} = \frac{N_{\text{ass}} h\nu_{12}}{4\pi} = \frac{n_1 B_{12} \rho(v_{12}) h\nu_{12}}{4\pi} = n_1 B_{12} \frac{J_v}{c} h\nu_{12}. \quad [36]$$

Poiché l'energia assorbita è anche proporzionale alla sezione d'urto, si può considerare la relazione $E_{\text{ass}} = n_1 \sigma J_v$ e dal confronto di questa con la [36] consegue

$$\sigma = B_{12} \frac{h\nu_{12}}{c}. \quad [37]$$

Confrontando la [35], la [37] e la [11] si ricava la relazione della *forza dell'oscillatore* per l'assorbimento

$$f_{12} = \frac{m_e}{\pi e^2} h\nu_{12} B_{12} = \left(\frac{g_2}{g_1} \right) \frac{m_e c^3}{8\pi^2 e^2} \frac{1}{\nu_{12}^2} A_{21}. \quad [38]$$

La [38] corrisponde alla [27] (tenuto conto della conversione delle unità di misura *cgs*), che è stata ottenuta con un diverso procedimento e considerando la radiazione spontanea emessa anziché quella assorbita.

Figura 2 Tabella con i valori delle righe della serie di Balmer per l'idrogeno: lunghezza d'onda della riga λ , probabilità di transizione A_{ij} e valore di f_{ij} per l'assorbimento. [Bresolin, 2022] pag. 84

Line	λ (Å)	A_{ij} (s^{-1})	f_{abs}
H α	6562.80	4.41×10^7	0.6407
H β	4861.32	8.42×10^6	0.1193
H γ	4340.46	2.53×10^6	4.467×10^{-2}
H δ	4101.73	9.73×10^5	2.209×10^{-2}
H ϵ	3970.07	4.39×10^5	1.270×10^{-2}
H8	3889.05	2.21×10^5	8.036×10^{-3}

§ 4 Alcune applicazioni del coefficiente di Einstein A_{ji} in spettroscopia astronomica

Allargamento naturale della riga

Nell'analisi del profilo delle righe spettrali, l'allargamento della riga ha due componenti principali (cfr figura 3): quella termica $\Delta\nu_D$ detta *allargamento Doppler*, conseguente al moto di agitazione termica degli oscillatori, descritta dalla funzione di tipo gaussiano

$$g(\nu) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta\nu_D} e^{-\frac{(\nu - \nu_0)^2}{\Delta\nu_D^2}}$$

e predominante al centro della riga intorno alla frequenza di risonanza²⁵ ν_0 , quella detta *allargamento naturale* $\Delta\nu_N$, conseguente al principio di indeterminazione di Heisenberg

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad \text{ovvero} \quad \Delta\nu \geq \frac{1}{2\pi \Delta t}, \quad [39]$$

descritta dalla funzione lorentziana normalizzata (cfr anche § 3.3)

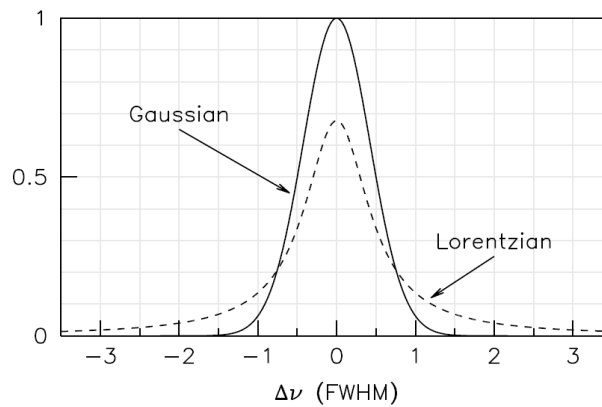
$$l(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{cl}/4\pi}{(\nu - \nu_0)^2 + (\gamma_{cl}/4\pi)^2}, \quad [40]$$

dove γ_{cl} è il coefficiente di smorzamento dell'oscillatore associato al modello definito nella [19], predominante alla base della riga spettrale, sulle *ali*.

Nella funzione [40] si determinano il valore massimo $l(\nu_0) = 4/\gamma_{cl}$ e il valore FWHM, che porta alla stima

$$(\nu_N - \nu_0) = \Delta\nu_N = \frac{\gamma_{cl}}{2\pi}. \quad [41]$$

Figura 3 Confronto schematico delle funzioni gaussiana e lorentziana per i profili delle righe spettrali, considerate con la stessa FWHM; la prima predomina al centro alla frequenza di risonanza, la seconda nelle ali della riga. [Bresolin, 2022] pag. 89



²⁵ La frequenza di risonanza corrisponde alla transizione tra il ground state e il primo livello eccitato permesso, ad esempio per l'idrogeno è la Lyman α alla lunghezza d'onda $\lambda_{Ly\alpha} = 1215.67 \text{ \AA}$

Confrontando la [39] con la [13], si può associare l'allargamento delle frequenze al coefficiente di Einstein A_{ji} , il cui inverso rappresenta una stima del tempo medio di transizione tra i livelli energetici

$$\Delta\nu_{ji} \geq \frac{1}{2\pi\Delta t} = \frac{A_{ji}}{2\pi}, \quad [42]$$

quindi dal confronto tra la [42] e la [41] si può concludere

$$\gamma_{cl} \approx A_{ji}. \quad [43]$$

La relazione [43] si può dedurre anche in modo classico, senza ricorrere al principio quantistico di Heisenberg, osservando che nella [25] la potenza dissipata si riduce di $1/e$ rispetto al valore iniziale dopo un tempo $\Delta t = 1/\gamma_{cl}$, che può essere considerato come tempo di vita media degli oscillatori. Quindi ricordando la [13] si ottiene la [43].

Queste relazioni consentirebbero di stimare il coefficiente di Einstein per le diverse transizioni associate alle righe in studio, quindi anche il numero di transizioni energetiche per unità di tempo, ma in genere l'effetto dell'allargamento naturale è coperto da altri effetti di allargamento della riga. Pertanto, in particolare nell'analisi delle atmosfere stellari, si utilizza un profilo convoluzione del profilo Lorentziano e Gaussiano, detto *profilo di Voigt*, che consente di separare il contributo dovuto all'allargamento Doppler da quello naturale con una accurata analisi delle ali della curva, soprattutto se satura, in quelle circostanze.

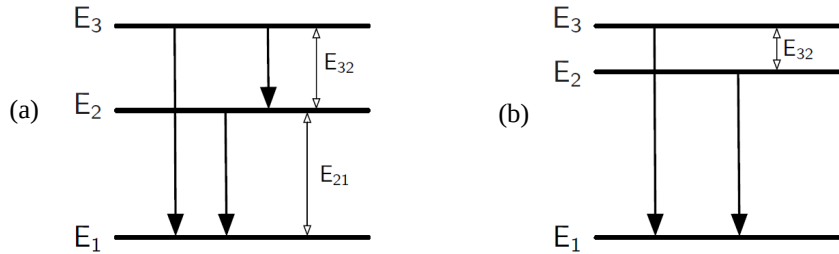
Ottenuto il coefficiente di smorzamento (ad esempio dalla [41]), si dispone grazie alla [43] anche del coefficiente di Einstein per le emissioni spontanee della transizione che ha generato la riga.

Emissioni in regioni a bassa densità elettronica

I coefficienti di Einstein per le emissioni spontanee sono particolarmente importanti nelle regioni nelle quali la densità elettronica è inferiore alla densità critica $n_e \ll n_{cr} = A_{21}/q_{21}$, ovvero dove le collisioni non sono predominanti, dove A_{21} è il coefficiente di Einstein per le emissioni spontanee e $q_{21} = \langle v \sigma_{21}(v) \rangle$, media delle velocità per le sezioni d'urto, è il coefficiente di diseccitazione collisionale, dimensionalmente $[m^3 s^{-1}]$. Si tratta ad esempio delle *regioni HII* (nebulose a emissioni associate a stelle giovani O, B), delle *nebulose planetarie* (involucri gassosi espulsi da stelle giganti nella fase finale della loro vita), delle *narrow lines regions* delle galassie con AGN (Active Galactic Nuclei).

In queste regioni gli spettrogrammi possono essere analizzati con degli algoritmi diagnostici, di seguito riportati, che consentono di stimare la temperatura e la densità elettronica.

Figura 4 Schema delle transizioni per atomi con differenze simili tra due successivi livelli energetici eccitati (a sinistra), e con differenze minime tra due livelli eccitati e il ground level (a destra). [Bresolin, 2022] pag. 103



La temperatura si può ricavare nel confronto dei flussi, misurati sullo spettrogramma, conseguenti alle transizioni con salti energetici simili (cfr figura 4a), dovuti a emissioni spontanee che generano righe sottili intense dovute a transizioni proibite²⁶ in particolare di [OIII], [NII], [SII].

Considerato il flusso di una transizione come numero di atomi per unità di volume per il coefficiente di Einstein per l'emissione spontanea per l'energia della transizione

$$F_{ji} = n_j A_{ji} E_{ji} , \quad [44]$$

si ricava il rapporto n_3/n_2 utilizzando i valori ottenuti applicando il principio del bilancio dettagliato alle transizioni dei livelli 3 e 2, ovvero rispettivamente

$$n_1 C_{13} = n_3 (A_{31} + A_{32}) \quad \text{e} \quad n_1 C_{12} + n_3 A_{32} = n_2 A_{21} ,$$

dove C_{ij} rappresentano le densità numeriche collisionali per unità di tempo e si sono trascurate le diseccitazioni collisionali (per la bassa probabilità collisionale conseguente alla bassa densità) e la componente C_{23} per la bassa probabilità (conseguente alla soglia di energia alta e alla bassa popolazione elettronica del livello 2).

Anche la transizione $n_3 A_{32}$ è trascurabile perché il livello 3 è poco popolato, e ricordando

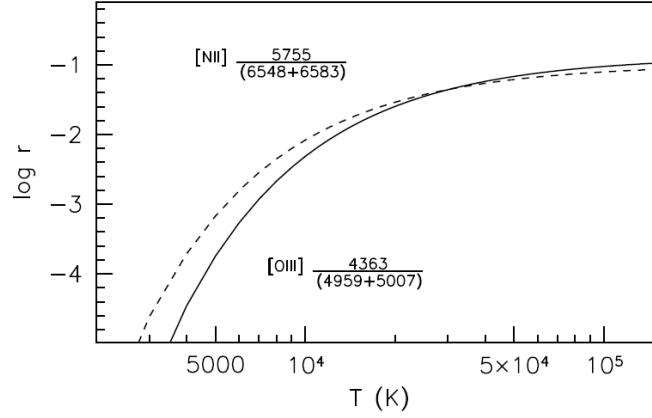
$$\frac{C_{13}}{C_{12}} = \frac{\Omega_{31}}{\Omega_{21}} e^{-\frac{E_{23}}{k_B T}} , \quad [45]$$

dove Ω_{ji} è la *forza collisionale* (definita in analogia alla *forza dell'oscillatore* come parametro adimensionale, con valori disponibili in database per i corrispondenti livelli, come per f_{ij}), k_B è la costante di Boltzmann, il rapporto tra i flussi di emissione [44] tra i livelli considerati 3→2 e 2→1 si può esprimere con la seguente relazione, dove tutti i valori sono noti o misurabili, consentendo di stimare T e ottenere un andamento come in figura 5

$$\frac{F_{32}}{F_{21}} = \frac{E_{32}}{E_{21}} \frac{A_{32}}{A_{31} + A_{32}} \frac{\Omega_{31}}{\Omega_{21}} e^{-\frac{E_{23}}{k_B T}} . \quad [46]$$

²⁶ Si definiscono *proibite* le transizioni che violano le regole di selezione della meccanica quantistica (che individuano le transizioni più probabili); gli stati coinvolti sono detti *metastabili* per le basse probabilità di verificarsi (e i relativamente lunghi tempi di decadimento)

Figura 5 Le curve rappresentano l'andamento del rapporto tra i flussi in funzione della temperatura per l'azoto [NII] e l'ossigeno [OIII]; sono evidenziate le lunghezze d'onda corrispondenti ai livelli energetici. [Bresolin, 2022] pag. 106



Nel caso di transizioni nelle quali i livelli eccitati hanno tra loro una minima differenza di energia rispetto al livello di partenza (cfr figura 4b), ad esempio per le transizioni proibite di [OII] e [SII], si può ottenere una stima per la densità elettronica n_e .

Sulla base del principio del bilancio dettagliato per i livelli si ottiene la relazione tra le densità numeriche dei livelli considerati $3 \rightarrow 1$ e $2 \rightarrow 1$ quindi il rapporto tra i flussi [44]

$$\frac{F_{31}}{F_{21}} = \frac{C_{13}}{C_{12}} \frac{1 + \frac{C_{21}}{A_{21}}}{1 + \frac{C_{31}}{A_{31}}}, \quad [47]$$

dove $C_{ji} = n_e q_{ji}$ e $C_{ij} = n_e q_{ij}$ rappresentano le densità numeriche collisionali per unità di tempo, q_{ji} , q_{ij} sono i coefficienti rispettivamente di diseccitazione e di eccitazione collisionale e si sono trascurate le transizioni tra i livelli 2 e 3.

Per i casi di bassa densità i rapporti C_{ji}/A_{ji} sono trascurabili per l'esiguo numero di collisioni, quindi la [47] si riduce a

$$\frac{F_{31}}{F_{21}} = \frac{C_{13}}{C_{12}} = \text{const}. \quad [48]$$

Per i casi di alta densità $C_{ji}/A_{ji} \gg 1$ e la [47] si può riscrivere

$$\frac{F_{31}}{F_{21}} = \frac{A_{31}}{A_{21}} \frac{C_{13}}{C_{12}} \frac{C_{21}}{C_{31}}$$

e ricordando $\frac{C_{13}}{C_{12}} = \frac{n_e q_{13}}{n_e q_{12}} = \frac{\frac{g_3}{g_1} q_{31} e^{-\frac{E_{13}}{k_B T}}}{\frac{g_2}{g_1} q_{21} e^{-\frac{E_{12}}{k_B T}}} = \frac{g_3}{g_2} \frac{q_{31}}{q_{21}} e^{-\frac{E_{23}}{k_B T}}$ e $C_{ji} = n_e q_{ji}$ si ottiene

$$\frac{F_{31}}{F_{21}} = \frac{A_{31}}{A_{21}} \frac{g_3}{g_2} = \text{const} \quad [49]$$

perché E_{23} è trascurabile.

Quindi i casi di alta e bassa densità non individuano una stima per n_e .

Per i casi con densità intermedie, ricordando la [45] e $C_{ji} = n_e q_{ji} = n_e \frac{8.6 \cdot 10^{-6}}{T^{1/2} g_j} \Omega_{ji}$,

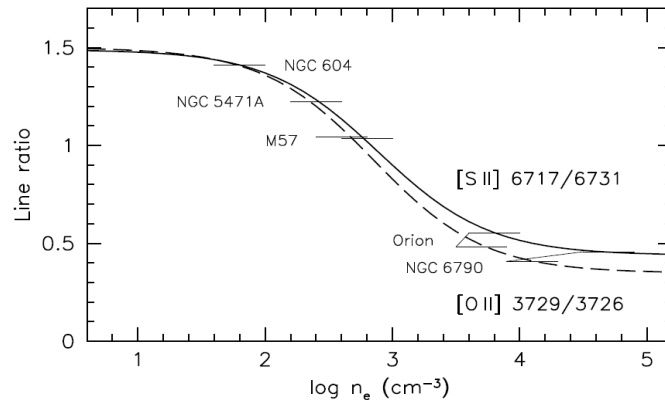
sempre con E_{23} trascurabile, dalla [47] si ottiene

$$\frac{F_{31}}{F_{21}} = \frac{\Omega_{31}}{\Omega_{21}} \frac{1 + \frac{8.6 \cdot 10^{-6}}{T^{1/2} g_2} \Omega_{21} \frac{n_e}{A_{21}}}{1 + \frac{8.6 \cdot 10^{-6}}{T^{1/2} g_3} \Omega_{31} \frac{n_e}{A_{31}}} = \frac{\Omega_{31}}{\Omega_{21}} \frac{1 + \text{const } x}{1 + \text{const}' x} \quad \text{con } x = 0,01 \frac{n_e}{T^{1/2}},$$

dalla quale, nota la temperatura (ottenuta ad esempio dall'analisi di un'altra riga per mezzo della [46]) si può stimare la densità elettronica n_e .

Un esempio di analisi dei flussi, nel caso dei livelli della figura 4b, è rappresentato nella figura 6, nella quale è evidenziato l'andamento del loro rapporto in funzione di n_e .

Figura 6 Le curve rappresentano l'andamento del rapporto tra i flussi in funzione della densità elettronica n_e per l'ossigeno [OII] e lo zolfo [SII], che presenta un andamento piatto (costante) per bassi e alti valori di n_e , come evidenziato dalle relazioni [48] e [49]. Sono indicati i valori del rapporto tra i flussi per alcuni oggetti astronomici, ad esempio una regione HII come Orione o una nebulosa planetaria come M57 e le lunghezze d'onda corrispondenti ai livelli energetici simili. [Bresolin, 2022] pag. 109



§ 5 Unità di misura e costanti fisiche [SI]

Carica dell'elettrone	e	$1.60 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
Costante di Boltzmann	k_B	$1.38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Costante di Planck	h	$6.63 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$

Costante di struttura fine	α	$\frac{1}{4 \pi \epsilon_0} \frac{e^2}{\hbar c}$	$7.297 \cdot 10^{-3} \sim 1/137$
Costante dielettrica del vuoto	ϵ_0	$8.85 \cdot 10^{-12} \text{ C}^2 \text{ N}^{-1} \text{ m}^{-2}$	
Massa dell'elettrone	m_e	$9.11 \cdot 10^{-31} \text{ Kg}$	
Numero di Avogadro	N_A	$6.022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$	
Raggio di Bohr	a_0	$\frac{4 \pi \epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} = \frac{\hbar}{m_e c \alpha}$	$0.529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$
Velocità della luce nel vuoto	c	$2.99792458 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$	

§ 6 Letteratura e fonti

Born, 1949 – Max Born, *Le teorie statistiche di Einstein*, in *Autobiografia scientifica* di Albert Einstein (Universale Scientifica Boringhieri, 1979); edizione inglese originale *Einstein: Philosopher Scientist* (The library of Living Philosopher, Evanston III, 1949)

Bresolin, 2022 – Fabio Bresolin, *Astronomical Spectroscopy* (University of Padova Lecture notes April 23, 2022)

Einstein, 1916 – Albert Einstein, *Emission and Absorption of Radiation in Quantum Theory*, traduzione in inglese dell'originale *Strahlungs Emission und Absorption nach der Quantentheorie* (prima pubblicazione in *Physikalische Gesellschaft Zürich, Mitteilungen* 18, 47-62, 1916)

Eisberg e Resnick, 1974 – Robert Eisberg e Robert Resnick, *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles* (John Wiley & Sons, 1974)

Feynman, 1963 – Richard Feynman, Robert Leighton, Matthew Sands, *The Feynman lectures on Physics Vol I Mainly Mechanics, Radiation, and Heat* (Addison Wesley Publishing Company Inc, 1963)

Hilborn, 2002 – Robert Hilborn, *Einstein coefficients, cross sections, f values, dipole moments, and all that* (prima pubblicazione in *The American Journal of Physics*, 50, 982–986, 1982, revisionato 2002)

Landau e Lifšits, 1940 – Lev Landau e Evgenij Lifšits, *Fisica Teorica, Meccanica* (Editori Riuniti, 1976); titolo originale *Теоретическая физика, Механика* (1940)

Levi, 2016 – Anthony Levi, *Essential Classical Mechanics for Device Physics* (Morgan and Claypool Publishers, 2016)

Planck, 1900 – Max Planck, *On the Theory of the Energy Distribution Law of the Normal Spectrum*; traduzione inglese dell'originale *Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung*, (*Deutsche Physikalische Gesellschaft, Verhandlungen* 2 pag. 237-245, 1900)

Woodgate, 1980 – George Kenneth Woodgate, *Elementary Atomic Structure* (Oxford University Press Inc, New York, 1980, II ed.)