

## Un gentile approccio alla meccanica ondulatoria

Spesso, guidati da ostentato antropocentrismo, si arriva a definire la teoria quantistica come un qualcosa al di fuori dell'ordinario e un modo bizzarro di descrivere la natura, poiché poco conforme ai nostri sensi. In effetti questa branca della Fisica nacque assai dopo la formulazione della sua versione "classica" (poiché quest'ultima è invece più intuitiva e più facile da verificare empiricamente) ed ancora oggi è impossibile stabilire un parallelismo tra la "logica quantistica" e la "logica umana/classica". Un buon approccio consiste nel considerare la logica umana come l'approssimazione di una logica più reale e generale, che è quella quantistica, e di conseguenza definire la meccanica classica nient'altro come l'approssimazione su scala macroscopica della teoria quantistica. In questo approccio vi è un'abbandono dell'antropocentrismo, dal momento che ora la vera natura della realtà è descritta da leggi che prescindono dal nostro modo di pensare. Il vero problema, dunque, non è tanto la scissione tra queste due branche del sapere, quanto il loro legame di approssimazione reciproca, che presuppone una certa via di mezzo tra le due interpretazioni. Se la meccanica classica descrive efficientemente il mondo macroscopico, e la meccanica quantistica descrive con estrema precisione il mondo microscopico, e queste due scienze sono tuttavia indissolubilmente legate poiché la prima è l'approssimazione dell'altra, allora deve esserci una teoria unificatrice che giustifichi sia l'una che l'altra. Tale teoria è tutt'oggi in stato di formulazione, ed evidentemente esula dagli scopi della trattazione. Laddove si voglia tenere vivo il parallelismo tra le due logiche, bisognerà dapprima tracciare i limiti di validità dell'una e dell'altra. Le meccanica quantistica descrive il comportamento di determinati oggetti (in passato denominati con il termine fuorviante di "particelle") tanto piccoli da risultare estremamente sensibili alle fluttuazioni energetiche dello spazio che li circonda. Ne consegue che sarà ben diverso effettuare un'esperimento su tali oggetti microscopici, d'altra parte infatti è noto che misurare il periodo dell'orbita di un pianeta, corpo macroscopico, non influisce apprezzabilmente sulla traiettoria; tuttavia nel mondo quantistico la misura influisce sui risultati stessi dell'esperimento. Dunque alcune delle caratteristiche dei moti dei corpi classici vanno ridefinite. La prima è la localizzazione spaziale. Nel mondo macroscopico un corpo è localizzabile nella teoria in una terna di assi cartesiani in un punto ben definito  $P(x, y, z, t)$  o nella pratica dentro un laboratorio in un determinato istante di tempo. Per compiere questa misura è stato necessario, sperimentalmente, illuminare il corpo stesso affinché i nostri sensi potessero localizzarlo, e dal momento che la teoria deriva dall'esperimento, è possibile affermare che qualunque corpo sia definibile in una certa posizione di un qualsiasi spazio matematico, impostando i problemi di meccanica su di un'assunzione che pare quasi banale. Per l'oggetto quantistico è diverso. Se localizzare sperimentalmente la sua posizione vuol dire "illuminarlo" con dei fotoni di luce, ed essendo questo oggetto tanto minuto da essere suscettibile alle perturbazioni energetiche che conseguono da tale processo, allora l'esito dell'esperimento sarà influenzato dalla misura stessa. In altre parole non conosciamo la posizione precisa dell'oggetto finché non decidiamo noi stessi, in seguito alla perturbazione energetica che operiamo su di esso, tale posizione. Il concetto stesso di "localizzazione" perde di efficacia sperimentale in questo tipo di logica. Le incertezze sono tuttavia limitate da un'unica certezza: se l'oggetto

esiste, esso si trova da qualche parte nello spazio, o meglio, la probabilità di trovarlo sicuramente in tutto lo spazio infinito è massima (o pari a 1). Questa assunzione abbastanza naturale deriva proprio dall'impossibilità di individuare la posizione dell'oggetto quantistico senza operare effettivamente su di esso; in un certo senso si "sospende" lo stato dell'oggetto in un susseguirsi di probabilità in attesa di essere selezionate dalla nostra misura. Ne concluderemmo che il nostro è un universo indeterministico, tuttavia *non lo è così eccessivamente*. Gli oggetti quantistici astratti di cui abbiamo parlato finora hanno una relazione meno astratta con la natura: essi interagiscono con altri corpi per mezzo di fluttuazioni energetiche, le quali influiscono sul loro stesso stato, e dunque sulla probabilità di trovarli in un determinato spazio piuttosto che in un'altro. Dunque qualcosa di *deterministico* permane anche nella logica quantistica, ma non è altro che uno specifico *addensamento di probabilità*. Ora, dal momento che la teoria deriva dall'esperimento, sarà necessario impostare i problemi di tale meccanica secondo una logica probabilistica.

Sperimentalmente si è riscontrato che il comportamento degli oggetti quantistici è per certi versi simile a quello tipico delle onde. Le onde sono descritte in maniera efficace dalla meccanica classica, ma per non rischiare di precipitarsi a scrivere una funzione d'onda quantistica senza una proficua risonanza concettuale occorre fare una precisazione. Se è vero che il corpo puntiforme inteso dalla meccanica classica è localizzabile in un preciso punto  $x$  dello spazio, e un'onda classica definita ad esempio dalla seguente funzione armonica  $y(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$  si estende in tutto lo spazio per  $-\infty < x < \infty$ , l'incertezza concettuale sulla posizione dell'oggetto quantistico si colloca a cavallo tra queste due interpretazioni classiche, ovvero l'oggetto è localizzabile come un pacchetto d'onde di estensione  $\Delta x$ . Dal momento che le onde interagiscono le une con le altre sovrapponendosi per formare un'onda risultante, si potrebbe pensare che gli oggetti quantistici si comportino allo stesso modo. Sperimentalmente è stato tuttavia verificato che nelle interazioni gli uni con gli altri tali oggetti si comportano come corpuscoli, secondo le note leggi classiche di conservazione dell'energia e della quantità di moto. Dunque l'oggetto quantistico si comporta come un pacchetto d'onda quando si propaga, occupando una piccola, ma finita, regione di spazio; si comporta invece come un corpuscolo classico quando trasferisce o riceve energia (e dunque negli urti). Non avrebbe senso pensare diversamente, giacché un'onda trasferirebbe energia in maniera continua e prolungata nel tempo, mentre fin dagli albori della meccanica quantistica è sempre stato osservato che l'energia tra oggetti quantistici è effettivamente trasmessa in quantità discrete, in analogia con gli urti classici tra corpi. In virtù del parallelismo che ci prefissiamo di mantenere tra le due diverse logiche, e prendendo atto delle evidenze sperimentali sopracitate, ci proporremo, trascurando un po' di rigore formale, di derivare una legge generale che descriva il moto degli oggetti quantistici. Assumiamo che l'oggetto quantistico si propaghi come un pacchetto d'onda *monocromatico* di estensione  $\Delta x$ , la monocromaticità allude al fatto che il pacchetto è costituito da una sola componente d'onda che si propaga con velocità di fase  $v = \lambda f$  essendo  $\lambda$  la lunghezza d'onda e  $f$  la frequenza dell'onda. La velocità di gruppo (espressa come  $v_g = \frac{d\omega}{dk}$  dove  $\omega$  è la frequenza angolare di oscillazione e  $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ ) essendo definita come la velocità col quale si propaga la variazione in forma delle ampiezze delle onde costituenti (ma qui di onda ne consideriamo solo una) è nel nostro caso uguale alla velo-

citá di fase. Se indichiamo con  $\Psi(x, t)$  la funzione che descrive lo spostamento dell'onda dalla posizione di equilibrio dell'oscillazione, l'oggetto quantistico si propagerá nello spazio secondo l'equazione classica delle onde

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad (1)$$

É possibile, indicando con  $\eta = \frac{1}{v}$  l'inverso della velocitá di fase, riscrivere la (1) come segue

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \eta^2 \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

Tale raggio monocromatico si propagerá lungo un percorso tra  $A$  e  $B$  secondo il *principio di Fermat*

$$\delta \int_A^B \eta ds = 0 \quad (2)$$

Giustificiamo ora la scelta di questa notazione. Secondo questo principio la traiettoria vera seguita da un raggio di luce é quella per la quale il tempo, necessario per andare da un punto fisso  $A$  ad un altro punto fisso  $B$ , é stazionario rispetto a piccole variazioni dalla traiettoria vera. Dunque se invece di seguire il cosiddetto "percorso vero" il raggio di luce segue un'altro percorso (che é tuttavia molto simile al percorso ideale) allora la differenza tra i tempi di percorrenza é cosí trascurabile da poter essere considerata nulla. Si noti che affinché il principio sia valido i due percorsi devono a loro volta assomigliarsi in maniera tale da poter considerare nulla la loro differenza. Sia allora  $t_1 - t_2 = \delta t$  dove  $t_1$  e  $t_2$  sono i tempi impiegati dal raggio luminoso per percorrere la traiettoria ideale e la traiettoria alternativa rispettivamente: dunque secondo il principio  $\delta t = 0$ . Allo stesso modo indicando con  $l_1$  e  $l_2$  le due differenti traiettorie, affinché il principio riguardante il tempo sia valido, queste non dovranno differire piú di un infinitesimo del secondo ordine, che equivale a dire  $\delta l = 0$ . Ora abbiamo assunto che il principio di Fermat valga anche per la propagazione ondulatoria dell'oggetto quantistico. Sia  $dl$  un segmento di traiettoria percorso in un tempo infinitesimo  $dt$ , se  $v$  é la velocitá dell'oggetto é vero che  $dl = v dt$ . É possibile riscrivere l'ultima equazione operando il seguente artificio  $dl = \frac{1}{v} v dt$ . Avendo ora definito  $\eta = \frac{1}{v}$  avremo  $dl = \eta v dt = \eta ds$  dove ora  $ds = v dt$  é uno spostamento lungo la traiettoria. Integrando sará  $l = \int \eta ds$ . Per il principio di Fermat abbiamo detto che  $\delta l = 0$  allora risulta giustificata la (2).

É possibile applicare il principio di Fermat anche alla meccanica del punto, infatti se ora denominiamo con  $T$  la forza viva che costituisce l'energia cinetica di tale oggetto, essa ubbidisce al *principio di minima azione*

$$\delta \int_{t_a}^{t_b} T dt = 0 \quad (3)$$

Ora, é noto che l'energia cinetica  $T$  é definita, in ambito non-relativistico, come segue

$$\frac{1}{2} m \left( \frac{ds}{dt} \right)^2 = T$$

allora

$$dt = \sqrt{\frac{m}{2T}} ds$$

sostituendo questo valore al differenziale della (3) otteniamo, con qualche aggiustamento

$$\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{2}} \delta \int_A^B \sqrt{T} ds = 0$$

Detta  $E$  l'energia totale dell'oggetto, che assumiamo essere immerso in una regione di energia potenziale  $U = U(x, y, z)$ , per il principio di conservazione dell'energia è  $T = E - U$ . Semplificando i termini costanti nell'ultima equazione e inserendo il valore per  $T$  si ha

$$\delta \int_A^B \sqrt{E - U} ds = 0 \quad (4)$$

Concettualmente ne deduciamo che la (2) e la (4) debbano equivalersi in significato, mediato da una qualche costante  $\Lambda$ . Dovrà dunque essere

$$\eta = \Lambda \sqrt{E - U} \quad (5)$$

Resta da definire il termine di proporzionalità nella (5). A tal fine si osservi che scegliere un pacchetto d'onda monocromatico per descrivere più semplicemente l'oggetto quantistico equivale a descrivere una situazione in cui non vi è dispersione, ciò significa che  $\omega$  non è funzione di  $k$  ed assume la sua forma più semplice:  $\omega = 2\pi f$ . Dalla definizione di velocità di gruppo

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d(2\pi f)}{d\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)} = \frac{2\pi}{2\pi} \frac{df}{d\left(\frac{1}{\lambda}\right)}$$

Richiamando che  $\eta = \frac{1}{\lambda f}$  sarà  $\frac{1}{\lambda} = \eta f$  dunque

$$v_g = \frac{df}{d(\eta f)}$$

In quest'ultima espressione avremo modo di sviluppare la (5). A tal proposito occorrerà tenere presente che siccome l'energia di un'onda è funzione della sua frequenza di oscillazione, conserveremo questa caratteristica tra le proprietà dell'oggetto quantistico. Tenendo dunque a mente che  $E = E(f)$  capovolgiamo l'ultima equazione e sviluppiamo la derivata rispetto alla frequenza

$$\frac{1}{v_g} = \frac{d(\eta f)}{df} = \frac{d}{df}(\Lambda f \sqrt{E - U}) = \frac{d}{df}(\Lambda f) \sqrt{E - U} + \Lambda f \frac{\frac{dE}{df}}{2\sqrt{E - U}}$$

Ricordiamo ora che è sempre

$$v_g = \frac{\sqrt{2}\sqrt{E - U}}{\sqrt{m}}$$

allora

$$\frac{\sqrt{2}\sqrt{m}}{2\sqrt{E-U}} = \frac{d}{df}(\Lambda f)\sqrt{E-U} + \Lambda f \frac{\frac{dE}{df}}{2\sqrt{E-U}}$$

moltiplichiamo ambo i membri per  $2\sqrt{E-U}$  e giungiamo alla seguente espressione

$$\sqrt{2m} = 2\frac{d}{df}(\Lambda f)(E-U) + \Lambda f \frac{dE}{df} \quad (6)$$

Notiamo che questa equazione deve esprimere un'identità rispetto alle coordinate spaziali  $x, y, z$  e che d'altronde queste figurano solo nella funzione  $U(x, y, z)$ . Ne concludiamo che il coefficiente di  $U(x, y, z)$  dovrà essere nullo. Ne viene fuori la condizione

$$\frac{d}{df}(\Lambda f) = 0$$

ovvero

$$\Lambda f = \text{costante} = K \quad (7)$$

La (6) si riduce dunque a

$$\frac{dE}{df} = \frac{\sqrt{2m}}{K}$$

che é facilmente integrabile per dare

$$E(f) = \frac{\sqrt{2m}}{K}f + c$$

dove  $c$  é una costante di integrazione che é sempre possibile porre uguale a zero.

Ponendo allora  $\frac{\sqrt{2m}}{K} = a$  sará  $E = af$  e  $K = \frac{\sqrt{2m}}{a}$ . Dunque si sostituisce nella (7) per ottenere un'espressione per  $\Lambda$

$$\Lambda = \frac{\sqrt{2m}}{af}$$

che é sostituibile nella (5) per ottenere

$$\eta = \frac{\sqrt{2m}}{af}\sqrt{E-U}$$

Concettualmente abbiamo dato forma fisica ad un termine di proporzionalitá arbitrario, ma formalmente non é cambiato molto: rimane comunque indeterminato il valore della costante  $a$ . Ciò puó essere fatto sperimentalmente, e il vantaggio sta nel fatto che il valore di tale costante sará effettivamente piú accessibile alle nostre misure. Tenendo infatti presente la relazione tra  $\eta$  e  $\lambda$  é possibile dire che

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\sqrt{2m}}{a}\sqrt{E-U}$$

ma  $\sqrt{2(E-U)} = \sqrt{mv}$  allora

$$\lambda = \frac{a}{mv} \quad (8)$$

Per trovare il valore di  $a$  sarà necessario organizzare un'esperienza in cui è nota la quantità di moto dell'oggetto quantistico considerato, misurare la lunghezza d'onda di questi (ad esempio sfruttando il fenomeno dell'interferenza) ed ottenere il valore della costante come segue

$$a = \lambda p$$

Illustreremo un breve esempio pratico. Si consideri un'oggetto quantistico di carica elettrica  $q$  e massa  $m$ . Tale massa non sia troppo grande, perché diversamente l'oggetto perderebbe le sue proprietà ondulatorie (giacché abbiamo dimostrato che lunghezza d'onda e massa sono tra loro inversamente proporzionali). Tuttavia anche a certi ordini di grandezza della massa è stato dimostrato che la lunghezza d'onda ha un valore tanto piccolo da rendere inefficaci i normali apparecchi utilizzati per misurare l'interferenza. Il fenomeno dell'interferenza dipende infatti dall'apertura  $d$  attraverso la quale si fa passare l'onda (e dunque al fine di interagire con essa deve essere  $d \approx \lambda$ ). La natura ci fornisce dei candidati all'altezza: i reticoli cristallini. La struttura ordinata e minuta di tali cristalli ci permette di osservare interferenza da parte degli oggetti quantistici. Una volta accelerato da una differenza di potenziale nota  $\Delta V$  si fa incidere l'oggetto sul cristallo ad un certo angolo  $\theta$  con i piani reticolari, ottenendo su di uno schermo (dopo un certo numero di bombardamenti) una figura di interferenza descritta dalla legge di Bragg

$$u\lambda = 2d \sin \theta$$

Nota la costante  $d$  caratteristica del cristallo, misurando gli ordini  $u$  delle frange di interferenza è possibile calcolare il valore di  $\lambda$ . Dunque essendo

$$v = \sqrt{\frac{2q\Delta V}{m}}$$

si sostituisce tale valore nella (8) utilizzando la legge di Bragg ad esempio per il primo ordine di interferenza  $u = 1$

$$a = 2d \sin \theta \sqrt{2mq\Delta V}$$

Questo valore è stato calcolato con precisione in diversi esperimenti anche indipendenti tra loro. Oggi è noto essere  $a = 6.626 \cdot 10^{-34} J s$  ed è denominato come *costante di Planck* e indicato con  $h$ . La (8) è allora detta *legge di De Broglie*

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (9)$$

In precedenza avevamo concluso che  $E(f) = a f$ , ora alla luce delle ultime considerazioni questa legge viene a coincidere con la legge di Planck-Einstein  $E = h f$  che permise di risolvere i problemi del corpo nero e dell'effetto fotoelettrico, varando la teoria dei quanti agli inizi del XX secolo. Riscriviamo ora l'espressione per  $\eta$  come segue

$$\eta = \frac{\sqrt{2m}}{h f} \sqrt{E - U} \quad (10)$$

Non resta che sostituire questo valore all'equazione dell'onda (1) per ottenere

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{2m}{h^2 f^2} (E - U) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} \quad (11)$$

che é una forma dell'*equazione di Schroedinger*. Prima di discutere l'importanza concettuale di questa equazione, conviene riscriverla in una forma piú immediata. Si assuma che una soluzione della (11) sia la generica funzione

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - 2\pi f t)}$$

essendo "e" il numero di nepero e  $i$  l'unitá complessa. Allora sará

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -2\pi i f A e^{i(kx - 2\pi f t)} = -2\pi i f \Psi$$

e poi

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = (-2\pi i f)(-2\pi i f) A e^{i(kx - 2\pi f t)} = -4\pi^2 f^2 \Psi$$

Sostituendo nella (11) e ponendo per brevità la costante di planck *ridotta*  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  si ha

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -\frac{2m}{\hbar^2 4\pi^2 f^2} (E - U) 4\pi^2 f^2 \Psi$$

ovvero, operando le dovute semplificazioni

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - U) \Psi = 0 \quad (12)$$

La forma di questa equazione richiama evidentemente la classica equazione differenziale dell'oscillatore armonico  $\ddot{y} + \omega^2 y = 0$ . Vi sono però alcune differenze altrettanto evidenti, la prima é la piú ovvia: a differenza dell'oscillatore la (12) presenta derivate rispetto allo spazio, non il tempo; la seconda: nella (12) compare l'energia potenziale dell'oggetto quantistico, la quale é funzione anch'essa delle coordinate  $U(x, y, z)$  dunque la soluzione di questa equazione differenziale non é immediata come quella di un semplice oscillatore armonico (almeno nel caso in cui l'oggetto é soggetto a un campo di forza); la terza: mentre nell'oscillatore é noto che  $y(x, t)$  descrive lo spostamento dalla posizione di equilibrio, non sappiamo concretamente cosa significhi la funzione  $\Psi(x, t)$ . Schroedinger stesso, al momento della pubblicazione del suo "*Quantisierung als Eigenwertproblem*" nel 1926, chiamó  $\Psi(x, t)$  "scalare di campo" ed era ben lungi da una sua chiara interpretazione fisica. Dal momento che la sua equazione era impostata sul problema degli elettroni, interpretó tuttavia tale funzione come la densità di carica dell'elettrone. Sulla base delle considerazioni riportate all'inizio della trattazione, l'interpretazione moderna vuole che  $\Psi(x, t)$  rappresenti l'*ampiezza* della probabilitá di trovare l'oggetto quantistico in una data regione dello spazio. Ma cosí come si deve quadrare l'ampiezza di un'onda meccanica per ottenere la sua energia, cosí Max Born suggerí di calcolare la *densità di probabilitá* di trovare l'oggetto quantistico semplicemente quadrando la sua funzione d'onda, dunque

$$P_l(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 \quad (13)$$

Nel caso unidimensionale, tale densità di probabilitá é detta per unitá di lunghezza, e descrive com'è distribuita nello spazio la probabilitá di trovare l'oggetto quantistico in un determinato istante di tempo  $t$ . Considerando sempre il caso unidimensionale, la probabilitá di trovare l'oggetto quantistico tra  $x$  e  $x + dx$  é calcolata come segue

$$P(x) = \int \Psi^2(x) dx$$

Ora, la (12) é un'equazione omogenea. Ciò significa che una volta trovata una soluzione  $\Psi(x)$  ne esistono infinite altre che si ottengono semplicemente moltiplicando  $\Psi(x)$  per una costante. Tale indeterminazione é risolta con il processo di normalizzazione, che si basa sulla naturale assunzione che la probabilità di trovare l'oggetto quantistico da qualche parte in *tutto* lo spazio é massima o pari a 1. In formule deve essere

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(x) dx = 1$$

Come esempio in precedenza abbiamo assunto che  $\Psi(x, t) = A e^{i(kx - 2\pi f t)}$  il suo quadrato si ottiene moltiplicando tale funzione per il suo complesso coniugato  $\Psi^*(x, t) = A^* e^{-i(kx - 2\pi f t)}$  allora

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx &= A^* A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i(kx - 2\pi f t)} e^{i(kx - 2\pi f t)} dx = 1 \\ A^* A \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i kx + i kx + i 2\pi f - i 2\pi f} dx &= A^* A \int_{-\infty}^{\infty} e^0 dx = A^* A \int_{-\infty}^{\infty} dx \\ &= A^* A [\infty - (-\infty)] = A^* A \infty = 1 \end{aligned}$$

Ciò é assurdo, nessuna costante moltiplicata per l'infinito puó mai dare uno. Il significato é immediato: non tutte le funzioni sono normalizzabili. Il problema allora é il seguente: trovata una soluzione per la (12), affinché abbia significato fisico dovrà essere una funzione normalizzabile.

A titolo di esempio, consideriamo un'oggetto quantistico esente da forze. Se la forza é conservativa essa é indicata come il gradiente del suo potenziale scalare  $F = -\nabla U$ . Per  $F = 0$  si ha dunque (caso unidimensionale)  $\frac{dU}{dx} = 0$  e dunque l'oggetto é immerso in una regione di spazio in cui  $U = \text{costante}$ . Dato che é totalmente arbitrario, é possibile porre  $U = 0$  e la (12) diventa

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \Psi = 0$$

Questa equazione differenziale ha soluzioni esponenziali del tipo  $\Psi(x) = e^{p x}$  con  $p$  costante da determinare. Dunque  $\frac{\partial \Psi}{\partial x} = p e^{p x}$  e  $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = p^2 e^{p x}$ . Andando a sostituire nell'equazione

$$p^2 e^{p x} + \frac{2m}{\hbar^2} E e^{p x} = 0$$

Ora, essendo  $e^{p x} \neq 0 \forall x \in \mathbb{R}$  semplifichiamo l'espressione ed otteniamo un'equazione di secondo grado in  $p$

$$p^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$$

con radici complesse

$$p = \pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

Dunque la soluzione piú generale é data da

$$\Psi = C_1 e^{i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x} + C_2 e^{-i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x}$$



Con  $C_1$  e  $C_2$  costanti di integrazione. Ora, dall'identità di Eulero

$$e^{i\alpha x} = \cos \alpha x + i \sin \alpha x$$

dunque

$$\Psi = C_1 \cos \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x + i C_1 \sin \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x + C_2 \cos \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x - i C_2 \sin \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x$$

Ponendo  $C_1 + C_2 = A$  e  $i(C_1 - C_2) = B$  arriviamo a

$$\Psi = A \cos \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x + B \sin \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x$$

Per calcolare le costanti indeterminate  $A$  e  $B$  sono necessarie delle condizioni al contorno, e in ultima analisi la condizione di normalizzazione. Sempre come esempio, consideriamo il caso piú semplice in cui l'oggetto esista in una regione dello spazio definita da  $0 \leq x \leq a$  tale che  $\Psi(0) = \Psi(a) = 0$  (tali sono le condizioni al contorno). Dunque

$$\Psi(0) = A \cos 0 + B \sin 0 = A = 0$$

e pertanto la soluzione si semplifica in

$$\Psi = B \sin \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} x$$

Applicando la seconda condizione

$$\Psi(a) = B \sin \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} a = 0$$

che, trascurando la banale soluzione  $B = 0$  (che porrebbe fine al problema) equivale a dire

$$\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} a = n\pi \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

Otteniamo cosí un'espressione per i valori di energia accessibili per l'oggetto quantistico in tale situazione

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$$

Sostituendo questo valore nella funzione d'onda

$$\Psi = B \sin \frac{n\pi}{a} x$$

A questo punto occorrerà normalizzare la funzione

$$B^2 \int_{-\infty}^{\infty} \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1$$

avendo tuttavia cura di osservare che abbiamo definito l'oggetto quantistico in una specifica regione dello spazio, in particolare

$$\Psi(x) = \begin{cases} B \sin \frac{n\pi}{a} x & 0 < x < a \\ 0 & \text{altrove} \end{cases} \quad (14)$$

Dunque la condizione di normalizzazione si riduce semplicemente a

$$B^2 \int_0^a \sin^2 \frac{n\pi}{a} x dx = 1$$

Per calcolare questo integrale sostituiamo  $\frac{n\pi}{a} x = u$  sar  allora  $\frac{du}{dx} = \frac{n\pi}{a}$  e allora  $dx = \frac{a}{n\pi} du$ . Porremo inoltre per brevity  $q = \frac{n\pi}{a}$  e gli estremi di integrazione divengono  $0 \leq \frac{u}{q} \leq a$  ovvero  $0 \leq u \leq qa$ . Allora notando che vale l'identit  goniometrica  $\sin^2(u) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2}\cos(2u)$  l'integrale diviene

$$\frac{B^2}{2q} \int_0^{qa} du - \frac{B^2}{2q} \int_0^{qa} \cos(2u) du = \frac{B^2}{2q} (qa) - \frac{B^2}{2q} \int_0^{qa} \cos(2u) du = 1$$

Ora, sia  $2u = s$  dunque  $\frac{ds}{du} = 2$  e  $du = \frac{ds}{2}$ . Gli estremi di integrazione saranno  $0 \leq s \leq 2qa$  e pertanto  $\frac{1}{2} \int_0^{2qa} \cos(s) ds = \sin(2qa) - \sin(0) = \sin(2\frac{n\pi}{a} a) = \sin(2n\pi) = 0$  per  $n = 1, 2, 3, \dots$

L'integrale vale dunque

$$\frac{B^2}{2q} qa = \frac{B^2}{2} a = 1$$

pertanto calcoliamo il valore di  $B$  per normalizzare la funzione

$$B = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2}$$

La funzione d'onda diviene, in definitiva

$$\Psi = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \sin \frac{n\pi}{a} x \quad (15)$$

Occorre ora soffermarci sul significato concettuale dei coefficienti  $n$ . Questi derivano da nient'altro che dalle condizioni al contorno: se l'oggetto deve comportarsi come descritto dalla (14) allora solo determinati *stati* del suo moto sono permessi. La trattazione   analoga a quella delle onde stazionarie su di una corda fissa agli estremi, le cui lunghezze d'onda possono assumere solo determinati valori. Il termine "quantizzazione" deriva proprio da questo aspetto, dato che anche l'energia del corpo pu  assumere solo valori discreti

$$E = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2m a^2}$$

L'oggetto quantistico pu  trovarsi in uno qualsiasi degli stati  $n = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots$  ciascuno descritto dalla corrispondente funzione d'onda (15) ed avente l'energia corrispondente. Ovviamente se   noto con certezza che l'oggetto si trova in uno specifico stato  $\Psi_{n_a}$  allora questi *sicuramente non* si trover  in qualsiasi altro stato  $\Psi_{n_b}$ . La questione che potremmo pensare di analizzare   la seguente: qual'  la probabilit  che l'oggetto si trovi in una determinata posizione tra  $0 < x < a$ ? Ma alla luce della (15) il problema si estende in significato: qual' 

la probabilità di trovare l'oggetto in una determinata posizione tra  $0 < x < a$  con una determinata energia? Esemplicheremo il ragionamento calcolando la probabilità per  $x_1 \leq x \leq x_2$  in ciascuno stato  $n=1,2,3\dots$  di energia  $E_n$ . La probabilità é al solito calcolata integrando il quadrato della (15)

$$P = \frac{2}{a} \int_{x_1}^{x_2} \sin^2 \left( \frac{n\pi}{a} x \right) dx$$

Applicando lo stesso calcolo che ci ha condotti alla normalizzazione otteniamo

$$P = \frac{x_2 - x_1}{a} - \frac{1}{2n\pi} \left[ \sin \frac{2n\pi x_2}{a} - \sin \frac{2n\pi x_1}{a} \right]$$

Ora, secondo la formula di prostaferesi

$$\sin \alpha - \sin \beta = 2 \cos \frac{\alpha + \beta}{2} \sin \frac{\alpha - \beta}{2}$$

dunque

$$P = \frac{x_2 - x_1}{a} - \frac{1}{n\pi} \cos \left[ \frac{n\pi}{a} (x_2 + x_1) \right] \sin \left[ \frac{n\pi}{a} (x_2 - x_1) \right] \quad (16)$$

Poniamo per brevità  $a = 1$  ed analizziamo la regione di spazio tra  $0 < x < 1$ : calcoleremo la probabilità di trovare l'oggetto in un intorno circolare di  $x = 0.5$ . Tale intorno é per definizione  $x_1 = x - \epsilon \leq x \leq x + \epsilon = x_2$ . Ad esempio possiamo rendere grande o piccolo a piacere l'intorno a seconda del valore di  $\epsilon$ . In questo caso scegliamo  $\epsilon = 0.01$ . Sulla base di queste scelte abbiamo che  $x_2 - x_1 = 0.51 - 0.49 = 0.02$  e  $x_2 + x_1 = 0.51 + 0.49 = 1$  allora l'espressione, in funzione di  $n$ , diviene

$$P(n) = 0.02 - \frac{1}{n\pi} \cos(n\pi) \sin(0.02n\pi)$$

o meglio, convertendo l'argomento del seno in gradi sessagesimali ai fini dei calcoli

$$P(n) = 0.02 - \frac{1}{n\pi} \cos(n\pi) \sin(3.6^\circ n) \quad (17)$$

Calcoleremo ora tale probabilità nel caso in cui l'oggetto si trovi nel primo stato quantistico definito da  $n = 1$ .

$$P(1) = 0.02 - \frac{\cos(\pi)}{\pi} \sin(3.6^\circ) = 0.02 + \frac{\sin(3.6^\circ)}{\pi} = 0.02 + 1.99 \cdot 10^{-2} = 3.99 \cdot 10^{-2}$$

Ciò significa che v'è il 3.99% di probabilità di trovare l'oggetto in un intorno di  $x = 0.5$  con un'energia pari a

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} = \frac{5.48 \cdot 10^{-68}}{m} J/kg$$

e notiamo che l'energia minima che può assumere il corpo (lo stato  $n = 1$ ) non é, come nella meccanica classica,  $E = 0$ . A titolo di esempio calcoleremo le probabilità di trovare l'oggetto in un intorno piccolo di  $x=0.5$  nei primi 10 stati di energia  $E_n = n^2 \frac{5.48 \cdot 10^{-68}}{m}$

$$P(2) = 0.0052\%$$

$$\begin{aligned}
P(3) &= 3.98\% \\
P(4) &= 0.0209\% \\
P(5) &= 3.96\% \\
P(6) &= 0.047\% \\
P(7) &= 3.93\% \\
P(8) &= 0.083\% \\
P(9) &= 3.89\% \\
P(10) &= 0.129\%
\end{aligned}$$

Osserviamo ora una particolarit a riguardante la situazione specifica dell'oggetto vincolato secondo la (14): non si riscontra una relazione lineare tra i valori di  $n$  e  $P(n)$ . Si nota anzi che per gli  $n$  pari la probabilit a  e molto pi u bassa che per gli  $n$  dispari. Ci o  e solo un caso particolare, che ora esemplificheremo notando che il termine in coseno della (17) prende i valori  $-1$  e  $+1$  a seconda che  $n$  sia dispari o pari. Scriveremo dunque l'espressione della probabilit a per  $n$  dispari o pari come segue

$$P(n) = \begin{cases} 0.02 + \frac{\sin(3.6^\circ n)}{n\pi} & n = 1, 3, 5, 7\dots \\ 0.02 - \frac{\sin(3.6^\circ n)}{n\pi} & n = 2, 4, 6, 8\dots \end{cases}$$

Se al crescere dell'energia la probabilit a diminuisce per gli  $n$  dispari e cresce per gli  $n$  pari, notiamo che in entrambi i casi  e comunque

$$\lim_{n \rightarrow \infty} P(n) = 0.02 \equiv 2\%$$

All'aumentare dell'energia (e quindi di  $n$ ) la probabilit a si riduce a

$$P = \frac{x_2 - x_1}{a} = 2\%$$

che  e il caso classico. Tale propriet a  e nota come *principio di corrispondenza*, il quale vuole che per energie elevate l'oggetto quantistico si comporti come un corpo macroscopico (questo  e un'esempio della relazione di approssimazione citata all'inizio della trattazione). Gli esempi precedenti rappresentano un primo approccio alla filosofia della meccanica ondulatoria. Avendo analizzato esclusivamente il caso unidimensionale, si noti che le stesse conclusioni si possono trarre anche per una particella libera nelle tre dimensioni.

Rimanendo sull'asse delle  $x$ , supponiamo ora che ivi sia presente un potenziale definito come segue

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_o & x > 0 \end{cases}$$

Tale definizione vuole rappresentare una situazione detta *gradino di potenziale* nella quale un oggetto quantistico, immaginando che arrivi da  $x = -\infty$  in prossimit a di  $x = 0$ , risente bruscamente di una forza. Consideriamo ad esempio un elettrone che arrivi da  $-\infty$  con una certa energia  $E$  ed immaginiamo di

collocare in un intorno di  $x = 0$  un condensatore che generi una tensione  $U_o = \xi s$  dove  $s$  é la distanza tra le due armature e  $\xi$  é il campo elettrico avente direzione lungo l'asse  $x$ . Diminuendo la distanza  $s$  tra le armature facciamo sí che  $\xi = \frac{U_o}{s}$  assuma un valore abbastanza alto in modo che la forza di cui risente l'elettrone  $F = q\xi$  abbia l'effetto analogo di una parete rigida sulla quale viene scagliata una pallina, la quale, se non ha energia sufficiente per penetrare la barriera, viene respinta (per le onde questo fatto é reso tramite la parola *riflessione*). Ovviamente per realizzare ciò si suppone che i segni delle armature siano disposti in modo da generare un campo elettrico che decelerì il moto dell'elettrone. Questi arriva da sinistra nella regione in cui  $x < 0$  e il suo moto si descrive tramite l'equazione di Schroedinger

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E_o \Psi = 0$$

essendo  $E_o$  l'energia totale dell'elettrone (che in assenza di forze equivale alla sua energia cinetica) e  $m$  la sua massa. Ponendo

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E}$$

la soluzione piú generale é, com'è noto

$$\Psi = c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx}$$

Questa soluzione rappresenta analiticamente la sovrapposizione di un'onda progressiva (che si propaga nella direzione delle  $x$  positive) di ampiezza  $c_1$  e una regressiva (che si propaga nel verso opposto) di ampiezza  $c_2$ . Secondo l'interpretazione ondulatoria invece questa soluzione rappresenta l'ampiezza di probabilità di trovare l'elettrone in moto verso il gradino di potenziale (impostando il problema con l'elettrone che arriva da sinistra notiamo che tale ampiezza di probabilità é giustificata a priori) sommata all'ampiezza di probabilità di trovare l'elettrone che si allontana dal gradino. Nella seconda regione (quella definita in  $x > 0$ ) l'equazione di Schroedinger é

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E_o - U_o) \Psi = 0$$

Impostando

$$k_o = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E_o - U_o)}$$

l'equazione avrà soluzione generale

$$\Psi = c_3 e^{ik_o x} + c_4 e^{-ik_o x}$$

Anche per questa soluzione valgono le interpretazioni ondulatorie con l'unica eccezione che, purché abbia significato fisico, dovrà essere  $c_4 = 0$ . Il motivo di questa considerazione é semplice: come abbiamo detto l'elettrone arriva da sinistra, dunque non ha significato affermare l'esistenza di un'onda regressiva nella seconda regione (giacché se cosí fosse staremmo descrivendo un moto da destra verso sinistra). Non é possibile fare la stessa affermazione a priori anche per la

prima regione. Se riprendiamo l'esempio della pallina in moto verso la parete, ci accorgiamo che la sua riflessione (o equivalentemente il suo moto regressivo) dipenderá dall'energia di questa, perché se avesse abbastanza energia riuscirebbe a penetrare la barriera senza fare ritorno alla regione  $x < 0$ . Dobbiamo dunque considerare il problema dal punto di vista energetico.

Supponiamo che sia  $E_o \geq U_o$ : secondo la meccanica classica l'elettrone sarebbe in grado di penetrare nella seconda regione con assoluta certezza. Secondo la meccanica ondulatoria dobbiamo considerare la funzione d'onda

$$\Psi(x) = \begin{cases} c_1 e^{i k x} + c_2 e^{-i k x} & x < 0 \\ c_3 e^{i k_o x} & x > 0 \end{cases}$$

e affinché abbia significato fisico dovremo chiedere che questa funzione e le sue derivate siano continue nel punto sospetto  $x = 0$ . La prima condizione si esprime come segue

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \Psi(x) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \Psi(x)$$

e ci conduce alla seguente equazione

$$c_1 + c_2 = c_3$$

Mentre la seconda condizione é esemplificata da

$$\lim_{x \rightarrow 0^-} \Psi'(x) = \lim_{x \rightarrow 0^+} \Psi'(x)$$

che ci da

$$i k c_1 - i k c_2 = i k_o c_3$$

Dunque, semplificando l'ultima equazione, giungiamo al sistema

$$\begin{cases} c_1 + c_2 = c_3 \\ k(c_1 - c_2) = k_o c_3 \end{cases}$$

Ora, ponendo

$$\varrho = \frac{k_o}{k} = \sqrt{1 - \frac{U_o}{E_o}}$$

sostituiamo  $c_3$  per ottenere

$$c_1 - c_2 = \varrho(c_1 + c_2)$$

che ci conduce a

$$c_2 = \left( \frac{1 - \varrho}{1 + \varrho} \right) c_1 \quad (18)$$

Questa equazione ci dice che l'ampiezza della funzione d'onda riflessa é proporzionale all'ampiezza della funzione incidente e che il suo valore dipende dall'energia iniziale dell'elettrone. Notiamo quí la prima importante differenza rispetto alla trattazione classica: anche se  $E_o > U_o$  sono comunque presenti ampiezze

di probabilità di riflessione nella prima regione. In particolare considerando il quadrato del rapporto tra le ampiezze nella (18) otteniamo

$$\left(\frac{c_2}{c_1}\right)^2 = \left(\frac{1-\varrho}{1+\varrho}\right)^2 \quad (19)$$

Interpretando tale quantità come la probabilità che l'elettrone venga riflesso, allora é possibile considerare la (19) come il *coefficiente di riflessione*

$$R = \left(\frac{1-\varrho}{1+\varrho}\right)^2 \quad (20)$$

Per complementarità definiamo il coefficiente di trasmissione come

$$\tau = 1 - R = 1 - \left(\frac{1-\varrho}{1+\varrho}\right)^2$$

ossia

$$\tau = \frac{4\varrho}{(1+\varrho)^2} \quad (21)$$

Per la meccanica classica se l'energia dell'elettrone é sufficiente questi ha probabilità nulla di essere riflesso e dunque sarà solamente trasmesso. Per la meccanica ondulatoria l'elettrone ha allo stesso tempo sia una certa probabilità non nulla di essere riflesso, sia una probabilità di essere trasmesso. Notiamo una netta differenza tra le due trattazioni per il caso  $E_o = U_o$ : se classicamente tale energia é sufficiente affinché l'elettrone sia trasmesso senza riflessione, in meccanica ondulatoria sarà  $R = 1$  e l'elettrone sarà sempre riflesso dalla barriera di potenziale.

Supponiamo ora che sia  $E_o < U_o$ : secondo la meccanica classica l'elettrone non sarebbe in grado di superare il gradino di potenziale, venendo sempre riflesso. La trattazione é formalmente analoga a quella del caso  $E_o \geq U_o$  con la funzione d'onda definita nei seguenti intervalli

$$\Psi(x) = \begin{cases} c_1 e^{ikx} + c_2 e^{-ikx} & x < 0 \\ c_3 e^{ik_f x} & x > 0 \end{cases}$$

con l'unica differenza

$$k_f = \sqrt{-\frac{2m}{\hbar^2}(E_o - U_o)} = i\sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(E_o - U_o)} = ik_o$$

poiché  $E_o < U_o$ . Inoltre

$$\varrho_f = \frac{k_f}{k} = i\frac{k_o}{k} = i\varrho$$

e la (18) diviene

$$c_2 = \left(\frac{1-i\varrho}{1+i\varrho}\right) c_1 \quad (22)$$

Ora, la (22) presenta dei termini complessi: il suo quadrato si calcola moltiplicandola per il proprio complesso coniugato

$$R = \frac{c_2 c_2^*}{c_1 c_1^*} = \frac{(1-i\varrho)(1+i\varrho)}{(1+i\varrho)(1-i\varrho)} = 1$$

se l'elettrone arriva con un'energia minore di quella necessaria, verrà sempre riflesso. In questo caso la meccanica classica e la meccanica ondulatoria predicono lo stesso risultato. Notiamo però che sostituendo  $k_f$  alla funzione d'onda si ha

$$\Psi(x) = \begin{cases} c_1 e^{i k x} + c_2 e^{-i k x} & x < 0 \\ c_3 e^{-k_o x} & x > 0 \end{cases}$$

Il termine in  $c_3$  non ha esponente complesso, dunque perde le sue caratteristiche ondulatorie e diviene semplicemente un esponenziale decrescente. Il fatto che sia definita una funzione d'onda in  $x > 0$  anche se l'elettrone viene riflesso con assoluta certezza sembrerebbe paradossale. Nonostante l'energia dell'elettrone sia minore di quella necessaria, è possibile trovarlo anche nella seconda regione. Ciò dovrebbe violare le condizioni di realtà della meccanica classica, poiché essendo l'energia totale dell'elettrone minore della sua energia potenziale, allora l'energia cinetica di questi risulterà negativa e dunque la sua velocità sarà immaginaria. L'interpretazione corretta è la seguente: effettuando una misura sperimentale della posizione dell'elettrone tra le due regioni, allora è possibile trovarlo anche immediatamente al di là del gradino di potenziale. Il motivo è semplice ed è basato sulla natura degli oggetti quantistici come gli elettroni. Una misura sperimentale su di un oggetto quantistico (che è sensibilissimo alle fluttuazioni energetiche da noi operate in tale atto) fornisce *inevitabilmente* a questi una certa quantità di moto e dunque una certa energia; una tale energia permette all'oggetto di superare leggermente la barriera di potenziale ed è per questo motivo che v'è una probabilità non nulla di trovare l'elettrone immediatamente dopo  $x = 0$ . Tuttavia come si vede analiticamente tale probabilità decresce molto velocemente nelle immediate distanze da  $x = 0$ .

Bisogna tenere a mente che le ultime considerazioni sono derivate in primo luogo da evidenze sperimentali, e solo in secondo luogo dalla trattazione matematica. Si potrebbe argomentare tuttavia che il paradosso probabilistico evidenziato nell'ultimo caso si sia presentato dapprima analiticamente, e solo dopo è stato necessario giustificarne la validità fisica. Tale assunzione è concettualmente sbagliata, perché sarebbe errato dimenticare che l'impalcatura analitica della meccanica ondulatoria è stata costruita, come dimostrato a grandi linee, proprio al fine di poter descrivere il comportamento degli oggetti quantistici osservato negli esperimenti.

Si noti che in questo primo approccio non si è accennato all'evoluzione temporale dei sistemi quantistici. Della funzione d'onda  $\Psi(x, t)$  abbiamo accennato solamente alla funzione spaziale  $\Psi(x)$  indipendente dal tempo. Tuttavia l'equazione di Schroedinger scritta nella forma della (12) non allude al fatto che il sistema non si evolva temporalmente, ma dice che l'unica cosa indipendente dal tempo è l'energia. L'evoluzione temporale sarà descritta dalla funzione  $\Psi(t)$ , tale che la soluzione completa di un problema in meccanica ondulatoria sarà data da  $\Psi(x, t) = \Psi(x)\Psi(t)$

Matteo Parriciatu