

Meccanica ondulatoria

by **rob**

rob_jack@libero.it

Il contenuto di questo articolo è distribuito secondo la
Creative Commons License v. 2.5

December 12, 2007

1 Introduzione storica

Alla formulazione della Meccanica Quantistica si giunse attraverso due vie indipendenti. Nel 1924 De Broglie congetturò che alle particelle dovesse essere attribuita una doppia natura, corpuscolare ed ondulatoria. Nel 1926 Schrödinger formulò la *Meccanica Ondulatoria*, basata su un'equazione d'onda.

Nel 1925 Heisenberg, Born e Jordan formularono la Meccanica Matriciale servendosi del *principio di corrispondenza di Bohr*.

In seguito Schrödinger dimostrò l'equivalenza matematica delle suddette teorie, ed infine Born, Jordan e Dirac, pervennero ad una formulazione assiomatica.

2 Interpretazione ondulatoria della meccanica

Secondo la fisica classica sia le particelle che i campi obbediscono a leggi deterministiche del moto. Le equazioni differenziali che esprimono tali leggi, coinvolgono grandezze fisiche misurabili con un grado di precisione arbitrariamente grande.

La cornice concettuale della fisica classica è basata sulle equazioni di Hamilton per le particelle e sulle equazioni di Maxwell per il campo elettromagnetico.

Verso la fine del 1800 la fisica classica era in crisi. Una crisi che mise in evidenza la contraddizione dovuta alla separazione concettuale tra campi e particelle. Infatti, mentre un campo è un sistema fisico dotato di infiniti gradi di libertà, le particelle vengono descritte nel formalismo hamiltoniano come sistemi con un numero finito di gradi di libertà. Un tale approccio è incapace di spiegare la stabilità della materia nei confronti della radiazione. Più specificatamente, la materia esibisce proprietà ondulatorie, mentre la radiazione presenta una natura corpuscolare. Relativamente a questi aspetti contraddittori esiste una forte evidenza sperimentale.

Da un punto di vista storico i problemi che misero in luce i limiti della distinzione campo-particella furono: 1) lo spettro del corpo nero; 2) la struttura degli atomi.

Nel seguito accenneremo brevemente agli esperimenti (omettendo il corpo nero e l'effetto fotoelettrico), dando una maggiore enfasi all'apparato teorico.

2.1 Onde materiali. Ipotesi di De Broglie

Come detto in precedenza, la radiazione esibisce una doppia natura: corpuscolare ed ondulatoria. De Broglie partendo da tale constatazione ammise che anche alle particelle materiali doveva essere attribuita una tale doppia natura, in modo da poter spiegare l'esistenza dei livelli energetici dell'atomo.

Per quanto riguarda la radiazione, al quanto associato alla radiazione e.m. di frequenza ν e lunghezza d'onda $\lambda = c/\nu$, vanno attribuiti un'energia

$$E = h\nu \quad (1)$$

ed un impulso

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (2)$$

essendo $h = 6.625 \times 10^{-27}$ erg · s la costante di Planck.

Viceversa, ad una particella materiale è associata una **lunghezza d'onda di De Broglie**:

$$\lambda = \frac{h}{p}, \quad (3)$$

essendo p l'impulso della particella.

Ad esempio, nel caso di una particella di massa m che compie un moto non relativistico e sottoposta al potenziale $V(\mathbf{x})$, l'energia meccanica è:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{x}) \quad (4)$$

Eliminando p tra le (2)-(4), otteniamo la lunghezza d'onda di De Broglie associata alla particella:

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m|E - V(\mathbf{x})|}}$$

In generale, per una particella non relativistica sottoposta al potenziale $V(\mathbf{x})$:

Se in particolare ci riferiamo all'atomo di idrogeno, dal modello di Bohr sappiamo che:

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

essendo $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ la costante ridotta di Planck e m_e la massa dell'elettrone. Per $n = 1$:

$$\frac{\lambda}{2\pi} = \frac{\hbar}{\sqrt{2m_e |E_1|}} = \frac{\hbar^2}{m_e e^2} \cong 5.29 \times 10^{-9} \text{ cm},$$

cioè il *raggio di Bohr*. Quindi la lunghezza d'onda di De Broglie di un elettrone che ha l'energia di legame dell'atomo di idrogeno è dello stesso ordine di grandezza del raggio di Bohr.

Da un punto di vista sperimentale la natura ondulatoria degli elettroni è stata dimostrata a partire dal 1927 con l'esperienza di Davisson e Germer.

2.2 Equazione d'onda

Scriviamo l'equazione di d'Alambert:

$$\square \varphi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad (5)$$

essendo \square l'operatore delambertiano:

$$\square = \nabla^2 - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2},$$

donde:

$$\nabla^2 \varphi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0, \quad (6)$$

Siamo interessati alle soluzioni $\varphi(\mathbf{x}, t)$ della (6) del tipo **onda piana**.

Definizione 1 *Un'onda piana è descritta da una soluzione $\varphi(\mathbf{x}, t)$ della (6) in corrispondenza della quale esiste una direzione dello spazio fisico \mathbb{R}^3 individuata dal versore \mathbf{n} tale che:*

$$\forall P \in \alpha \perp \mathbf{n}, \varphi(P, t) \equiv \varphi(t)$$

*In altri termini, lungo ogni piano ortogonale a \mathbf{n} , la funzione d'onda dipende solo dal tempo t . Il versore \mathbf{n} individua la **direzione di propagazione** dell'onda.*

Orientando l'asse x nella direzione \mathbf{n} , la (6) diventa:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = 0 \quad (7)$$

Ricerchiamo soluzioni $\varphi \in C^2(\mathbb{R}^2)$ della (7).

Teorema 2

$$\left. \begin{array}{l} \varphi \in C^2(\mathbb{R}^2) \\ \text{è soluzione di (7)} \end{array} \right) \iff (\varphi(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt), \forall f, g \in C^2(\mathbb{R}))$$

Dimostrazione. Implicazione inversa

Si dimostra per derivazione diretta.

Implicazione diretta

Eseguendo il cambio di variabile:

$$(x, t) \rightarrow (\xi, \eta)$$

con

$$\begin{aligned} \xi &= x - vt \\ \eta &= x + vt \end{aligned}$$

Si ha:

$$\psi(\xi, \eta) = \varphi[x(\xi, \eta), t(\xi, \eta)], \quad \text{con } \varphi \in C^2(\mathbb{R}^2) \text{ soluzione di (7)}$$

Derivando:

$$\begin{aligned}\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi \partial \eta} = 0 &\implies \frac{\partial \psi}{\partial \eta} = f(\xi) \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta \partial \xi} = 0 &\implies \frac{\partial \psi}{\partial \xi} = g(\eta),\end{aligned}$$

cioè:

$$\psi(\xi, \eta) = f(\xi) + g(\eta)$$

Ripristinando le vecchie variabili:

$$\psi(x, t) = f(x - vt) + g(x + vt) \quad (8)$$

■

Consideriamo la soluzione $f(x - vt)$. Riferiamoci al grafico di f in funzione di x , assumendo t come parametro reale. Quindi:

$$\gamma_t)y = f(x - vt)$$

Al tempo $t + \Delta t$:

$$\gamma_{t+\Delta t})y = f[x - v(t + \Delta t)],$$

cioè $\gamma_{t+\Delta t}$ è traslato di $v\Delta t$ nella direzione dell'asse x positivo. La velocità di traslazione è pari a v . Quindi $f(x - vt)$ descrive la propagazione di un'onda piana nel verso delle x crescenti (**onda piana progressiva**). Viceversa, la soluzione $g(x + vt)$ descrive la propagazione di un'onda piana nel verso delle x decrescenti (**onda piana regressiva**).

Se la dipendenza da $x \pm vt$ è sinusoidale, la (8) descrive un'onda piana **monocromatica**:

$$\varphi(x, t) = \cos(x - v_f t) \quad (9)$$

Qui abbiamo ridefinito la velocità di propagazione in v_f

Moltiplichiamo l'argomento del coseno per una grandezza k avente le dimensioni dell'inverso di una lunghezza:

$$\varphi(x, t) = \cos(kx - \omega t), \quad (10)$$

essendo $\omega = kv_f$, da cui:

$$v_f = \frac{\omega}{k} \quad (11)$$

La funzione (10) rispetto alla variabile x (coordinata spaziale) è periodica di periodo $\tau = \frac{2\pi}{k}$, ma essendo x una coordinata spaziale, la grandezza τ si identifica con la lunghezza d'onda:

$$\lambda = \frac{2\pi}{k} \quad (12)$$

Chiamiamo k **numero d'onde di (10)**. La grandezza $\omega = kv_f$ è ovviamente la frequenza angolare.

È preferibile scrivere la (10) in forma complessa:

$$\varphi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)} \quad (13)$$

La (10) si generalizza al caso di un'onda piana monocromatica che si propaga in una direzione arbitraria dello spazio fisico:

$$\varphi(\mathbf{x}, t) = e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{x} - \omega t)} \quad (14)$$

Ora \mathbf{k} è il **vettore di propagazione dell'onda**, o **vettore d'onda**, e ovviamente è $|\mathbf{k}| = k$.

2.3 Pacchetto d'onde

Osserviamo che l'onda piana monocromatica (14) è una idealizzazione. Nella realtà si ha a che fare con un intervallo finito di frequenze o di lunghezze d'onda (si pensi ad un trasmettitore/ricevitore radio nel primo caso e ad una sorgente luminosa nel secondo). Siccome l'equazione di d'Alambert è lineare possiamo riferirci a soluzioni con frequenza diversa, per poi sovrapporle linearmente. Abbiamo cioè un **pacchetto d'onde**.

La situazione fisicamente interessante è la propagazione in un **mezzo dispersivo**. Come è noto, in tal caso è $n(\omega)$, essendo n l'indice di rifrazione del mezzo e ω la frequenza dell'onda componente il pacchetto. Dalla (11) vediamo che le singole componenti si propagano a velocità di fase diverse, giacché è $v_f(\omega)$. Da un punto di vista matematico è più conveniente assumere k come variabile indipendente, per cui sarà $\omega = \omega(k)$, e $v_f(k) = \frac{\omega(k)}{k}$.

Quindi assumiamo come soluzione dell'equazione d'onda di d'Alambert, la funzione:

$$\psi(x, t) = \int_{\sigma} a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (15)$$

L'integrale è esteso ad un intervallo significativo σ di numeri d'onda. Se poniamo $a(k) dk = dA$:

$$\psi(x, t) = \int_{\Sigma} e^{i(kx - \omega(k)t)} dA,$$

per cui $a(k) dk$ è l'ampiezza delle componenti monocromatiche di numero d'onda appartenenti all'intervallo infinitesimo $(k, k + dk)$.

Riscriviamo la (15) nel formalismo dell'Analisi di Fourier:

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{i(kx - \omega(k)t)} dk \quad (16)$$

L'integrazione estesa a valori negativi di k si giustifica osservando che stiamo considerando sia onde progressive che regressive. Inoltre ci aspettiamo che le proprietà dispersive siano indipendenti dalla verso di propagazione. Matematicamente ciò equivale a dire che $\omega(k)$ è funzione pari: $\omega(-k) \equiv \omega(k)$.

Consideriamo la (16) a $t = 0$

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ikx} dk \quad (17)$$

Dall'Analisi di Fourier:

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x, 0) e^{-ikx} dx \quad (18)$$

La (17) esprime $\psi(x, 0)$ come sovrapposizione lineare di infinite componenti monocromatiche di numero d'onda k tra $-\infty$ a $+\infty$.

Per quanto detto $a(k)$ è la **densità spettrale** o semplicemente lo **spettro di Fourier** di $\psi(x, 0)$. Tale funzione ci dà un'informazione sul contributo proveniente dai numeri d'onda che compongono l'onda iniziale $\psi(x, 0)$.

Supponiamo che $\psi(x, 0)$ sia un treno d'onde sinusoidale di numero d'onde k_0 esteso ad una regione (unidimensionale) di ampiezza Δ :

$$\begin{aligned}\psi(x, 0) &= e^{ik_0x}, \quad x \in \left[-\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}\right] \\ \psi(x, 0) &= 0, \quad x \notin \left[-\frac{\Delta}{2}, \frac{\Delta}{2}\right]\end{aligned}\tag{19}$$

osserviamo che Δ, k_0 devono essere tali che $\text{Re } \psi(x, 0)$ sia ovunque continua. Dobbiamo perciò ricordare $\text{Re } \psi(x, 0)$ in $\pm\Delta/2$:

$$\lim_{x \rightarrow -\frac{\Delta}{2}^+} \text{Re } \psi(x, 0) = \lim_{x \rightarrow -\frac{\Delta}{2}^-} \text{Re } \psi(x, 0) = 0$$

Risulta:

$$\cos\left(k_0 \frac{\Delta}{2}\right) = 0 \iff k_0 \Delta = n\pi, \quad \forall n \in \mathbb{N}$$

Se $k_0 \Delta \neq n\pi$, i punti $x_{\pm} = \pm\Delta/2$ sono di discontinuità finita per $\text{Re } \psi(x, 0)$. Perciò per garantire la continuità della funzione dobbiamo fissare imporre:

$$k_0 = n \frac{\pi}{\Delta}, \quad \text{con } n = 1, 2, 3, \dots$$

In figura (1) è riportato l'andamento di $\text{Re } \psi(x, 0)$.
Calcoliamo $a(k)$:

$$\begin{aligned}a(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{-i(k-k_0)x} dx \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{\sin\left[\frac{k-k_0}{2}\Delta\right]}{k-k_0}\end{aligned}\tag{20}$$

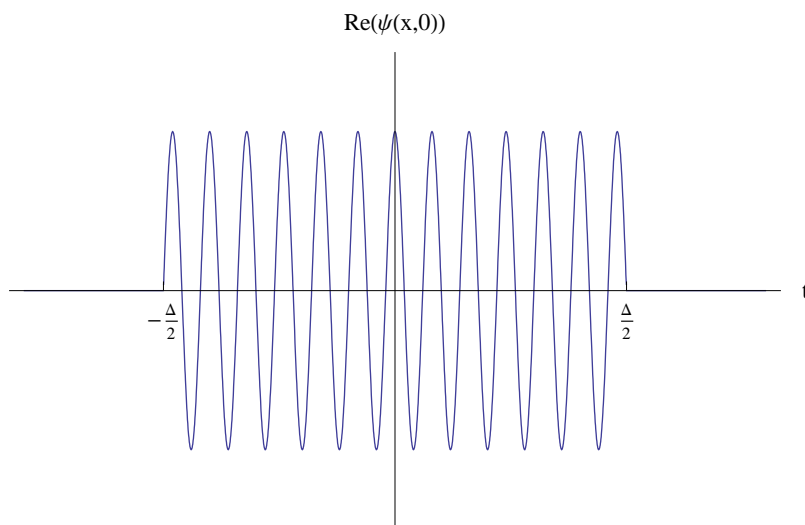


Figure 1: Treno d'onde sinusoidale esteso alla regione finita Δ .

La (20) è una oscillazione sinusoidale smorzata per $|k| \rightarrow +\infty$. Precisamente l'ampiezza va come $(k - k_0)^{-1}$. Inoltre la $a(k)$ è piccata intorno a k_0 :

$$\lim_{k \rightarrow k_0} a(k) = \frac{\Delta}{\sqrt{2\pi}}$$

Ad esempio, per $k_0 = \pi c^{-1}$, essendo c la velocità della luce nel vuoto, e $\Delta = 10$ cm, otteniamo l'andamento di fig (2)

L'andamento della densità spettrale dipende dalla estensione spaziale Δ della $\psi(x, 0)$. Per $\Delta \rightarrow +\infty$ l'onda ha una estensione infinita. Precisamente è una oscillazione sinusoidale per x che va da $-\infty$ a $+\infty$. Quindi:

$$a(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\Delta \rightarrow +\infty} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{-i(k-k_0)x} dx$$

Eseguiamo il cambio di variabile $\tilde{k} = k - k_0$:

$$a(\tilde{k}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \lim_{\Delta \rightarrow +\infty} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} e^{-i\tilde{k}x} dx$$

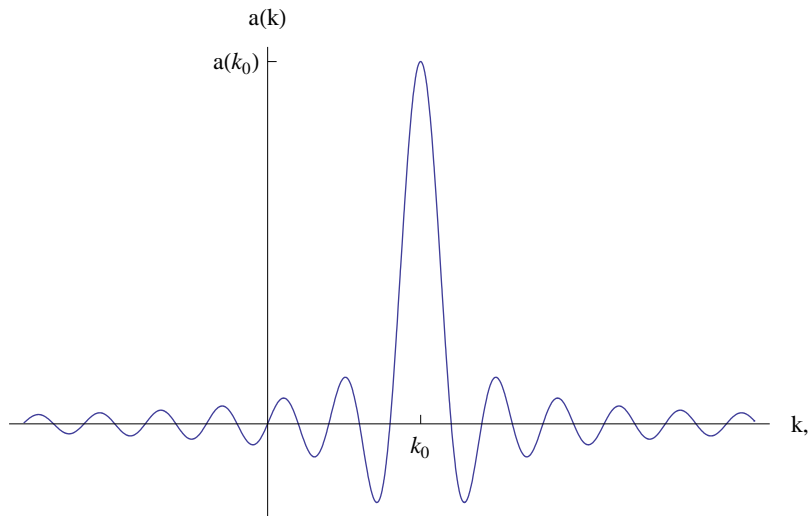


Figure 2: Densità spettrale di un treno d'onde sinusoidale per $k_0 = \pi c^{-1}$ e $\Delta = 10$ cm

Tenendo conto che:

$$\delta(x) = \lim_{T \rightarrow +\infty} \int_{-T}^T \frac{dk}{2\pi} e^{-ikx},$$

essendo $\delta(x)$ la funzione delta di Dirac, segue:

$$a(k) = \sqrt{2\pi} \delta(k - k_0)$$

Cioè ora densità spettrale di un'onda sinusoidale è una delta di Dirac centrata in k_0 . Ciò è consistente poichè un'onda sinusoidale è composta da un sol numero d'onde k_0 .

In fig.(3) è riportata lo spettro di Fourier di $\psi(x, 0)$ per $k_0 = \pi c^{-1}$ e $\Delta = 100$ cm. Per tale valore di Δ la densità $a(k)$ assume già un andamento "deltiforme". Il contributo dominante proviene dai numeri d'onda k tali che $|k - k_0| \ll 1$.

Viceversa, al decrescere di Δ , lo spettro di Fourier $a(k)$ si "allarga" come mostrato in fig. 4.

Nel limite $\Delta \rightarrow 0$, $\psi(x, 0)$ è un impulso sinusoidale di estensione infinitesima. La densità spettrale è $a(k) \rightarrow 0$, e ciò implica che $\psi(x, 0)$ è una

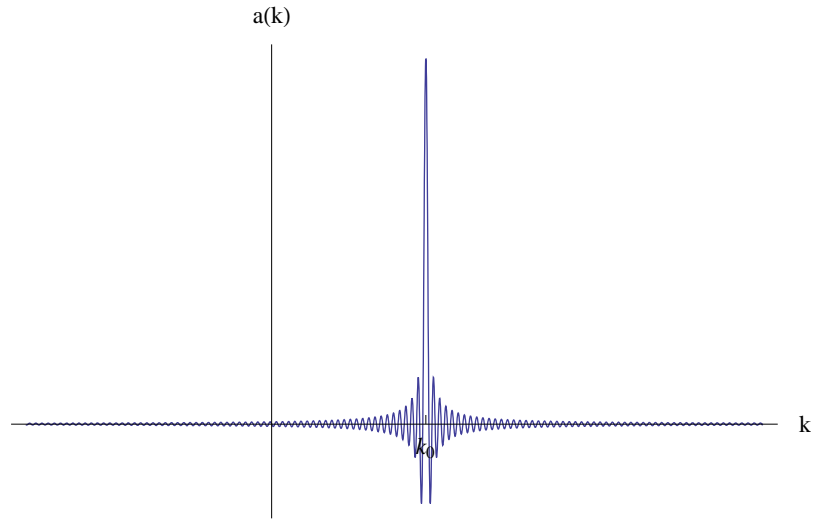


Figure 3: Densità spettrale $a(k)$ per $A = 1$, $\omega_0 = \pi c^{-1}$ e $\Delta = 100$ cm

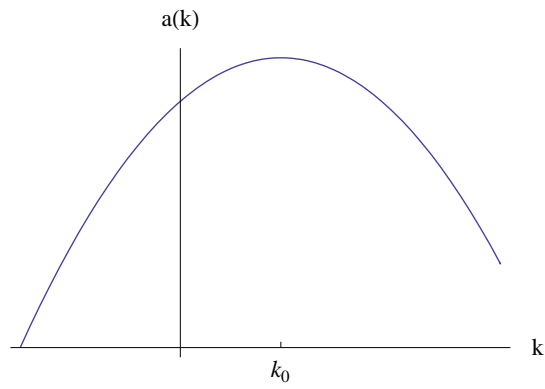


Figure 4: Densità spettrale $a(k)$ per $k_0 = \pi c^{-1}$ e $\Delta = 10^{-1}$ cm

sovrapposizione di infinite componenti monocromatiche ciascuna di ampiezza infinitesima.

Consideriamo ora l'evoluzione temporale del pacchetto d'onde di valore iniziale $\psi(x, 0)$. Dalla (16) vediamo che le singole componenti monocromatiche si propagano a velocità diversa poichè è $\omega = \omega(k)$. Ciò determina una **perdita di coerenza**, in particolar modo se $\Delta x \ll 1$ ($\implies \Delta k \gg 1$). Infatti in tal caso aumenta il numero di componenti monocromatiche per cui gli sfasamenti saranno più consistenti. In maniera simile se $\omega(k)$ varia rapidamente. Quindi consideriamo il caso particolare di poche onde componenti presenti e $\omega(k)$ variabile lentamente. La prima circostanza ci permette di definire un numero d'onde dominante che indichiamo con k_0 . A ciò corrisponde una densità $a(k)$ molto piccata intorno a k_0 . La seconda ipotesi ci consente di sviluppare in serie di Taylor la funzione $\omega(k)$:

$$\omega(k) = \omega(k_0) + \frac{1}{1!} \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} + \dots \quad (21)$$

La (16) è allora approssimata da:

$$\psi_a(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i(k_0 v_g - \omega_0)t} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ik(x - v_g t)} dk, \quad (22)$$

essendo:

$$v_g \stackrel{def}{=} \left. \frac{d\omega(k)}{dk} \right|_{k_0} \quad (23)$$

Ma

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} a(k) e^{ik(x - v_g t)} dk = \psi(x - v_g t, 0),$$

donde

$$\psi_a(x, t) = \psi(x - v_g t, 0) e^{i(k_0 v_g - \omega_0)t} \quad (24)$$

Cioè arrestando lo sviluppo in serie di Taylor della funzione $\omega(k)$ al termine lineare, e a meno di un fattore di fase, il pacchetto si propaga senza

deformarsi con velocità data dalla (23). Chiamiamo v_g **velocità di gruppo** del pacchetto d'onde.

Per le onde luminose:

$$\omega(k) = \frac{ck}{n(k)},$$

essendo $n(k)$ l'indice di rifrazione del mezzo in cui il pacchetto si propaga e c la velocità della luce nel vuoto. In quest'ultimo caso è:

$$v_f = v_g = c$$

Tuttavia la grandezza fisicamente interessante è la velocità di gruppo e non la velocità di fase. In situazioni estreme può essere $v_f > c$, ma ciò non inficia la relatività speciale, poichè l'energia associata all'onda si propaga a velocità v_g che è sempre minore di c .

Accenniamo ora al calcolo esatto. In questo caso è necessario conoscere la **relazione di dispersione** $\omega(k)$.

Osserviamo inoltre che gli effetti dispersivi sono presenti solo se $\omega(k)$ non è lineare in k . Infatti nel caso contrario è $\omega(k) \propto k$, per cui la velocità di gruppo è indipendente da k . Quindi una tipica relazione di dispersione è del tipo $\omega(k) \propto k^n$ con $n > 1$, per cui $v_g \propto k^{n-1}$.

2.4 Equazione di Schrödinger

Ritorniamo alle onde di De Broglie. Ad una particella di impulso p , associamo un'onda di De Broglie con $\lambda = \frac{h}{p}$. In una situazione più realistica dobbiamo considerare un pacchetto d'onde di De Broglie associato alla particella. Il pacchetto dovrà "ricostruire" la traiettoria seguita dalla particella conformemente alle leggi di Newton, nel limite per $\lambda \rightarrow 0$. Si ricordi che ciò corrisponde al limite dell'ottica geometrica. Per il principio di Fermat:

$$\delta \int n(\omega, \mathbf{x}) ds = 0 \implies \delta \int \frac{ds}{v_f(\omega, \mathbf{x})} = 0 \quad (25)$$

Qui stiamo considerando un mezzo non omogeneo.

D'altro canto, la traiettoria della particella di energia E che si muove nel potenziale $V(\mathbf{x})$ è la soluzione del problema variazionale:

$$\delta \int \sqrt{E - V(\mathbf{x})} ds \quad (26)$$

Perciò dobbiamo imporre:

$$\forall \omega, \frac{1}{v_f(\omega, \mathbf{x})} = f(\omega) \sqrt{E(\omega) - V(\mathbf{x})}, \quad (27)$$

poichè anche l'energia verrà ora a dipendere da ω . Qui $f(\omega)$ è una funzione da determinare. La (27) ci assicura che in entrambi i casi la traiettoria è la stessa. Affinche sia percorsa con la medesima legge, deve essere:

$$v_p = v_g, \quad (28)$$

essendo:

$$v_p = \sqrt{\frac{2}{m} [E - V(\mathbf{x})]}, \quad (29)$$

la velocità della particella. Dalla definizione di velocità di gruppo:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{dk}{d\omega} = \frac{d}{d\omega} \left(\frac{\omega}{v_f} \right),$$

donde

$$\frac{d}{d\omega} \left[(\omega) f(\omega) \sqrt{E(\omega) - V(\mathbf{x})} \right] \equiv \frac{1}{v_g} = \sqrt{\frac{m}{2}} \frac{1}{\sqrt{E(\omega) - V(\mathbf{x})}}$$

da cui:

$$f(\omega) = \frac{K}{\omega}, \quad \text{con } K = \text{const}$$

$$E(\omega) = \frac{\sqrt{2m}}{K} \omega + E(0)$$

Ma

$$v_f = \frac{\omega}{K \sqrt{E(\omega) - V(\mathbf{x})}}$$

Quindi

$$k = K \sqrt{E(\omega) - V(\mathbf{x})} = \frac{2\pi}{\lambda}$$

Per un moto non relativistico:

$$\sqrt{E(\omega) - V(\mathbf{x})} = \frac{p}{\sqrt{2m}},$$

donde:

$$\lambda = \frac{2\pi\sqrt{2m}}{Kp}$$

In virtù dell'arbitrarietà di K :

$$K = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar} \implies \lambda = \frac{h}{p},$$

cioè la relazione di De Broglie. Il medesimo valore di K riproduce la relazione di Einstein:

$$E(\omega) = \hbar\omega + E(0)$$

Quindi la legge di dispersione per le onde di De Broglie è:

$$\frac{1}{v_f} = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar\omega} \sqrt{\hbar\omega - V(\mathbf{x})} \quad (30)$$

Determiniamo ora la $\psi(\mathbf{x}, t)$ che descrive la propagazione del pacchetto di De Broglie. Indichiamo con $\psi(\mathbf{x}, t; \omega)$ la generica componente monocromatica. Deve essere:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t; \omega) - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\mathbf{x}, t; \omega) = 0, \quad (31)$$

Per definizione di componente monocromatica:

$$\psi(\mathbf{x}, t; \omega) = u(\mathbf{x}, t) e^{-i\omega t} \quad (32)$$

Calcoliamo le derivate parziali rispetto al tempo:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t; \omega) &= -i\omega \psi(\mathbf{x}, t; \omega) \\ \frac{\partial^2}{\partial t^2} \psi(\mathbf{x}, t; \omega) &= -\omega^2 \psi(\mathbf{x}, t; \omega) \end{aligned} \quad (33)$$

Quindi la (31) diventa:

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t; \omega) + \frac{\omega^2}{v_f^2} \psi(\mathbf{x}, t; \omega) = 0 \quad (34)$$

Tenendo conto della (30) e della seconda delle (33):

$$\nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t; \omega) - \frac{2m}{\hbar^2} V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t; \omega) + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t; \omega) = 0 \quad (35)$$

In forza della linearità dell'equazione (31) possiamo integrare la (35) su tutte le frequenze:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t), \quad (36)$$

che è l'**equazione di Schrödinger**. Tale equazione risolve il problema posto e cioè la determinazione della $\psi(\mathbf{x}, t)$ che descrive la propagazione di un pacchetto di De Broglie (nell'approssimazione dell'ottica geometrica) associato ad una particella di massa m che si muove nel potenziale $V(\mathbf{x})$. Una soluzione della $\psi(\mathbf{x}, t)$ (36) è la **funzione d'onda** della particella.

2.5 Interpretazione fisica dell'equazione di Schrödinger

2.5.1 Interpretazione di Schrödinger

Riscriviamo l'equazione d'onda di Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t), \quad (37)$$

Notiamo immediatamente due differenze tra la (37) e l'equazione di d'Alambert:

1. Le soluzioni $\psi(\mathbf{x}, t)$ dell'equazione di Schrödinger sono complesse.
2. La (37) è un'equazione differenziale del primo ordine nella derivata temporale.

Approfondiremo successivamente gli aspetti matematici dell'equazione d'onda di Schrödinger. Per l'interpretazione fisica, iniziamo con l'osservare che per ogni soluzione $\psi(\mathbf{x}, t)$, esiste la $\psi^*(\mathbf{x}, t)$ indicando con $*$ l'operazione di coniugazione complessa. Schrödinger congetturò quindi che la grandezza:

$$w(\mathbf{x}, t) \stackrel{def}{=} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = \psi(\mathbf{x}, t) \psi^*(\mathbf{x}, t), \quad (38)$$

fosse in qualche modo legata alla densità di carica elettrica associata alla particella (si osservi che a quel tempo ancora non erano state scoperte particelle elettricamente neutre). Quindi se (38) è in qualche modo legata alla densità di carica, dovrà essere possibile costruire un'equazione di continuità a partire dalla funzione d'onda. A tale scopo richiamiamo brevemente alcune nozioni sul trasporto di una grandezza scalare.

Definizione 3 *Il campo vettoriale $\mathbf{j}(\mathbf{x}, t)$ è una **densità di corrente** relativa ad una grandezza scalare $G(t)$, se per ogni versore \mathbf{n} , il prodotto scalare $\mathbf{j} \cdot \mathbf{n}$ è la quantità della grandezza trasportata nell'unità di tempo attraverso l'elemento unitario di superficie e ortogonale a \mathbf{n} .*

Teorema 4

$$\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0, \quad (39)$$

essendo $\mathcal{G}(\mathbf{x}, t)$ la densità della grandezza $G(t)$. La (39) è l'**equazione di continuità** relativa alla grandezza $G(t)$ ed esprime la legge di conservazione di quest'ultima.

Dimostrazione. Sia D un qualunque dominio limitato dello spazio fisico \mathbb{R}^3 , dotato di frontiera regolare. Quindi:

$$G_D(t) = \int_D \mathcal{G}(\mathbf{x}, t) d^3x$$

$G_D(t)$ si conserva se e solo se:

$$\frac{dG_D(t)}{dt} = -\Phi_{\partial D}(\mathbf{j}), \quad (40)$$

essendo

$$\Phi_{\partial D}(\mathbf{j}) = \oint_{\partial D} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} d\sigma$$

il flusso di \mathbf{j} uscente da ∂D . Evidentemente:

$$\frac{dG_D(t)}{dt} = \int_D \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} d^3x$$

Per il teorema di Gauss:

$$\oint_{\partial D} \mathbf{j} \cdot \mathbf{n} d\sigma = \int_D \operatorname{div} \mathbf{j} d^3x$$

Sostituendo nella (40):

$$\forall D \subset \mathbb{R}^3, \int_D \left(\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} \right) d^3x = 0 \implies \frac{\partial \mathcal{G}}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{j} = 0$$

■

Ciò premesso, scriviamo l'equazione di Schrödinger e la sua complessa coniugata:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, t) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\mathbf{x}, t) + V(\mathbf{x}) \psi^*(\mathbf{x}, t) &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (41)$$

Moltiplicando la prima per $\psi^*(\mathbf{x}, t)$, la seconda per $\psi(\mathbf{x}, t)$ e sottraendo:

$$\psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla^2 \psi(\mathbf{x}, t) - \psi(\mathbf{x}, t) \nabla^2 \psi^*(\mathbf{x}, t) + \frac{2im}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 = 0$$

Posto:

$$\begin{aligned} w(\mathbf{x}, t) &= |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \\ \mathbf{S}(\mathbf{x}, t) &= \frac{\hbar}{2im} [\psi^*(\mathbf{x}, t) \nabla \psi - \psi(\mathbf{x}, t) \nabla \psi^*], \end{aligned}$$

abbiamo:

$$\frac{\partial w}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{S} = 0, \quad (42)$$

cioè l'equazione di continuità per la grandezza:

$$\int_D w(\mathbf{x}, t) d^3x$$

Riscriviamo ora l'equazione di continuità (42) in forma integrale:

$$\frac{d}{dt} \int_D w(\mathbf{x}, t) d^3x + \oint_{\partial D} \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} d\sigma = 0,$$

essendo D un qualunque dominio limitato dello spazio fisico \mathbb{R}^3 , dotato di frontiera regolare. In particolare, integriamo w sulla sfera di raggio R :

$$D(R) = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 \mid x^2 + y^2 + z^2 \leq R^2\}$$

Quindi eseguiamo il limite per $R \rightarrow +\infty$:

$$\frac{d}{dt} \lim_{R \rightarrow +\infty} \int_{D(R)} w(\mathbf{x}, t) d^3x = -\frac{\hbar}{2im} \lim_{R \rightarrow +\infty} \oint_{\partial D(R)} \left(\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi^*}{\partial n} \right) d\sigma,$$

qui è:

$$\frac{\partial \psi}{\partial n} = (\nabla \psi) \cdot \mathbf{n}$$

Se

$$\lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow +\infty} \psi(\mathbf{x}, t) = 0, \quad \lim_{|\mathbf{x}| \rightarrow +\infty} \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0, \quad \text{“abbastanza velocemente”}$$

si ha:

$$\lim_{R \rightarrow +\infty} \oint_{\partial D(R)} \left(\psi^*(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi}{\partial n} - \psi(\mathbf{x}, t) \frac{\partial \psi^*}{\partial n} \right) d\sigma = 0,$$

donde:

$$\frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}^3} w(\mathbf{x}, t) d^3x = 0 \implies \int_{\mathbb{R}^3} w(\mathbf{x}, t) d^3x = N = \text{const} \quad (43)$$

N è una **costante di normalizzazione**, poichè eseguendo la sostituzione:

$$\psi \rightarrow \frac{\psi}{\sqrt{N}},$$

la funzione d'onda risulta **normalizzata**:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = 1 \quad (44)$$

A questo punto se q è la carica elettrica della particella, possiamo definire la densità di carica e la densità di corrente:

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{x}, t) &= q |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 \\ \mathbf{j}(\mathbf{x}, t) &= q \mathbf{S}(\mathbf{x}, t) \end{aligned} \quad (45)$$

Tale posizione in realtà è in contrasto con gli esperimenti di interferenza e di diffrazione. Tali contraddizioni sono dovute al fatto che l'onda di De Broglie può sparpagliarsi durante la propagazione, ed in forza delle (45) tale sparpagliamento dovrebbe verificarsi nella distribuzione di carica (anche nei casi in cui la particella viene osservata singolarmente come oggetto puntiforme).

Le (45) introducono un'ulteriore complicazione nel modello dell'atomo di idrogeno. Difatti nel caso di una distribuzione di carica puntiforme, il potenziale a cui è sottoposto l'elettrone è:

$$V(r) = -\frac{e^2}{r}, \quad (46)$$

essendo e la carica dell'elettrone ed $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$. Viceversa, nel caso della distribuzione di carica descritta dalla prima delle (45) dobbiamo aggiungere al secondo membro della (46) un termine che tiene conto della suddetta distribuzione. Di contro, i giusti valori vengono invece riprodotti con il potenziale (46).

Da una approfondita analisi degli esperimenti emerge che è possibile che le (45) sono verificate solo in media, quando si dispone cioè di un grandissimo numero di particelle. Ciò suggerisce un'interpretazione statistica di $\psi(\mathbf{x}, t)$.

2.5.2 Interpretazione statistica di Born

Sia $\psi(\mathbf{x}, t)$ una soluzione normalizzata dell'equazione di Schrödinger, per cui:

$$\int_{\mathbb{R}^3} |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x = 1 \quad (47)$$

$|\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x$ è la probabilità infinitesima di osservare al tempo t la particella nell'elemento di volume d^3x , centrato nel punto $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^3$, e $\mathbf{S}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n}$ è la probabilità infinitesima che la particella attraversi nell'unità di tempo l'elemento di superficie unitario ortogonale a \mathbf{n} .

Poichè la nozione di probabilità non ha senso per singoli eventi, dobbiamo considerare un fascio di particelle, cioè $N \gg 1$ particelle di massa m , neutre o elettricamente cariche con la stessa carica q (ad esempio, elettroni). In un istante iniziale t_0 le particelle avranno il medesimo impulso $p_0 = \hbar \mathbf{k}_0$. Poniamo:

$$\begin{aligned} dN(\mathbf{x}, t) &= |\psi(\mathbf{x}, t)|^2 d^3x \\ d\Phi(\mathbf{x}, t) &= \mathbf{S}(\mathbf{x}, t) \cdot \mathbf{n} d\sigma \end{aligned}$$

$dN(\mathbf{x}, t)$ è la frazione di particelle osservate al tempo t in d^3x . Per la condizione di normalizzazione:

$$\int_{\mathbb{R}^3} dN(\mathbf{x}, t) = 1$$

$d\Phi(\mathbf{x}, t)$ è il **flusso di particelle**, cioè la percentuale di particelle che attraversano $d\sigma$ nell'unità di tempo. Per l'equazione di continuità in forma integrale:

$$\frac{d}{dt} \int_D dN(\mathbf{x}, t) = - \oint_{\partial D} d\Phi(\mathbf{x}, t) \quad (48)$$

Il primo membro della (48) è la velocità di variazione della percentuale di particelle contenute nel dominio D ; il secondo membro è il flusso entrante di particelle nel dominio D . Quindi la (48) esprime la conservazione del numero totale di particelle nel dominio D .