

III. VERSO L'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

L'esigenza di unificare su scala atomica la descrizione del movimento dei corpi secondo le leggi della meccanica con quella dei fenomeni elettromagnetici impone due requisiti fondamentali che ogni nuova teoria deve soddisfare. Da un lato, nell'interazione tra radiazione e materia si presentano aspetti che rimettono in discussione la vera natura della luce e, più in generale, della radiazione elettromagnetica: la teoria corpuscolare trova insperato alimento dalla spiegazione dell'effetto fotoelettrico e dell'effetto Compton, affiancando aspetti corpuscolari a quelli ondulatori della radiazione. D'altra parte, la discretizzazione dei valori di energia che la radiazione può scambiare con la materia suggerisce che anche l'energia di un sistema fisico possa assumere solo valori discreti e che nei processi di emissione e assorbimento la frequenza della radiazione venga fissata dall'ammontare del salto di energia che il sistema subisce. Emerge così l'idea che l'azione, estesa a una traiettoria chiusa percorsa con energia costante, non possa assumere valori arbitrari e variabili in modo continuo, ma debba essere quantizzata. Questa idea viene formalizzata nelle regole di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld.

Per le sue ricerche sulla struttura degli atomi e della radiazione da loro emessa, Bohr viene insignito del premio Nobel per la Fisica nel 1922. Intorno al 1920 la teoria dei quanti nella formulazione di Bohr e Sommerfeld aveva infatti ottenuto sicuri successi nella classificazione degli spettri atomici e nel calcolo delle intensità delle righe spettrali, permettendo un'organizzazione sistematica della ricca messe di dati spettroscopici. La teoria si avvaleva essenzialmente di due postulati fondamentali riguardanti i sistemi atomici chiusi¹. Il primo ipotizza l'esistenza di stati stazionari stabili, definiti dalla quantizzazione dell'azione relativa al moto chiuso, e implica il

¹ N. Bohr: *Über die Anwendung der Quantentheorie auf den Atombau. I. Die Grundpostulate der Quantentheorie [Applicazione della teoria dei quanti alla struttura atomica. I. I postulati fondamentali della teoria dei quanti]*, *Zeitschrift für Physik* **13** (1923) 117–165.

principio adiabatico di Ehrenfest, in base al quale l'azione resta costante anche se c'è una debole perturbazione esterna che provoca una transizione tra stati stazionari. Il secondo postulato definisce la frequenza della radiazione emessa o assorbita durante la transizione mediante la differenza di energia tra gli stati iniziale e finale dell'atomo. Da questo postulato emerge il principio di corrispondenza, proposto da Bohr come principio ispiratore nella costruzione della nuova teoria dei quanti, in modo da riottenere, sotto opportune condizioni, i risultati della fisica classica.

Nonostante il loro successo, le regole di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld risultano artificiose e ingiustificate², lasciando molti risultati sperimentali senza spiegazione. Ne derivava però la convinzione che negli atomi esistessero moti periodici stazionari degli elettroni, non descrivibili con la meccanica classica, e si faceva strada la necessità di costruire una nuova meccanica che qualcuno aveva già battezzato *meccanica quantistica*³.

Improvvisamente, nella seconda metà del 1925 e nei primi mesi del 1926, si presentarono due formulazioni, apparentemente inconciliabili, ma presto verificate equivalenti, in grado di dare un nuovo fondamento a questa nuova meccanica.

Da un lato, innestato sulla corrente di pensiero della scuola che si era formata a Göttingen intorno a Max Born (1882–1970), c'era il tentativo di far rientrare le condizioni di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld nell'approccio hamiltoniano della meccanica classica. Un riesame critico dei concetti della dinamica classica che venivano utilizzati nella descrizione della dinamica degli atomi portò Werner Heisenberg (1901–1976) ad associare alle variabili dinamiche classiche delle quantità rappresentate da uno schema di numeri disposti a matrice: gli elementi non diagonali di tali matrici venivano messi in corrispondenza con le probabilità di transizione da uno stato quantico atomico all'altro⁴. Immediatamente Max Born (1882–1970) comprese le proprietà matematiche del nuovo formalismo⁵ e con Ernst Pascual Jordan (1902–1980) e lo stesso Heisenberg lo sviluppò secondo quella che divenne nota come *meccanica delle matrici*⁶. Di questa si avrà in seguito la possibilità di vedere le equazioni fondamentali e di verificare la corrispondenza con la meccanica classica.

In questo capitolo si preferisce illustrare la nascita della cosiddetta *meccanica*

² È significativo che al citato lavoro di Bohr del 1923, che doveva essere il primo di una serie con lo scopo dichiarato di un'esposizione sistematica dei risultati della teoria dei quanti, non seguì mai più la seconda parte, superata, o meglio travolta, dagli eventi.

³ M. Born: *Über Quantenmechanik [Meccanica quantistica]*, Zeitschrift für Physik **26** (1924) 379–395, ricevuto dalla rivista il 13 giugno 1924.

⁴ W. Heisenberg: *Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen [Reinterpretazione di relazioni cinematiche e meccaniche secondo la teoria dei quanti]*, Zeitschrift für Physik **33** (1925) 879–893, ricevuto dalla rivista il 29 luglio 1925.

⁵ M. Born e P. Jordan: *Zur Quantenmechanik [Meccanica quantistica]*, Zeitschrift für Physik **34** (1925) 858–888, ricevuto dalla rivista il 27 settembre 1925.

⁶ M. Born, W. Heisenberg e P. Jordan: *Zur Quantenmechanik II [Meccanica quantistica II]*, Zeitschrift für Physik **35** (1926) 557–615, ricevuto dalla rivista il 16 novembre 1925.

ondulatoria, stimolata dalle idee di Louis-Victor de Broglie (1892–1987)⁷. L'analisi dell'analogia esistente tra la descrizione classica del moto di una particella e il punto di vista dell'ottica geometrica, basata sul cammino percorso da un raggio di luce, era già stata affrontata esattamente un secolo prima da Hamilton⁸. Nel cercare una formulazione meccanica dell'ottica, Hamilton però finì poi per approfondire la meccanica analitica e trattare l'ottica come ottica geometrica. La stessa analisi ispira invece a de Broglie l'ipotesi che una particella in moto sia sempre accompagnata da un'onda: la traiettoria percorsa dalla particella si mantiene sempre ortogonale al fronte dell'onda associata, così come il raggio di luce risulta sempre perpendicolare al fronte dell'onda luminosa.

L'idea, ulteriormente sviluppata, può portare in modo euristico a scrivere un'equazione d'onda che Erwin Schrödinger (1887–1961) propose e applicò in una serie di quattro lavori nei primi mesi del 1926⁹.

In questo capitolo, dopo avere esaminato le analogie formali esistenti tra l'ottica geometrica e la dinamica di una particella, vengono ricordati gli argomenti di de Broglie a supporto dell'ipotesi che un'onda sia associata alla particella. Viene poi derivata l'equazione di Schrödinger a partire dall'equazione delle onde di d'Alembert, secondo un metodo utilizzato da Wolfgang Pauli (1900-1958) nelle sue lezioni al Politecnico di Zurigo nell'anno accademico 1956–1957¹⁰. Lo scopo del capitolo è perciò quello di un'introduzione all'equazione di Schrödinger con motivazioni rese plausibili da uno sviluppo storico. Come tali, queste motivazioni possono lasciare perplessi e, soprattutto, possono poi rivelarsi in contrasto con l'uso del formalismo basato sull'equazione di Schrödinger per descrivere i fenomeni quantistici. Tuttavia, il percorso verso l'equazione di Schrödinger è un'istruttiva testimonianza del faticoso

⁷ L. de Broglie: *Recherches sur la théorie des quanta [Ricerche sulla teoria dei quanti]*, *Annales de Physique* **3** (1925) 22–128.

È il testo della tesi di dottorato, discussa il 25 novembre 1924, in cui sono raccolte le idee già espresse in alcune pubblicazioni precedenti: *Ondes et quanta [Onde e quanti]*, *Comptes Rendus de l'Académie des Sciences* **177** (1923) 507–510; *Quanta de lumière, diffraction et interférences [Quanti di luce, diffrazione e interferenza]*, *ibid.* **177** (1923) 548–550; *Les quanta, la théorie cinétique des gaz et le principe de Fermat [I quanti, la teoria cinetica dei gas e il principio di Fermat]*, *ibid.* **177** (1923) 630–632.

⁸ Cfr. n. 5 p. 2.

⁹ E. Schrödinger:

Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (prima comunicazione)], *Annalen der Physik* **79** (1926) 361–376, ricevuto dalla rivista il 27 gennaio 1926; *Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (seconda comunicazione)]*, *Annalen der Physik* **79** (1926) 489–527, ricevuto dalla rivista il 23 febbraio 1926;

Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (terza comunicazione)], *Annalen der Physik* **80** (1926) 437–490, ricevuto dalla rivista il 10 maggio 1926; *Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (quarta comunicazione)]*, *Annalen der Physik* **81** (1926) 109–139, ricevuto dalla rivista il 21 giugno 1926.

¹⁰ W. Pauli: *Vorlesungen von Prof. Dr. W. Pauli über Wellenmechanik ausgearbeitet von Fritz Herlach und Heinz E. Knoepfel*, Verlag des Vereins der Mathematiker und Physiker an der Eidgenössischen Technischen Hochschule, Zurigo, 1959; trad. it. di Paolo Gulmanelli: *Meccanica ondulatoria*, Boringhieri, Torino, 1962.

lavoro richiesto a chi si trova di fronte a una classe di problemi del tutto nuovi e dagli sviluppi imprevedibili.

La duplice natura ondulatoria e corpuscolare per de Broglie è reale e non solo un modo di presentarsi dei fenomeni: un'onda reale accompagna davvero il moto della particella e, per così dire, la guida. A queste conclusioni de Broglie arriva esasperando il limite classico dell'equazione di Schrödinger, nel tentativo di salvaguardare il determinismo delle leggi fisiche accanto a un'interpretazione statistica emergente. L'idea di de Broglie fu stroncata sul nascere, principalmente per le critiche di Pauli, al Quinto Congresso Solvay, tenutosi a Bruxelles dal 24 al 29 ottobre 1927, nel quale fu invece sancita l'interpretazione probabilistica delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger¹¹. Inoltre, ogni dubbio che questa interpretazione nascondesse un'eventuale incompletezza della teoria venne fugato da Johannes (John) von Neumann (1903–1957). Questi, nel suo libro del 1932¹², si era posto il problema se la meccanica quantistica fosse una teoria completa o se non piuttosto un livello intermedio di descrizione dei fenomeni fisici, che in realtà sono caratterizzati da parametri che evolvono in modo deterministico, ma che sono a un livello più profondo di osservazione e che quindi in meccanica quantistica rimangono nascosti. La possibilità di introdurre *variabili nascoste* per completare la teoria eliminerebbe così dalla teoria stessa gli aspetti probabilistici, recuperando la stretta causalità della descrizione classica. Ma von Neumann dimostra un teorema grazie al quale la formalizzazione di questa ipotesi risulta in contrasto con gli altri assiomi della meccanica quantistica.

In realtà von Neumann avrebbe dovuto concludere che veniva escluso solo quel suo tipo di variabili nascoste, non per questo risultando impossibile qualche altro tipo di completamento della meccanica quantistica. L'idea dell'esistenza di variabili nascoste fu ripresa infatti nel 1951 da David Joseph Bohm (1917–1992), il quale, pur ammettendo che la tradizionale interpretazione della meccanica quantistica sia coerente, non voleva escludere la possibilità di altre interpretazioni ugualmente coerenti, in grado di recuperare in linea di principio una descrizione causale di tutti i processi¹³. Tuttavia, per ammissione dello stesso Bohm, non risulta ancora possibile trovare esperimenti in grado di discriminare tra la consueta interpretazione della meccanica quantistica e la sua teoria a variabili nascoste¹⁴.

¹¹ Per un resoconto sui Congressi Solvay, cfr. Jagdish Mehra: *The Solvay Conferences on Physics. Aspects of the development of physics since 1911*, D. Reidel Publ. Co., Dordrecht (Olanda), 1975.

¹² J. von Neumann: *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, J. Springer, Berlino, 1932, § IV.2, pp. 167–173; trad. inglese: *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1955, § IV.2, pp. 313–328.

¹³ D. Bohm: *A Suggested Interpretation of the Quantum Theory in Terms of "Hidden" Variables. I & II [Suggerimento di una interpretazione della teoria quantistica in termini di variabili "nascoste". I & II]*, *Physical Review* **85** (1952) 166–179, 180–193.

¹⁴ Per una rassegna delle teorie a variabili nascoste e un esame critico della loro classificazione, si veda il testo di Frederik Jozef Belinfante: *A Survey of Hidden-Variables Theories*, Pergamon Press, Oxford, 1973.

Secondo la classificazione di Belinfante, quella di von Neumann rientra nelle teorie a variabili nascoste di

Il problema delle variabili nascoste ha trovato infine soluzione nelle disuguaglianze proposte nel 1964 da John Stewart Bell (1928–1990)¹⁵. Per sistemi compositi, le cui parti siano state in interazione nel passato, la meccanica quantistica prevede che una misura fatta su una parte fornisca informazioni anche sull'altra, quando entrambe queste parti siano spazialmente ben separate e non più interagenti. Questa correlazione, di tipo quantistico, può divenire paradossale se si vogliono attribuire proprietà oggettive al particolare sistema fisico¹⁶. Il teorema di Bell pone un limite alla possibilità di correlare eventi distanti spazialmente, mentre la meccanica quantistica prevede al contrario che questo limite si possa superare in certe circostanze. Il teorema di Bell dunque si presta a possibile verifica sperimentale, ma i complessi e raffinati esperimenti finora ultimati hanno sempre dato risultati in contrasto con le disuguaglianze di Bell e in accordo invece con l'interpretazione tradizionale della meccanica quantistica¹⁷.

È ben vero che lo stesso sistema può presentare aspetti corpuscolari, come un elettrone colpito dal fotone nell'effetto Compton, e aspetti ondulatori, come nel passaggio di elettroni attraverso una fenditura. Ma, come spiega Bohr, vale un principio di complementarità che governerebbe i fenomeni fisici: a seconda della variabile dinamica in esame e del tipo di osservazione cui viene sottoposto il sistema si mettono in evidenza aspetti diversi e complementari¹⁸.

tipo "zero", cioè quelle teorie che risultano impossibili alla luce dei loro postulati. Le teorie di de Broglie e di Bohm sono invece teorie di "primo tipo", impossibili da falsificare sperimentalmente in un confronto con la meccanica quantistica, perché forniscono identiche previsioni. Queste teorie nascono dall'esigenza di salvaguardare il determinismo, senza contraddire i successi della meccanica quantistica.

¹⁵ J.S. Bell: *On the Einstein Podolsky Rosen Paradox [Il paradosso di Einstein Podolsky Rosen]*, *Physics* **1** (1964) 195–200.

¹⁶ Albert Einstein, Boris Podolsky e Nathan Rosen: *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete? [Può considerarsi completa la descrizione della realtà fisica fatta dalla meccanica quantistica?]*, *Physical Review* **47** (1935) 777–780.

¹⁷ Per una rassegna del panorama sperimentale fino al 1978, si veda l'articolo di John F. Clauser e Abner Shimony: *Bell's theorem: experimental tests and implications [Il teorema di Bell: verifiche sperimentali e loro implicazioni]*, *Reports on Progress in Physics* **41** (1978) 1881–1927. Una recente rassegna sperimentale di carattere divulgativo si trova nell'articolo di Abner Shimony: *La realtà del mondo dei quanti*, *Le Scienze* **40**, n. 235 (1988) pp. 38–45. Si veda inoltre di Oreste Nicosini: *Il paradosso EPR e il teorema di Bell*, *Quaderni di Fisica Teorica*, Università di Pavia, 1991.

I risultati più recenti e più probanti di questa indagine sperimentale sono dei gruppi di Aspect e di Kwiat. Alain Aspect, Jean Dalibard e Gérard Roger: *Experimental Tests of Realistic Local Theories via Bell's Theorem [Verifiche sperimentali delle teorie realistiche locali per mezzo del teorema di Bell]*, *Physical Review* **47** (1981) 460–463; *Experimental Realization of Einstein-Podolsky-Rosen Gedankenexperiment: A New Violation of Bell's Inequalities [Realizzazione sperimentale dell'esperimento ideale di Einstein-Podolsky-Rosen: una nuova violazione delle disuguaglianze di Bell]*, *Physical Review* **49** (1982) 91–94; *Experimental Test of Bell's Inequalities Using Time-Varying Analyzers [Verifica sperimentale delle disuguaglianze di Bell utilizzando analizzatori a tempo variabile]*, *Physical Review* **49** (1982) 1804–1807. P.G. Kwiat, A.M. Steinberg e R.Y. Chiao: *High-visibility interference in a Bell-inequality experiment for energy and time [Interferenza ad alta visibilità in un esperimento sulla disuguaglianza di Bell per energia e tempo]*, *Physical Review* **A47** (1993) R2472–R2475.

¹⁸ N. Bohr: *The quantum postulate and the recent development of atomic theory [Il postulato quantistico e il recente sviluppo della teoria atomica]*, *Atti del Congresso Internazionale dei Fisici (Zanichelli, Bologna, 1928)*, pp. 565–588 [traduzione italiana nel libro di S. Boffi: *Il postulato dei quanti e il significato della*

L'interpretazione delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger, che neppure lo stesso Schrödinger aveva colto, è di tipo probabilistico: la funzione d'onda che risolve l'equazione di Schrödinger è solo un ausilio matematico per calcolare dei valori medi di quantità fisiche, valori che ci si aspetta come il risultato più probabile di una misurazione. In questo senso è importante il teorema di Ehrenfest¹⁹: esso garantisce che la teoria possa essere messa in relazione col caso classico solo quando ci si limiti a considerare valori di aspettazione.

III.1. Ottica geometrica e dinamica di una particella

Nel vuoto la propagazione di luce monocromatica di frequenza ν nella direzione individuata dal vettore \mathbf{k} , detto *vettore d'onda*, è descritta mediante una funzione d'onda del tipo

$$\Phi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)}, \quad (1.1)$$

dove $\omega = 2\pi\nu$ e $|A|^2$ determina l'intensità dell'onda. Fisicamente, la funzione Φ può essere identificata, per esempio, con una delle componenti del vettore campo elettrico \mathbf{E} associato alla propagazione della luce, così come viene determinato dalle equazioni di Maxwell (I.3.16) in assenza di correnti di conduzione e di cariche elettriche.

L'onda (1.1) è detta *onda piana*, perché il luogo dei punti investiti all'istante t dalla perturbazione ondulatoria è un piano ortogonale al vettore \mathbf{k} . Tale piano, individuato dalla condizione

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \text{costante}, \quad (1.2)$$

rappresenta il *fronte d'onda*: i suoi punti vibrano con la stessa *fase* $\phi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t$. Col tempo esso si sposta avanzando nello spazio nella direzione di \mathbf{k} ; il suo moto è descritto dalla condizione

funzione d'onda, Bibliopolis, Napoli, 1996].

Si tratta dell'intervento fatto da Bohr a Como il 16 settembre 1927, in occasione del convegno celebrativo del primo centenario della morte di Alessandro Volta (1745–1827). In questo convegno e nel Quinto Congresso Solvay, che si tenne a Bruxelles il mese successivo, venne sancita quella che va sotto il nome di interpretazione di Copenhagen, dal nome della città dove venne elaborata la corretta interpretazione statistica della meccanica quantistica dai fisici che si riunivano intorno a Bohr. Va osservato però che l'interpretazione statistica fu proposta per la prima volta a Göttingen da Max Born nello studio quantistico dei processi d'urto.

M. Born: *Zur Quantenmechanik der Stossvorgänge (Vorläufige Mitteilung) [Meccanica quantistica dei processi d'urto (Comunicazione preliminare)]*, *Zeitschrift für Physik* **36** (1926) 863–867; *Quantenmechanik der Stossvorgänge [Meccanica quantistica dei processi d'urto]*, *Zeitschrift für Physik* **38** (1926) 803–827.

I due testi di Born sono tradotti in italiano e commentati nel quaderno di S. Boffi: *L'interpretazione statistica della meccanica quantistica*, Quaderni di Fisica Teorica, Università di Pavia, 1992.

¹⁹ P. Ehrenfest: *Bemerkung über die angenäherte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik [Un'osservazione sulla validità approssimata della meccanica classica all'interno della meccanica quantistica]*, *Zeitschrift für Physik* **45** (1927) 455–457.

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t = \text{costante}. \quad (1.3)$$

I punti \mathbf{r} , in concordanza di fase lungo la direzione di \mathbf{k} , sono spazati di $\lambda = 2\pi/k$, dove λ è la *lunghezza d'onda* della radiazione luminosa; essi sono raggiunti successivamente dal fronte d'onda a intervalli temporali pari a $\tau = 1/\nu$, per cui il fronte avanza con velocità $v_f = \lambda\nu = \omega/k$, detta *velocità di fase*. Per la luce nel vuoto la velocità di fase è uguale per tutte le frequenze e coincide con la sua velocità di propagazione c .

In un mezzo omogeneo e isotropo, la velocità di fase v_f dipende dalla frequenza ed è inferiore a c : $v_f = c/n$, dove $n = n(\nu)$ (> 1) è l'*indice di rifrazione* del mezzo. Di conseguenza si riduce anche la lunghezza d'onda, ma l'onda rimane un'onda piana nel suo propagarsi. Se il mezzo non è omogeneo, l'indice di rifrazione (oltre a dipendere dalla frequenza) varia da punto a punto influenzando la dipendenza da \mathbf{r} della fase $\phi(\mathbf{r}, t) = \phi_0(\mathbf{r}) - \omega t$. Perciò anche il fronte d'onda non è più un piano, ma è individuato dalla condizione

$$\phi_0(\mathbf{r}) = \text{costante} \quad (1.4)$$

e il suo avanzamento nello spazio è regolato dalla condizione di fase costante:

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi_0(\mathbf{r}) - \omega t = \text{costante}. \quad (1.5)$$

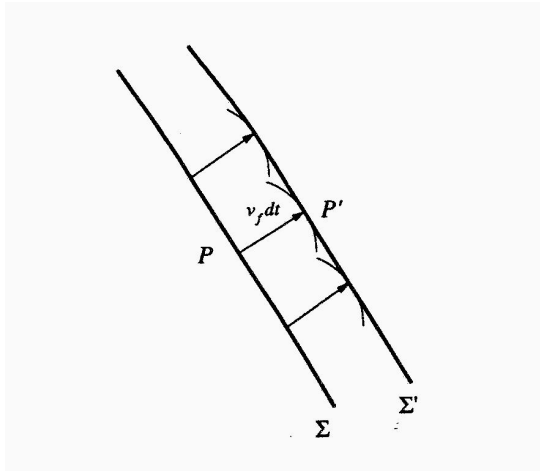


Fig. 1.1. Il fronte d'onda Σ' come involuipo delle onde sferiche emesse dai punti di Σ , secondo il principio di Huyghens.

Da un punto di vista geometrico, l'avanzamento del fronte d'onda può essere ricostruito ricorrendo al *principio di Huyghens*²⁰, in base al quale ogni punto del

²⁰ Ch. Huyghens, *loc. cit.* (n. 15 p. 3).

fronte d'onda Σ diventa a sua volta sorgente di luce per il mezzo circostante, emettendo onde in tutte le direzioni, che si propagano con velocità $v_f = c/n$ (fig. 1.1). Dopo un tempo dt , a partire dal fronte d'onda Σ si può costruire un fronte d'onda Σ' , ottenuto come involuppo di tutte le superfici sferiche di raggio $v_f dt$, centrate nei vari punti di Σ . Il raggio luminoso, che è partito dal punto P su Σ , ha raggiunto il punto P' su Σ' muovendosi in direzione perpendicolare al fronte d'onda Σ . Perciò il vettore d'onda locale risulta

$$\mathbf{k} = \nabla \phi_0. \quad (1.6)$$

Per individuare il cammino percorso da un raggio di luce monocromatica per andare dal punto P_0 al generico punto P , durante l'intervallo di tempo finito T , conviene considerare un sistema di fronti d'onda generati dalla superficie Σ_0 cui appartiene P_0 (fig. 1.2). Il tempo necessario al raggio di luce per andare da P_0 a P è dato da

$$T = \int_{P_0}^P \frac{ds}{v_f} = \frac{1}{c} \int_{P_0}^P n ds \equiv \frac{1}{c} L, \quad (1.7)$$

dove L è la lunghezza del *cammino ottico* percorso dal raggio di luce da P_0 a P .

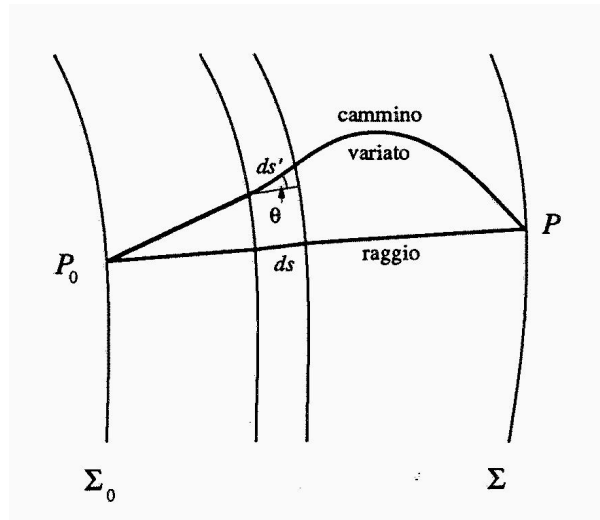


Fig. 1.2. Il principio di Fermat per la determinazione del cammino percorso dal raggio di luce.

Nel vuoto il raggio di luce si propaga in linea retta perpendicolarmente al piano del fronte d'onda e il cammino ottico è un segmento di retta disposto lungo la direzione (costante) di \mathbf{k} . In un mezzo rifrangente la propagazione avviene lungo una traiettoria incurvata. Ma se, in accordo con la (1.6), la propagazione viene descritta secondo traiettorie sempre perpendicolari al fronte d'onda, nella (1.7) il

contributo del cammino ottico elementare $n ds$ va preso sempre nella direzione del vettore \mathbf{k} , cioè perpendicolarmente al fronte d'onda. Dato che ogni altro contributo $n ds' = n ds / \cos \theta$ risulta non inferiore a $n ds$ ($|\cos \theta| \leq 1$), nella (1.7) l'intervallo di tempo T risulta minimo lungo la traiettoria effettivamente descritta dal raggio di luce. È questo il risultato del *principio di Fermat*²¹, che in termini variazionali si traduce nella condizione di stazionarietà del cammino ottico percorso dal raggio luminoso dal punto sorgente 1 al punto d'arrivo 2:

$$\delta L = \delta \int_1^2 n ds = 0. \quad (1.8)$$

Ne consegue che il gradiente del cammino ottico, ∇L , diretto come \mathbf{k} , ha componenti pari ai coseni direttori di \mathbf{k} moltiplicati per n e quindi

$$(\nabla L)^2 = n^2. \quad (1.9)$$

Questa equazione, detta equazione dell'*iconale*²², individua i possibili cammini ottici di un sistema di raggi di luce in un mezzo di indice di rifrazione n .

È in accordo col principio di Fermat che in un mezzo omogeneo e isotropo la luce si propaga in linea retta e quindi, se incontra superfici riflettenti, viene riflessa secondo la legge di Cartesio che impone l'uguaglianza tra angolo di incidenza e angolo di riflessione. Similmente, il principio di Fermat conferma la legge della rifrazione,

$$\frac{\sin i}{\sin r} = \frac{n_2}{n_1} \equiv n_{21}, \quad (1.10)$$

che regola il passaggio dal mezzo ottico 1 al mezzo ottico 2 determinando l'angolo di rifrazione r a partire dall'angolo di incidenza i mediante l'indice di rifrazione relativo n_{21} .

In generale, in un mezzo ottico rifrangente, anche l'ampiezza A dell'onda viene a dipendere dalla posizione. La propagazione dell'onda è, come sempre, governata dall'equazione di d'Alembert:

$$\nabla^2 \Phi - \frac{1}{v_f^2} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial t^2} = 0, \quad (1.11)$$

in cui interviene la velocità di fase v_f dell'onda monocromatica Φ . Si possono cercare soluzioni della (1.11) nella forma:

²¹ Pierre de Fermat (1601–1665) intuì il suo principio nel 1662 nel riderivare le leggi della rifrazione.

²² Il nome *iconale*, dal greco $\epsilon\iota\kappa\omega\nu$ = *immagine*, è stato coniato da Heinrich Bruns (1848–1919) nello stabilire i criteri generali per la formazione delle immagini nei sistemi ottici nell'ambito dell'ottica geometrica.

H. Bruns: *Das Eikonal*, Abhandlungen der math.-phys. Classe der Kgl. Sächsischen Gesellschaft der Wissenschaften (Lipsia) **35** (1895) 325–435.

Verso l'equazione di Schrödinger

$$\Phi = A(\mathbf{r})e^{i[\phi_0(\mathbf{r})-\omega t]}, \quad (1.12)$$

con $A(\mathbf{r})$ e $\phi_0(\mathbf{r})$ funzioni reali della posizione \mathbf{r} . Sostituendo la (1.12) nella (1.11) e separando la parte reale da quella immaginaria, si ottengono le due seguenti equazioni:

$$\nabla^2 A - A(\nabla\phi_0)^2 + \frac{\omega^2}{v_f^2} A = 0, \quad (1.13)$$

$$2\nabla A \cdot \nabla\phi_0 + A\nabla^2\phi_0 = 0. \quad (1.14)$$

La quantità $\omega^2/v_f^2 \equiv n^2 k_0^2 = n^2 4\pi^2/\lambda_0^2$ è legata alla lunghezza d'onda λ_0 che la radiazione avrebbe nel vuoto. La (1.13) può risciversi allora nella forma:

$$\frac{1}{k_0^2} \frac{\nabla^2 A}{A} - \left[\frac{1}{k_0^2} (\nabla\phi_0)^2 - n^2 \right] = 0. \quad (1.15)$$

Nell'ipotesi che λ_0 sia piccola rispetto alla distanza su cui l'indice di rifrazione subisce sensibili variazioni, si può trascurare il primo termine nella (1.15); si ottiene così l'equazione

$$\frac{1}{k_0^2} (\nabla\phi_0)^2 = n^2, \quad (1.16)$$

che equivale all'equazione dell'iconale (1.9) in quanto permette di tracciare il cammino ottico, tangente a $\nabla\phi_0$, una volta noto l'indice di rifrazione n . L'equazione dell'iconale, caratteristica dell'ottica geometrica, è quindi il risultato della descrizione ondulatoria nel limite di piccole lunghezze d'onda.

Nota la fase ϕ_0 , la (1.14) serve poi a determinare l'ampiezza A dell'onda e quindi l'intensità della luce.

Quando la perturbazione ondulatoria che si propaga nello spazio non proviene dal moto di una singola onda monocromatica, ma è il risultato di un gruppo di onde, ciascuna con la sua frequenza ν e il suo vettore d'onda \mathbf{k} , la descrizione diventa più complicata. Ancora si può dire che ogni onda soddisfa un'equazione di d'Alembert, che ne regola il moto di propagazione con la corrispondente velocità di fase $v_f = \lambda\nu = \omega/k$. Se si tratta di onde, tutte con la stessa velocità di fase v_f , come succede per le onde luminose nel vuoto, allora anche l'intera perturbazione ondulatoria è descritta da una funzione che soddisfa la stessa equazione di d'Alembert e si propaga con la stessa velocità v_f . In generale però il mezzo diversifica le velocità di fase delle varie onde, alterando quindi nel tempo la forma della perturbazione risultante dalla sovrapposizione del moto delle varie onde che si propagano ciascuna con la sua velocità di fase. Nel suo complesso, come si è visto nell'Esempio I.3.2, il moto della perturbazione può essere caratterizzato assegnando la velocità baricentrale del gruppo di onde: tale velocità, detta *velocità di gruppo*, risulta pari a

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (1.17)$$

ed è la velocità dell'onda con frequenza centrale rispetto a quelle dell'intero gruppo di onde.

Da un punto di vista classico, la descrizione del moto di una particella e della propagazione di una perturbazione ondulatoria sono molto diverse tra di loro. Tuttavia esistono alcune analogie già rilevate da Hamilton ²³.

Il moto di una particella di massa m_0 e velocità \mathbf{v} è descritto in termini classici assegnandone ad ogni istante posizione \mathbf{r} e impulso $\mathbf{p} = m_0\mathbf{v}$: conoscendo la posizione raggiunta a un certo istante, la direzione di \mathbf{p} permette di prevedere in quale direzione la particella si muoverà nell'istante successivo; il modulo di \mathbf{p} ne determina la rapidità con cui percorrerà il successivo tratto di cammino. In questo modo è possibile seguire lo sviluppo della *traiettoria* descritta dalla particella. Il problema del moto è quindi ricondotto alla determinazione dell'impulso \mathbf{p} istante per istante, nei punti che si trovano lungo la linea che costituisce la traiettoria effettivamente percorsa dalla particella.

Per una particella libera, nella meccanica classica non relativistica, l'impulso è legato alla sua energia costante E dalla relazione

$$\frac{p^2}{2m_0} = E. \quad (1.18)$$

Mediante la definizione della funzione

$$S(\mathbf{r}, t) = \mathbf{p} \cdot \mathbf{r} - Et, \quad (1.19)$$

che ha le dimensioni di un'azione, la (1.18) può essere riscritta nella forma dell'equazione di Hamilton–Jacobi per la particella libera:

$$\frac{1}{2m_0}(\nabla S)^2 + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.20)$$

La condizione

$$S(\mathbf{r}, t) = \text{costante}, \quad (1.21)$$

similmente alla (1.3), definisce un piano che avanza nella direzione di \mathbf{p} a lui perpendicolare,

$$\mathbf{p} = \nabla S, \quad (1.22)$$

²³ Cfr. n. 5 p. 2.

con velocità di avanzamento pari a E/p . Il moto della particella avviene lungo la retta, individuata dalla direzione costante di \mathbf{p} , perpendicolarmente al piano definito dalla (1.21) ²⁴.

Allora, mediante la forma esplicita (1.19) della S , l'equazione di Hamilton–Jacobi (1.20) diventa

$$(\nabla S)^2 = 2m_0 E, \quad (1.23)$$

che ha la stessa struttura dell'equazione dell'iconale (1.9): fissata l'energia E , l'equazione (1.23) permette di tracciare la traiettoria percorsa dalla particella dalla conoscenza della sua tangente $\nabla S = \mathbf{p}$ o, equivalentemente, di seguire l'avanzamento del fronte d'onda $S(\mathbf{r}, t)$ in direzione perpendicolare a \mathbf{p} .

In presenza di un campo di forze conservativo, descritto dal potenziale $V(\mathbf{r})$, ancora l'energia E è costante e la (1.18) diventa

$$\frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) = E. \quad (1.24)$$

Se si conserva anche in questo caso la definizione (1.22) ponendo

$$S(\mathbf{r}, t) = W(\mathbf{r}) - Et, \quad (1.25)$$

si può riscrivere anche la (1.24) in una forma simile alla (1.9):

$$(\nabla W)^2 = 2m_0[E - V(\mathbf{r})]. \quad (1.26)$$

Questa analogia con l'ottica geometrica è più profonda: non solo l'impulso $p = \{2m_0[E - V(\mathbf{r})]\}^{1/2}$, variabile da punto a punto per effetto del campo di forze, corrisponde all'indice di rifrazione n variabile da punto a punto, ma anche la funzione W svolge un ruolo simile a quello del cammino ottico L nell'equazione dell'iconale. Infatti la condizione

$$W(\mathbf{r}) = \text{costante}, \quad (1.27)$$

analogamente alla condizione di fase costante (1.4), definisce una superficie ad azione costante; in presenza di un potenziale $V(\mathbf{r})$, questa superficie non è più un piano e avanza nello spazio secondo la condizione

$$S(\mathbf{r}, t) = W(\mathbf{r}) - Et = \text{costante}, \quad (1.28)$$

analogamente alla (1.5). La definizione (1.22) permette dunque di considerare la traiettoria descritta dalla particella come quella linea sempre perpendicolare alla superficie ad azione costante (1.27), così come il raggio di luce viaggia perpendicolare al fronte

²⁴ Per la (1.18), la “velocità di fase” E/p del piano definito dalla (1.21) è però pari alla metà della velocità v della particella.

d'onda di fase costante. La velocità di avanzamento del *fronte d'onda della particella* è pari a

$$v_f = \frac{E}{|\nabla S|} = \frac{E}{p}. \quad (1.29)$$

Siccome l'energia rimane costante durante il moto, la velocità di fase con cui avanza il fronte d'onda della particella è *inversamente proporzionale* alla velocità della particella.

Inoltre, siccome $p ds = |\nabla S| ds = dW$, si riconosce subito che la traiettoria percorsa dalla particella a energia costante può essere determinata ricorrendo a un principio variazionale simile a quello di Fermat utilizzato nell'ottica geometrica. È questo infatti il significato del *principio di Maupertuis* che stabilisce la condizione

$$\delta \int_1^2 p ds = 0. \quad (1.30)$$

Il principio di minima azione di Maupertuis impone la stazionarietà dell'azione $W = \int_1^2 p ds$ lungo la linea, tra le infinite possibili, corrispondente alla traiettoria davvero percorsa, allo stesso modo in cui il principio di Fermat (1.8) impone la stazionarietà del cammino ottico L per il raggio di luce.

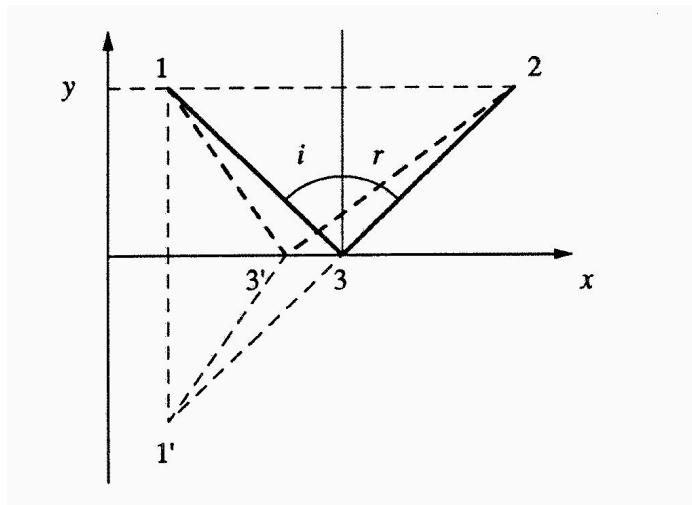


Fig. 1.3. La riflessione del raggio di luce che va dal punto 1 al punto 2 assimilata al rimbalzo di una particella nel punto 3.

Esempio 1.1

Con riferimento alla fig. 1.3, il principio di Maupertuis permette di determinare il punto 3 di rimbalzo della particella contro una parete perfettamente elastica nell'andare

dal punto 1 al punto 2 alla stessa stregua con cui il principio di Fermat rende conto della legge di Cartesio sulla riflessione.

Non essendo soggetta a forze, la particella ha un impulso p costante; dunque la (1.30) implica semplicemente che il cammino totale sia minimo. Perciò deve essere minimo

$$L \equiv L_1 + L_2 = \sqrt{y^2 + (x_3 - x_1)^2} + \sqrt{y^2 + (x_2 - x_3)^2}. \quad (1.31)$$

Ciò si realizza facendo variare x_3 in modo che sia:

$$\frac{dL}{dx_3} = \frac{x_3 - x_1}{L_1} - \frac{x_2 - x_3}{L_2} = 0. \quad (1.32)$$

Ma ciò impone proprio che l'angolo di incidenza sia uguale a quello di riflessione.

Esempio 1.2

Con riferimento alla fig. 1.4, si può studiare il percorso della particella dal punto 1, appartenente a una regione in cui la particella possiede impulso costante $p_1 = mv_1$, al punto 2 di una regione in cui la particella possiede impulso costante $p_2 = mv_2$: la scelta del punto 3 sulla superficie di separazione tra le due regioni è determinata dalla condizione di minima azione. L'azione $W = \int_1^2 p ds$ risulta somma di due contributi,

$$W \equiv p_1 L_1 + p_2 L_2 = p_1 \sqrt{y^2 + (x_3 - x_1)^2} + p_2 \sqrt{y^2 + (x_2 - x_3)^2}. \quad (1.33)$$

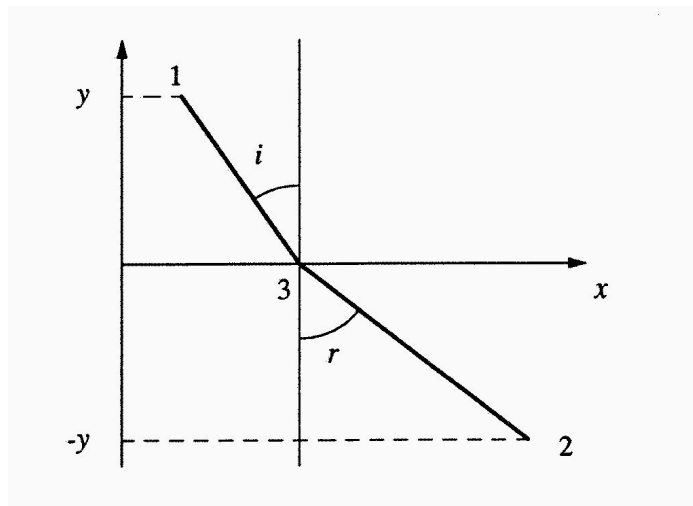


Fig. 1.4. La rifrazione del raggio di luce che va dal punto 1 al punto 2 assimilata alla traiettoria di una particella che passa per il punto 3.

L'ipotesi di de Broglie

Per il principio di Maupertuis deve essere

$$\frac{dW}{dx_3} = p_1 \frac{x_3 - x_1}{L_1} - p_2 \frac{x_2 - x_3}{L_2} = 0. \quad (1.34)$$

Perciò

$$p_1 \sin i = p_2 \sin r,$$

cioè

$$\frac{\sin i}{\sin r} = \frac{p_2}{p_1}. \quad (1.35)$$

La (1.35) è formalmente identica alla legge di Cartesio (1.10) se si identifica la variazione di indice di rifrazione nel passaggio dal mezzo ottico 1 al mezzo ottico 2 con la variazione di impulso subita dalla particella ²⁵.

III.2. L'ipotesi di de Broglie

Uno dei risultati della teoria dei quanti di luce, che permette di spiegare l'effetto fotoelettrico e la radiazione di corpo nero, è che la radiazione di frequenza ν viene emessa e assorbita per quanti di energia pari a $h\nu$, dove h è la costante di Planck. Alla radiazione, usualmente descritta come un'onda elettromagnetica, viene attribuito un comportamento corpuscolare in termini di quanti di energia che possiedono un impulso di modulo $p = h\nu/c = h/\lambda$ e direzione concorde con quella di propagazione del raggio di luce. Le analogie tra ottica geometrica e meccanica del punto materiale possono viceversa suggerire la possibilità di associare un comportamento ondulatorio a quelle che la meccanica classica considera particelle.

Esempio 2.1

Con de Broglie ²⁶ si può immaginare che i quanti di luce siano particelle dotate di una massa a riposo m_0 molto piccola, ma comunque diversa da zero, e che si muovano ad una velocità di modulo v molto prossimo a c ; la frequenza ν associata al quanto di luce sia inoltre la frequenza di un moto periodico interno alla particella. Se allora si identifica $h\nu$ con l'energia relativistica di tali particelle, per l'osservatore fermo si ottiene

$$h\nu = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \beta^2}}, \quad (2.1)$$

²⁵ Si faccia attenzione al fatto che per la particella è $p_2/p_1 = v_2/v_1$, mentre per la velocità di fase dell'onda è $n_2/n_1 = v_{f_1}/v_{f_2}$!

²⁶ L. de Broglie: *A Tentative Theory of Light Quanta [Proposta di una teoria dei quanti di luce]*, *Philosophical Magazine* **47** (1924) 446–458. Traduzione italiana nel libro di L. de Broglie, E. Schrödinger, W. Heisenberg: *Onde e particelle in armonia. Alle sorgenti della meccanica quantistica*, introduzione e cura di S. Boffi, Jaca Book, Milano, 1991.

mentre, per un osservatore rispetto al quale il quanto di luce appare in quiete, si deve porre

$$h\nu_0 = m_0c^2. \quad (2.2)$$

La frequenza ν osservata nel laboratorio risulta quindi legata alla frequenza ν_0 , vista dall'osservatore che si muove col quanto di luce, dalla relazione

$$\nu = \frac{\nu_0}{\sqrt{1 - \beta^2}}. \quad (2.3)$$

La (2.3) contiene il fattore $\sqrt{1 - \beta^2}$ in modo diverso da quanto ci si aspetterebbe dalla regola di trasformazione relativistica delle frequenze: per la (II.1.10) l'osservatore nel laboratorio dovrebbe piuttosto misurare una frequenza ν_1 pari a

$$\nu_1 = \nu_0 \sqrt{1 - \beta^2}. \quad (2.4)$$

Nella sua tesi ²⁷ de Broglie risolve l'enigma ricorrendo alla dimostrazione di un teorema, che chiama il teorema dell'*armonia di fase*. Egli suppone che il quanto di luce, pensato finora come una particella, oltre a possedere un moto periodico interno di frequenza ν_0 , sia accompagnato nel suo moto da un'onda, la cui frequenza nel laboratorio abbia il valore ν . La velocità di fase di quest'onda va calcolata secondo le analogie tra ottica geometrica e meccanica messe in luce nel paragrafo precedente, eq. (1.29); siccome però la particella si muove a velocità molto prossima a quella della luce, si deve ricorrere alla formula relativistica (II.1.31) per l'energia,

$$E^2 = c^2(p^2 + m_0^2c^2). \quad (2.5)$$

Si ha dunque

$$v_f = \frac{E}{p} = c\sqrt{1 + \frac{m_0^2c^2}{p^2}}. \quad (2.6)$$

D'altra parte (cfr. eq. (II.1.27)), $p = \gamma m_0 v$ e quindi

$$v_f = \frac{c}{\beta} = \frac{c^2}{v} > c, \quad (2.7)$$

dove $\beta = v/c$.

Il teorema dell'*armonia di fase* afferma che se inizialmente il fenomeno interno ondulatorio e l'onda che accompagna la particella hanno la stessa fase, questa armonia di fase perdurerà durante tutto il moto.

Infatti, si suppongano coincidenti e, per semplicità nulle, le fasi iniziali del fenomeno interno e dell'onda che accompagna la particella. All'istante t la particella ha percorso la distanza $x = vt$ dall'origine del sistema di riferimento O nel laboratorio. Il suo fenomeno interno è allora proporzionale a

²⁷ Cfr. n. 7 p. 107.

L'ipotesi di de Broglie

$$\sin 2\pi\nu_1 t = \sin 2\pi\nu_1 \frac{x}{v};$$

nello stesso posto l'onda è descritta da

$$\sin 2\pi\nu \left(t - \frac{\beta}{c} x \right) = \sin 2\pi\nu \left(\frac{x}{v} - \frac{\beta}{c} x \right) = \sin 2\pi\nu \frac{x}{v} (1 - \beta^2).$$

D'altra parte, dalle (2.3) e (2.4) segue

$$\nu_1 = \nu(1 - \beta^2)$$

e quindi anche all'istante t si verifica l'armonia di fase.

Grazie a questo teorema, per de Broglie il moto della particella è inscindibilmente collegato con un moto di propagazione ondulatoria: il principio di Fermat dell'ottica geometrica determina il raggio dell'onda di fase, così come il principio di minima azione di Maupertuis della meccanica analitica individua la traiettoria effettivamente descritta dalla particella a energia costante.

Dall'analogia tra principio di Fermat e principio di minima azione di Maupertuis ne discendono secondo de Broglie altre due. Innanzi tutto esiste un'analogia tra la variazione di lunghezza d'onda λ dovuta alla variazione della velocità di fase v_f dell'onda in un mezzo e la variazione di impulso \mathbf{p} di una particella che attraversa un campo di forze. Nel primo caso v_f cambia con l'indice di rifrazione $n(\omega)$ del mezzo seguendo una legge di dispersione del tipo

$$v_f = \frac{c}{n(\omega)}. \quad (2.8)$$

Nel caso di una particella, la variazione di impulso è provocata dal gradiente del potenziale:

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = -\nabla V. \quad (2.9)$$

Una seconda analogia consiste nella possibilità di prevedere il cammino percorso dal raggio luminoso e dalla particella mediante un principio variazionale, in cui l'inverso della lunghezza d'onda e l'impulso giocano lo stesso ruolo. In ottica, il cammino percorso dal raggio luminoso, attraversando un mezzo ottico con indice di rifrazione $n(\omega)$ variabile, può essere stabilito in base al principio di Fermat (1.8). Tale principio può essere interpretato nel senso di imporre la stazionarietà del tempo di percorrenza T del cammino ottico:

$$\begin{aligned} \delta T &= \delta \int_1^2 ds \frac{n(\omega)}{c} \\ &= \frac{1}{\nu} \delta \int_1^2 ds \frac{1}{\lambda} = 0. \end{aligned} \quad (2.10)$$

A parte il fattore costante $1/\nu$, caratteristico per l'onda in esame, la (2.10) dice che il cammino percorso dall'onda in unità di lunghezza d'onda (variabile durante la propagazione dell'onda) deve essere stazionario. In meccanica, la traiettoria realmente percorsa da una particella è determinata dal principio di minima azione di Maupertuis (1.30), in cui l'impulso p sostituisce $1/\lambda$ nella (2.10).

Infine, l'identificazione della velocità di fase dell'onda di fase, ω/k , con la velocità di fase dell'onda di una particella, E/p , secondo la (2.6) stabilisce una proporzionalità tra l'energia E e la frequenza $\nu = \omega/2\pi$ e tra l'impulso p e il numero d'onda k . Il fattore di proporzionalità deve essere lo stesso che esiste tra l'azione W della particella e la fase ϕ dell'onda, cioè deve avere le dimensioni di un'azione. Tale fattore, indicato con l'*acca tagliata*, \hbar , è la costante di Planck h , divisa per 2π :

$$\hbar \equiv \frac{h}{2\pi} = 1.054\,572\,66(63) \times 10^{-34} \text{ J s.} \quad (2.11)$$

Perciò si ha:

$$E = \hbar\omega, \quad p = \hbar k, \quad (2.12)$$

cioè

$$E = h\nu, \quad p = \frac{h}{\lambda}, \quad (2.13)$$

in accordo con le ipotesi di Planck-Einstein sui quanti di luce, verificate per esempio nell'effetto Compton.

De Broglie dimostra inoltre che l'equivalenza tra principio di Fermat e principio di Maupertuis vale anche nel caso di una dinamica relativistica. Infatti, nella descrizione relativistica di una particella, interviene il tetravettore energia-impulso $p^\mu \equiv (p_x, p_y, p_z, iE/c)$, che si trasforma per trasformazioni di Lorentz come il tetravettore di componenti (x, y, z, ict) . Per la (2.13), al tetravettore p^μ corrisponde nella descrizione ondulatoria il tetravettore k^μ : la sua componente temporale è pari a $i h\nu/c$ e le sue componenti spaziali sono le componenti di un vettore \mathbf{k} diretto come la direzione di propagazione dell'onda e di modulo h/λ :

$$p^\mu \equiv (\mathbf{p}, iE/c) = \hbar k^\mu \equiv (\mathbf{k}, i\omega/c). \quad (2.14)$$

L'analisi di tutte queste analogie permette a de Broglie di applicare la (2.13) non solo ai quanti di luce, ma anche agli elettroni, che fino ad allora erano considerati solo delle particelle: anche una particella di impulso p ed energia E si muove in armonia di fase con un'onda di lunghezza $\lambda = h/p$ e frequenza $\nu = E/h$.

A questo punto, l'idea di de Broglie fu quella di estendere l'analogia, associando a una particella un'onda di pulsazione ω e vettore d'onda \mathbf{k} :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)}. \quad (2.15)$$

La velocità di fase di questa onda risulterebbe espressa dal rapporto tra l'energia E e il modulo dell'impulso p della particella,

$$v_f = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p}. \quad (2.16)$$

L'analogia tra comportamento ondulatorio e dinamica di una particella impone dunque, anche per la particella,

$$p = \frac{h}{\lambda}, \quad (2.17)$$

dove λ viene detta *lunghezza d'onda di de Broglie* della particella.

È immediato riconoscere che se si impone la (2.17) nella condizione di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld (II.5.1), si ottiene una condizione di sintonizzazione tra la lunghezza della traiettoria chiusa percorsa dall'elettrone nel suo moto periodico all'interno dell'atomo e la lunghezza d'onda dell'onda associata all'elettrone stesso: la lunghezza della traiettoria chiusa (*orbita*) deve essere un *multiplo intero* della lunghezza d'onda. Di conseguenza, risultano permessi solo precisi valori del numero d'onda k e le regole di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld impongono semplicemente l'instaurarsi di onde stazionarie associate agli elettroni negli atomi.

Come ha fatto osservare Bohr²⁸, grazie alle (2.12) e (2.13) nella fisica quantistica c'è sempre un legame del tipo

$$E\tau = p\lambda = h \quad (2.18)$$

tra l'energia E e l'impulso p da una parte e il periodo τ e la lunghezza d'onda λ dall'altra. Questa relazione esprime il dualismo onda–corpuscolo e ne evidenzia gli aspetti complementari. Se ci si concentra sul primo membro delle equazioni (2.12) e (2.13), si focalizza l'aspetto corpuscolare, mentre il secondo membro è associato al comportamento ondulatorio. Da questa osservazione prendono avvio le argomentazioni di Bohr per enunciare il *principio di complementarità* che governerebbe i fenomeni fisici: questi si presenterebbero sotto l'aspetto ondulatorio o corpuscolare a seconda del tipo di osservazione che viene privilegiata. Così, per esempio, se si osserva la diffrazione di un fascio di luce o di particelle attraverso una fenditura, se ne evidenziano gli aspetti ondulatori; invece nell'effetto Compton o nell'effetto fotoelettrico si mettono in risalto gli aspetti corpuscolari.

Tuttavia è da osservare che la felice intuizione di de Broglie è scaturita da una situazione forzata: l'armonia pretesa dal teorema di de Broglie riguarda solo la fase dell'onda, in quanto la sua velocità di propagazione $v_f = c/\beta$ è superiore a quella della luce e quindi non può essere messa in relazione con la vera velocità del moto della particella. Se invece si considera un gruppo di onde con frequenze molto vicine tra di loro, che si propagano con velocità di fase molto prossime tra di loro, la loro velocità di gruppo,

²⁸ Cfr. n. 18 p. 109.

Verso l'equazione di Schrödinger

$$\begin{aligned} v_g &= \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{p}{m} \\ &= c^2 \frac{k}{\omega} = \frac{c^2}{v_f} \leq c, \end{aligned} \quad (2.19)$$

risulta non superiore a c e quindi può essere identificata con la velocità della particella.

Inoltre, è vero che, grazie alle (2.13) e alla definizione dell'indice di rifrazione $n = c/v_f = c/\nu\lambda$, il principio di Fermat (1.8) e il principio di Maupertuis (1.30) acquistano la stessa forma:

$$\delta \int_1^2 \frac{ds}{\lambda} = 0. \quad (2.20)$$

Tuttavia la (2.20) indica che la traiettoria descritta da una particella in un campo di forze non è la stessa compiuta dal raggio di luce: il cammino percorso dalla particella risulta quello con il minor numero di lunghezze d'onda, come per la luce, ma non quello corrispondente al minor tempo di percorrenza, perché la velocità di fase E/p della particella *non* coincide con la sua velocità di moto, mentre per la luce la velocità di propagazione di un'onda monocromatica è sempre uguale alla velocità di fase $v_f = \omega/k$.

III.3. L'equazione di Schrödinger

L'idea di de Broglie di associare un'onda alla particella sarebbe rimasta sterile se non si fosse riusciti a scrivere l'equazione d'onda corrispondente e a interpretarne le sue soluzioni. Si è già visto che l'uso di un'onda monocromatica del tipo (2.15), che si propaga con velocità maggiore di quella della luce, non è il più appropriato per descrivere una particella, che necessariamente viaggia con velocità non superiore a c . Sembra invece più conveniente associare alla particella un *pacchetto di onde* del tipo

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \quad (3.1)$$

e descrivere la velocità del suo moto ricorrendo alla velocità di gruppo.

Per stabilire l'equazione per il pacchetto di onde, basta applicare l'operatore di d'Alembert (I.3.31) alla (3.1), tenendo presente la (2.5). Si ottiene così:

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = \frac{m_0^2 c^2}{\hbar^2} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3.2)$$

che è l'equazione di Klein-Gordon²⁹.

Essa appare come un'equazione di d'Alembert per la funzione Ψ , con un termine di sorgente che coinvolge la lunghezza d'onda Compton della particella in gioco. Per particelle con massa a riposo m_0 nulla, quali sono i fotoni, l'equazione di Klein-Gordon diventa una normale equazione di d'Alembert che descrive la propagazione di un'onda elettromagnetica.

Da un punto di vista formale, l'equazione (3.2) può essere ottenuta pensando di applicare l'espressione classica (2.5) alla funzione $\Psi(\mathbf{r}, t)$, con l'intesa di operare le seguenti sostituzioni:

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad (3.3)$$

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla. \quad (3.4)$$

In questo modo, all'energia e all'impulso classici vengono associati degli operatori derivativi che agiscono sulla funzione $\Psi(\mathbf{r}, t)$ producendo la (3.2).

Moltiplicando a sinistra la (3.2) per Ψ^* e la sua complessa coniugata per Ψ e sottraendo membro a membro le due equazioni così ottenute, risulta

$$\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^* - \frac{1}{c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} - \Psi \frac{\partial^2 \Psi^*}{\partial t^2} \right) = 0. \quad (3.5)$$

Questa equazione ha la struttura di un'equazione di continuità,

$$\nabla \cdot \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0, \quad (3.6)$$

pur di definire una densità

$$\rho = \frac{i\hbar}{2m_0 c^2} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \right) \quad (3.7)$$

e una densità di corrente

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m_0} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (3.8)$$

L'esistenza di un'equazione di continuità associata all'equazione d'onda (3.2) è un fatto interessante, ma pone problemi interpretativi. L'equazione di Klein-Gordon (3.2) è un'equazione differenziale del secondo ordine nel tempo e, per la sua risoluzione, richiede la conoscenza della Ψ e della sua derivata temporale $\partial\Psi/\partial t$ a

²⁹ L'equazione, che oggi è indicata coi nomi di Oskar Benjamin Klein (1894–1977) e Walter Gordon (1893–c.1940), fu proposta nel 1926 contemporaneamente e indipendentemente da molti autori, tra i quali lo stesso Schrödinger. Per una storia dell'equazione di Klein–Gordon si veda l'articolo di Helge Kragh: *Equation with many fathers. The Klein–Gordon equation in 1926 [Un'equazione con molti padri. L'equazione di Klein–Gordon nel 1926]*, American Journal of Physics **52** (1984) 1024–1033.

un certo istante. Siccome Ψ e $\partial\Psi/\partial t$ possono essere assegnate ad arbitrio, la ρ della (3.7) non è definita positiva. Resta perciò problematica l'interpretazione della ρ e quindi della Ψ . In particolare è per esempio impossibile interpretare la ρ come la densità di materia o la densità di carica della particella allo studio ³⁰.

Queste difficoltà interpretative dell'equazione di Klein-Gordon sono legate al fatto che è un'equazione differenziale di secondo ordine nel tempo. Ciò è conseguenza dell'applicazione dell'operatore di d'Alembert e dell'uso dell'espressione relativistica (2.5) per l'energia, nella quale è inclusa anche la possibilità di energie negative per la particella libera:

$$E = -c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}. \quad (3.9)$$

Valori negativi per l'energia della particella in moto libero sono di difficile comprensione in fisica classica e acquistano significato solo in teoria quantistica dei campi.

Per eliminare la presenza di valori negativi dell'energia della particella descritta da un'equazione d'onda, conviene considerare piccole velocità e sviluppare la (3.9) in serie di potenze di $p/m_0 c$,

$$E = m_0 c^2 \sqrt{1 + \frac{p^2}{m_0^2 c^2}} \simeq m_0 c^2 + \frac{1}{2m_0} p^2 - \frac{1}{8m_0^3 c^2} p^4 + \dots, \quad (3.10)$$

e definire una nuova pulsazione ω' in approssimazione non relativistica:

$$\begin{aligned} \omega &\equiv \frac{E}{\hbar} = \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \frac{\hbar k^2}{2m_0} \\ &\equiv \frac{m_0 c^2}{\hbar} + \omega'. \end{aligned} \quad (3.11)$$

In tal modo il pacchetto di onde diventa

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega t)} \\ &= e^{-im_0 c^2 t/\hbar} \int d\mathbf{k} A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r} - \omega' t)} \\ &\equiv e^{-im_0 c^2 t/\hbar} \Psi'(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.12)$$

³⁰ Per tale ragione l'equazione di Klein-Gordon fu abbandonata e ripresa solo nel 1934 da Pauli e da Victor Frederick Weisskopf (n. 1908), che riuscirono a darne un'interpretazione corretta in uno schema di teoria quantistica dei campi e la affiancarono ad un'altra equazione d'onda relativistica proposta nel 1928 da Dirac. L'equazione di Dirac descrive particelle (a spin $\frac{1}{2}$) come gli elettroni, mentre l'equazione di Klein-Gordon descrive particelle (prive di spin) come i mesoni π .

W. Pauli e V. Weisskopf: *Über die Quantisierung der skalaren relativistischen Wellengleichung [La quantizzazione dell'equazione d'onda scalare relativistica]*, Helvetica Physica Acta **7** (1934) 709–729.

P.A.M. Dirac: *The quantum theory of the electron [La teoria quantistica dell'elettrone]*, Proceedings of the Royal Society of London **A117** (1928) 610–624; *The quantum theory of the electron. Part II. [La teoria quantistica dell'elettrone. Parte II.]*, *ibid.* **A118** (1928) 351–361.

L'equazione di Schrödinger

Nel pacchetto di onde $\Psi'(\mathbf{r}, t)$ ogni onda interviene con la sua pulsazione ω' , determinata dal valore non relativistico dell'energia:

$$\hbar\omega' = \frac{p^2}{2m_0} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}. \quad (3.13)$$

Applicando l'operatore di d'Alembert a $\Psi(\mathbf{r}, t)$, si ottiene

$$\begin{aligned} \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \Psi(\mathbf{r}, t) = \\ = e^{-im_0c^2t/\hbar} \left(\nabla^2 + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2} + \frac{2im_0}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \Psi'(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Identificando il secondo membro della (3.14) con il secondo membro dell'equazione di Klein-Gordon (3.2), risulta

$$\left(\nabla^2 + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2} + \frac{2im_0}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \Psi'(\mathbf{r}, t) = \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2} \Psi'(\mathbf{r}, t). \quad (3.15)$$

Nel derivare la Ψ' rispetto al tempo nella (3.15) si ricava ogni volta un fattore ω' che, nel limite non relativistico, è piccolo rispetto a m_0c^2/\hbar (cfr. eq. (3.11)). Pertanto nella (3.15) si può trascurare il termine con la derivata seconda rispetto al tempo e ottenere

$$\left(\nabla^2 + \frac{2im_0}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi'(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.16)$$

Richiamando Ψ la Ψ' e m la massa a riposo m_0 , si è soliti riscrivere la (3.16) nella forma:

$$\left(i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2\right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.17)$$

La (3.17) è l'*equazione di Schrödinger* per la particella libera³¹. Essa può pensarsi ottenuta a partire dalla relazione non relativistica dell'energia,

$$E = \frac{p^2}{2m}, \quad (3.18)$$

applicata alla funzione Ψ , con l'intesa di sostituire la derivata temporale all'energia e il gradiente spaziale all'impulso, secondo le stesse sostituzioni (3.3) e (3.4) che permettono di ricavare l'equazione di Klein-Gordon (3.2) a partire dalla relazione relativistica dell'energia.

³¹ La derivazione dell'equazione di Schrödinger qui proposta non è quella originale di Schrödinger, bensì segue la via suggerita da W. Pauli nelle sue lezioni al Politecnico di Zurigo nell'anno accademico 1956–1957 (cfr. n. 10 p. 107).

Esercizio 3.1

Verificare che, con l'approssimazione non relativistica (3.18) per l'energia, l'onda piana (2.15) soddisfa l'equazione di Schrödinger (3.17) per la particella libera.

Estendendo l'analogia al caso in cui, oltre all'energia cinetica (3.18), ci sia anche un contributo di energia potenziale,

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (3.19)$$

Schrödinger propose l'equazione:

$$\left[i \hbar \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - V(\mathbf{r}) \right] \Psi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.20)$$

Nella (3.20), accanto alle sostituzioni (3.3) e (3.4), si è sostituito alla funzione $V(\mathbf{r})$ della (3.19) l'operatore moltiplicativo $V(\mathbf{r})$ ³².

Come l'equazione di d'Alembert e l'equazione di Klein-Gordon, anche l'equazione di Schrödinger è un'equazione lineare nella Ψ e nelle sue derivate. Pertanto vale il principio di sovrapposizione lineare per cui una qualsiasi combinazione lineare di due soluzioni è ancora una soluzione. In questo senso l'equazione di Schrödinger è un'equazione d'onda e contiene la possibilità di descrivere fenomeni d'interferenza tipici del comportamento ondulatorio. Però l'equazione di Schrödinger, sia per la particella libera, (3.17), sia per la particella sottoposta a forze conservative, (3.20), è un'equazione differenziale del primo ordine nel tempo. In ciò si differenzia dalle equazioni di d'Alembert e di Klein-Gordon: per la sua risoluzione non occorre assegnare il valore iniziale della derivata temporale della Ψ , ma basta conoscere a un certo istante le condizioni sulla Ψ al contorno del dominio spaziale.

Anche per l'equazione di Schrödinger è possibile individuare un'equazione di continuità. Se si suppone che il potenziale $V(\mathbf{r})$ sia reale,

$$V(\mathbf{r}) = V^*(\mathbf{r}), \quad (3.21)$$

moltiplicando a sinistra la (3.20) per Ψ^* e la sua complessa coniugata per Ψ e quindi sottraendo membro a membro le due equazioni così ottenute, risulta:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 + \frac{\hbar^2}{2m} (\Psi^* \nabla^2 \Psi - \Psi \nabla^2 \Psi^*) = 0. \quad (3.22)$$

³² L'introduzione degli operatori in meccanica quantistica si deve al matematico americano di origine russa Norbert Wiener (1894–1964) che, contattato da Born per dare giustificazione matematica all'uso delle matrici a dimensioni infinite, lo invitò al MIT nell'autunno del 1925.

M. Born e N. Wiener: *A new formulation of the laws of quantization of periodic and aperiodic phenomena*, Journal of Mathematics and Physics (MIT) **5** (1925-1926) 84–98; *Eine neue Formulierung der Quantengesetze für periodische und nicht periodische Vorgänge [Una nuova formulazione delle leggi di quantizzazione dei processi periodici e aperiodici]*, Zeitschrift für Physik **36** (1926) 174–187. Questo lavoro fu ricevuto dalla rivista tedesca il 5 gennaio 1926.

L'equazione di Schrödinger

La (3.22) si può scrivere in forma di equazione di continuità,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \mathbf{j} = 0, \quad (3.23)$$

dove

$$\rho = |\Psi|^2, \quad (3.24)$$

$$\mathbf{j} = -\frac{i\hbar}{2m}(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*). \quad (3.25)$$

Esercizio 3.2

Quale modifica nella (3.23) comporterebbe l'ipotesi di un potenziale $V(\mathbf{r})$ complesso? Quale sarebbe il significato della parte immaginaria di $V(\mathbf{r})$?

Qualunque sia l'interpretazione da attribuire alla Ψ , l'esistenza di un'equazione di continuità che coinvolge la ρ , definita positiva, permette di individuare la classe di funzioni accettabili quali soluzioni dell'equazione di Schrödinger. Infatti integrando la (3.23) su tutto lo spazio \mathbb{R}^3 di definizione della Ψ , il contributo di flusso attraverso la superficie delimitante il volume si azzerà. Perciò si ottiene

$$\frac{d}{dt} \int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 0, \quad (3.26)$$

cioè

$$\int d\mathbf{r} |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = N, \quad (3.27)$$

dove N è una costante indipendente dal tempo, detta *costante di normalizzazione*, perché fissa la norma di Ψ . In seguito converrà scegliere

$$N = 1. \quad (3.28)$$

Le funzioni che soddisfano la (3.27) appartengono allo spazio delle funzioni a *quadrato sommabile* su \mathbb{R}^3 . Tale spazio, indicato come $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, è uno spazio vettoriale (lineare) complesso, cioè tale che per ogni $\Psi_1, \Psi_2 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ sia anche:

$$\Psi = c_1 \Psi_1 + c_2 \Psi_2 \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3), \quad (3.29)$$

con c_1, c_2 coefficienti complessi. Dunque le soluzioni accettabili per la (3.27),

$$\Psi(\mathbf{r}, t) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3), \quad (3.30)$$

rispettano automaticamente il principio di sovrapposizione lineare.

Esercizio 3.3

Quali sono le dimensioni della funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$?

Esercizio 3.4

In assenza di potenziale, anche un'onda piana monocromatica risolve l'equazione di Schrödinger (cfr. Esercizio 3.1). È una soluzione accettabile?

Invece l'onda piana monocromatica risulta

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)} \notin \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3), \quad (3.31)$$

perché l'integrale (3.27) esteso a tutto lo spazio diverge. Tuttavia non diverge un qualsiasi pacchetto di onde costruito con onde piane del tipo (3.31), anche se la sovrapposizione riguarda \mathbf{k} compresi in un intervallo stretto $\Delta\mathbf{k}$. Mettendosi per semplicità in una dimensione e trascurando la parte temporale che non interviene nelle considerazioni, si verifica che il pacchetto

$$\begin{aligned} \int_k^{k+\Delta k} dk' e^{ik'x} &= \frac{e^{i(k+\Delta k)x} - e^{ikx}}{ix} \\ &= 2e^{i(k+\frac{1}{2}\Delta k)x} \frac{\sin \frac{1}{2}\Delta kx}{x}, \end{aligned} \quad (3.32)$$

è una funzione appartenente a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ per qualunque Δk . Questa proprietà rende l'onda piana *localmente integrabile* così che una qualunque sovrapposizione lineare di onde piane risulta una funzione a quadrato sommabile. Essendo Δk arbitrario, si può pensare di renderlo piccolo, confrontabile con l'incertezza di natura sperimentale nel determinare l'impulso della particella, pur avendo sempre a che fare con un pacchetto di onde e quindi con una funzione appartenente a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$. In questo modo il pacchetto di onde (3.32) risulta concentrato strettamente intorno al valore prescelto di k e finisce per essere costituito in pratica da una sola onda piana, che quindi riacquista senso almeno in questo limite. Perciò, anche se l'onda piana non rappresenta uno stato fisicamente realizzabile e non appartiene a $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$, resta pur sempre utile come ausilio di calcolo, potendosi intendere come il limite di un pacchetto di onde strettamente concentrato. L'uso di funzioni $\notin \mathcal{L}^2$ come le onde piane estende lo spazio di funzioni utilizzabili a uno spazio più ampio di \mathcal{L}^2 , ma va ricordato che poi solo un'opportuna combinazione lineare di tali funzioni (pacchetto di onde) $\in \mathcal{L}^2$ può rappresentare una situazione accettabile.

Esercizio 3.5

Verificare che, nell'approssimazione non relativistica (3.18), la velocità di fase per l'onda piana (3.31) è la metà della velocità v di una particella libera.

Esercizio 3.6

Verificare che la velocità di gruppo di un pacchetto di onde piane coincide proprio con la velocità v della particella.

Incidentalmente, questo risultato ribadisce la necessità di ricorrere a pacchetti di onde $\in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ per descrivere il moto di una particella.

Esercizio 3.7

Nell'ipotesi (3.21) verificare che anche $\Psi^*(\mathbf{r}, -t)$ è soluzione dell'equazione di Schrödinger (3.20). La funzione $\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, -t)$ è ottenuta dalla funzione $\Psi(\mathbf{r}, t)$ per *inversione temporale*: $t \rightarrow -t$.

Esercizio 3.8

Nelle ipotesi dell'Esercizio precedente, confrontare l'equazione di continuità (3.22) per la $\Psi(\mathbf{r}, t)$ e quella per la $\bar{\Psi}(\mathbf{r}, t)$.

III.4. Limite classico dell'equazione di Schrödinger

Le soluzioni dell'equazione di Schrödinger vengono chiamate funzioni d'onda in quanto descrivono l'aspetto ondulatorio del moto di una particella. Prima di procedere all'interpretazione della funzione d'onda è utile approfondire i legami tra l'equazione di Schrödinger e la fisica classica. Si supponga di voler studiare il moto libero di una particella. Con analogia ottica si può porre

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar}, \quad (4.1)$$

dove $S(\mathbf{r}, t)$ ha le dimensioni di un'azione. Inserendo la (4.1) nell'equazione di Schrödinger libera (3.17), si ottiene

$$-\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{1}{2m} \nabla S \cdot \nabla S - \frac{i\hbar}{2m} \nabla^2 S. \quad (4.2)$$

Se la variazione spaziale di S è così piccola da permettere di trascurare il termine con il laplaciano, la (4.2) può identificarsi con un'equazione di Hamilton-Jacobi,

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(\mathbf{r}, \nabla S, t) = 0, \quad (4.3)$$

dove nella hamiltoniana H della particella libera,

$$H = \frac{p^2}{2m}, \quad (4.4)$$

si è posto

$$\mathbf{p} = \nabla S. \quad (4.5)$$

Dato che l'energia E della particella è costante, si può scegliere per S una forma del tipo (1.25); perciò risulta anche

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t}. \quad (4.6)$$

Le definizioni classiche (4.5) e (4.6) per l'impulso e l'energia trovano così corrispondenza nelle sostituzioni (3.3) e (3.4) che associano all'impulso e all'energia i relativi operatori quantistici.

Esercizio 4.1

Volendo associare alla particella libera un'onda piana, qual è l'espressione esplicita di $S(\mathbf{r}, t)$?

La corrispondenza tra equazione di Schrödinger ed equazione classica di Hamilton-Jacobi permette di esprimere la soluzione dell'equazione di Schrödinger come un'onda la cui fase è data dall'azione classica misurata in unità \hbar . Ma ciò è possibile solo nel caso in cui S abbia una debole dipendenza spaziale. Per la (4.5) e alla luce dell'ipotesi di de Broglie (2.17), ciò significa che l'azione S deve variare lentamente su distanze confrontabili con $\lambda = h/p$. Altrimenti il termine col laplaciano nella (4.2) diventa importante nel distinguere la descrizione ondulatoria da quella della meccanica classica.

Esempio 4.1

Si consideri una particella di massa $m = 1\text{g}$ in moto con la velocità di 1ms^{-1} . La lunghezza d'onda di de Broglie associata è

$$\begin{aligned} \lambda &= \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{10^{-3}} \text{m} \\ &= 6.626 \times 10^{-31} \text{m}, \end{aligned}$$

che è sicuramente trascurabile rispetto alle distanze su cui varia l'associata azione classica. L'equazione di Hamilton-Jacobi (e quindi ogni risultato della meccanica classica) è giustamente applicabile allo studio del moto di tale particella.

Esempio 4.2

Si consideri ora un elettrone ($m = 9.1094 \times 10^{-31}\text{kg}$) di energia 1eV ($= 1.6022 \times 10^{-19}\text{J}$):

$$\begin{aligned} p &= \sqrt{2mE} = (2 \times 9.1094 \times 10^{-31} \times 1.6022 \times 10^{-19})^{1/2} \text{m kg s}^{-1} \\ &= 5.403 \times 10^{-25} \text{m kg s}^{-1}. \end{aligned}$$

Limite classico dell'equazione di Schrödinger

L'associata lunghezza d'onda,

$$\begin{aligned}\lambda &= \frac{h}{p} = \frac{6.626 \times 10^{-34}}{5.403 \times 10^{-25}} \\ &= 1.226 \times 10^{-9} \text{ m},\end{aligned}$$

è confrontabile con le distanze che può percorrere un elettrone nella materia. In tal caso dunque la descrizione classica è inadeguata e occorre utilizzare l'equazione di Schrödinger.

Nel caso più generale, in presenza di un campo di forze conservativo, si possono cercare soluzioni dell'equazione (3.20) nella forma

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}, t) e^{iS(\mathbf{r}, t)/\hbar}, \quad (4.7)$$

dove sia l'azione S che l'ampiezza A dell'onda sono funzioni reali. Sostituendo la (4.7) nella (3.20) e separando parte reale da parte immaginaria, si ottiene

$$\frac{\partial A}{\partial t} = -\frac{1}{2m} [A \nabla^2 S + 2 \nabla A \cdot \nabla S], \quad (4.8)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = -\left[\frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} \right]. \quad (4.9)$$

Con la definizione

$$\rho(\mathbf{r}, t) \equiv |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = A^2(\mathbf{r}, t), \quad (4.10)$$

la (4.8) si può riscrivere:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \frac{\nabla S}{m} \right) = 0. \quad (4.11)$$

Ponendo

$$\mathbf{v} = \frac{1}{m} \nabla S, \quad (4.12)$$

si riconosce nella (4.11) un'equazione di continuità:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \quad (4.13)$$

Ma questa equazione di continuità coincide con la (3.23), in quanto con l'assunzione (4.7) si ha proprio

$$\begin{aligned}\mathbf{j} &= -\frac{i\hbar}{2m} (\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*) \\ &= A^2(\mathbf{r}, t) \frac{1}{m} \nabla S \\ &= \rho \mathbf{v}.\end{aligned} \quad (4.14)$$

La densità di corrente \mathbf{j} , che compare nell'equazione di continuità (3.23) associata all'equazione di Schrödinger, può essere vista quindi collegata con la velocità della particella attraverso il fattore di densità ρ che risolve l'equazione di continuità stessa.

Esercizio 4.2

Verificare che per la soluzione dell'equazione di Schrödinger ottenuta per inversione temporale nell'Esercizio 3.7 la densità di corrente \mathbf{j} (4.14) cambia segno, in accordo con quanto succede alla velocità in meccanica classica quando si inverte il tempo.

Nella primitiva interpretazione di Schrödinger, la Ψ descriveva effettivamente la distribuzione di materia, per cui

$$|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r} \equiv \rho d\mathbf{r} \quad (4.15)$$

rappresenterebbe la quantità di materia appartenente alla particella in esame e contenuta nel volumetto $d\mathbf{r}$. Quanto più concentrato spazialmente è il pacchetto di onde, tanto meglio localizzata è la particella e più facilmente si recupera la descrizione classica in termini di traiettoria. L'equazione di continuità (3.23), o (4.13), garantirebbe la conservazione della massa della particella.

Tuttavia tale interpretazione idrodinamica incontra grosse difficoltà già a livello della stessa equazione di Schrödinger. Infatti, se questa fosse corretta, oltre al potenziale delle forze esterne dovrebbe comparire nell'equazione di Schrödinger anche un termine di retroazione tra le parti della particella la cui carica Q risulta distribuita nello spazio tridimensionale con densità $Q\rho$. Ma questo termine non c'è e non ci deve essere, altrimenti l'equazione di Schrödinger diventa non lineare e si distrugge l'accordo sui livelli d'energia calcolati per esempio per l'elettrone nell'atomo di idrogeno³³. Perciò questo tipo di interpretazione va senz'altro escluso.

Se si conosce la ρ , la (4.9) permette la determinazione di S e quindi dell'intera Ψ :

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho^2} \right] = 0. \quad (4.16)$$

Qualora si possa trascurare nella (4.16) il termine in \hbar^2 , si riconosce che la funzione S soddisfa l'equazione classica di Hamilton–Jacobi per una particella sottoposta al potenziale V e dotata di impulso \mathbf{p} , in accordo con la (4.5). Naturalmente la presenza di un potenziale modifica la forma (1.19) della funzione S tipica dell'onda piana; essendo però costante l'energia totale, la funzione S potrà sempre essere

³³ Questa osservazione fu fatta subito da Erwin Madelung nel riderivare l'equazione di continuità associata all'equazione di Schrödinger e nel cercare di interpretarla in termini idrodinamici. E. Madelung: *Quantentheorie in hydrodynamischer Form [Teoria quantistica in forma idrodinamica]*, *Zeitschrift für Physik* **40** (1927) 322–326, ricevuto dalla rivista il 26 ottobre 1926. Per ulteriori dettagli sulle difficoltà di interpretazione della ρ in termini di densità di materia, cfr. S.-I. Tomonaga, *loc. cit.*, vol. II (n. 28 p. 13).

espressa da una forma del tipo (1.25). In ogni caso valgono sempre le corrispondenze tra le definizioni classiche (4.5) e (4.6) per l'impulso e l'energia e le sostituzioni (3.3) e (3.4) che associano all'impulso e all'energia i relativi operatori.

Quando le variazioni spaziali seconde dell'ampiezza della funzione d'onda sono abbastanza grandi da compensare il piccolo valore di \hbar , il termine in \hbar^2 nella (4.16),

$$U(\mathbf{r}) \equiv -\frac{\hbar^2}{4m} \left[\frac{\nabla^2 \rho}{\rho} - \frac{1}{2} \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho^2} \right] = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A}, \quad (4.17)$$

non può più essere trascurato: esso differenzia l'equazione di Schrödinger dall'equazione classica di Hamilton–Jacobi, assumendovi il ruolo di una sorta di *potenziale quantistico* che si somma al potenziale classico $V(\mathbf{r})$.

Esercizio 4.3

Quanto vale il potenziale quantistico (4.17) nel caso dell'onda piana?

La presenza di questo potenziale quantistico $U(\mathbf{r})$, unita alla relazione (4.12) che sembra potersi interpretare come la velocità della particella di massa m , suggerisce l'idea che si possa scrivere l'equazione di moto classica per la particella nella forma:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -\nabla \left[V(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} \right]. \quad (4.18)$$

Nella (4.18), oltre alla forza $\mathbf{f} = -\nabla V(\mathbf{r})$, dovuta al potenziale esterno classico già presente nella legge di Newton, compare una forza quantistica, $-\nabla U(\mathbf{r})$, determinata dalle variazioni spaziali dell'ampiezza della funzione d'onda.

Però anche questa idea³⁴ va scartata, perché l'uso della (4.18) e della (4.12), combinato con l'usuale interpretazione della funzione d'onda che soddisfa l'equazione di Schrödinger, non fornisce risultati diversi da quelli ottenibili in modo più diretto basandosi solo sull'equazione di Schrödinger. Perciò l'individuazione di un potenziale quantistico, responsabile di fluttuazioni imprevedibili della forza agente sulla particella, risulta sterile fintanto che non si riesca a definire situazioni che permettano una falsificazione di tale ipotesi in un confronto sperimentale con i risultati della meccanica quantistica.

Resta comunque il fatto che formalmente è possibile imporre nella (4.2) o nella (4.16) la condizione $\hbar \rightarrow 0$ e passare dalla descrizione ondulatoria, in termini di

³⁴ Originariamente, de Broglie aveva proposto la teoria dell'onda Ψ che *pilota* per così dire il moto della particella, la quale ne viene in pratica trascinata durante la propagazione dell'onda, con una velocità fornita dalla (4.12) e diretta perpendicolarmente alla superficie ad azione S costante. De Broglie chiamava la (4.12) la *formula della guida*.

L. de Broglie: *La mécanique ondulatoire et la structure atomique de la matière et du rayonnement [La meccanica quantistica e la struttura atomica della materia e della radiazione]*, Journal de physique **8** (1927) 225–241.

Per una discussione sull'interpretazione di de Broglie, basata sui suoi lavori tradotti in italiano, cfr. anche il libro di L. de Broglie, E. Schrödinger, W. Heisenberg: *Onde e particelle in armonia. Alle sorgenti della meccanica quantistica*, introduzione e cura di S. Boffi, Jaca Book, Milano, 1991.

equazione di Schrödinger per la Ψ , a quella classica in termini di equazione di Hamilton–Jacobi per l'azione S . Ciò risulta lecito quando le variazioni di S sulle distanze caratteristiche del problema sono grandi rispetto a \hbar , in modo che il termine col gradiente di S nella (4.2) predomini su quello col laplaciano. Questa situazione è analoga a quella, discussa nel paragrafo III.1, che permette l'uso dell'equazione dell'iconale e dell'ottica geometrica per la propagazione dei raggi luminosi quando la lunghezza d'onda in gioco può considerarsi piccola. Invece quando l'azione diventa confrontabile con \hbar , come nel caso della radiazione di corpo nero, dell'effetto fotoelettrico e delle vibrazioni reticolari di un cristallo in prossimità dello zero assoluto, la descrizione classica viene meno e l'unico termine dipendente da \hbar nella (4.2) o nella (4.16) non è più trascurabile, ma anzi acquista un ruolo significativo ³⁵.

III.5. Interpretazione dell'equazione di Schrödinger

Riconosciuto l'ambito di validità dell'equazione di Schrödinger, sorge il problema del significato della funzione d'onda che ne è soluzione.

Il dualismo onda-corpuscolo, messo in evidenza dall'analogia tra ottica geometrica e meccanica della particella, non è solo una curiosità matematica. Il comportamento corpuscolare della luce, ipotizzato da Einstein nella sua spiegazione dell'effetto fotoelettrico, è stato rivelato dagli esperimenti di Compton sulla diffrazione dei raggi X ; ciò suggerisce l'idea di una coesistenza delle onde luminose (che subiscono diffrazione e interferenza) e dei fotoni (quanti di luce che possono urtare gli elettroni di un atomo). Il comportamento ondulatorio delle particelle, intuito da de Broglie sulla base dell'analogia formale tra il principio di Fermat e il principio di Maupertuis, ha trovato inattesa conferma sperimentale attraverso l'interpretazione dei risultati di Davisson e Germer: anche gli elettroni possono subire la diffrazione ³⁶. Dunque

³⁵ Il legame tra il valore dell'azione rispetto a \hbar e la possibilità di recuperare la descrizione classica diventa più chiaro nella formulazione di Feynman della meccanica quantistica, cui si fa cenno nel paragrafo VII.5.

³⁶ Clinton Joseph Davisson (1881–1958) e Lester Halbert Germer (1896–1971): *Diffraction of electrons by a crystal of nickel* [Diffrazione di elettroni da parte di un cristallo di nichel], *Physical Review* **30** (1927) 705–740; George Paget Thomson e Andrew Reid: *Diffraction of cathode rays by a thin film* [Diffrazione di raggi catodici da parte di un film sottile], *Nature* **119** (1927) 820.

Lo stesso de Broglie suggerì la possibilità che gli elettroni subissero diffrazione, ma la scoperta del comportamento ondulatorio degli elettroni è dovuta a un fortunato incidente verificatosi nel 1925 nel laboratorio di Davisson. Nel corso di studi sull'emissione secondaria di elettroni da parte di elettrodi metallici posti in un tubo a vuoto, per l'esplosione di una bottiglia di aria liquida si ruppe un tubo con elettrodo di nichel policristallino che, a contatto con l'aria, si ossidò. Il trattamento termico dell'elettrodo di nichel, reso necessario per ripristinarne il grado di purezza originario, produsse una ricristallizzazione del metallo in grossi grani cristallini. La successiva esposizione dell'elettrodo al fascio di elettroni, fornì una distribuzione angolare degli elettroni secondari completamente diversa da prima dell'incidente. Le frange di diffrazione così prodotte furono capite e interpretate solo nel 1927 da Walter Elsasser (1904–1987), un allievo di Born e Franck a Göttingen, che da loro aveva ricevuto l'incarico di studiare i risultati di Davisson. Fu merito probabilmente dell'indagine di Elsasser che le idee di de Broglie trovarono credito nel mondo anglosassone e che alla fine lo portarono a ricevere il premio Nobel per la Fisica nel 1929.

la soluzione $\Psi(\mathbf{r}, t)$ dell'equazione di Schrödinger (3.20), mediante il suo modulo quadrato, deve essere in grado di spiegare l'intensità della radiazione diffratta di un fascio di elettroni, così come l'intensità della luce è data dal modulo quadrato della funzione associata all'onda luminosa.

Però nella descrizione ondulatoria della luce si considerano simultaneamente più particelle: l'effetto fotoelettrico ha messo in evidenza che l'intensità dell'onda di luce è proporzionale al numero di fotoni che interagiscono con la materia. Viene quindi naturale pensare che anche nella descrizione ondulatoria degli elettroni occorra considerare il moto non di un singolo elettrone, ma di tanti contemporaneamente. Allora la $\Psi(\mathbf{r}, t)$ non è una proprietà della singola particella, ma piuttosto risulta associata a un insieme di particelle.

Se ci si vuole ricondurre allo studio del comportamento di *una* particella dell'insieme, bisogna introdurre concetti statistici³⁷. Le modulazioni spaziali di $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2$, corrispondenti alla maggiore o minore intensità della radiazione, possono essere riferite alla singola particella se si invoca la nozione di probabilità: $|\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\mathbf{r}$ rappresenta la probabilità di trovare la particella nel volume $d\mathbf{r}$ all'istante t . In accordo con questa interpretazione si è convenuta la normalizzazione (3.28), in quanto deve esserci certezza di trovare la particella all'interno del volume complessivo permesso. In tal modo l'equazione di Schrödinger governa la variazione di probabilità nel tempo, non le vicende temporali di un particolare corpuscolo.

Nella descrizione ondulatoria si perde dunque la determinazione strettamente causale della meccanica classica, che è in grado di predire con esattezza il valore di una qualunque quantità osservabile associata a una specifica particella, qualora si conoscano a un certo istante la sua posizione e il suo impulso. Nella meccanica ondulatoria, una volta preparato il sistema all'istante iniziale, assegnata cioè la $\Psi(\mathbf{r}, 0)$, l'equazione di Schrödinger fornisce, *in modo perfettamente deterministico*, la $\Psi(\mathbf{r}, t)$ ad ogni altro istante successivo. Però con la Ψ si possono soltanto formulare *previsioni* sul comportamento di una particella attraverso il calcolo della probabilità di trovarla in un certo posto. In particolare è possibile prevedere le posizioni delle frange di diffrazione provocate su una parete da un fascio di particelle che hanno attraversato la fenditura di uno schermo, ma non il preciso punto della parete colpito da una specifica particella. La meccanica quantistica dunque è essenzialmente una teoria statistica: essa descrive i processi fisici attraverso il *calcolo* del *valor medio* che una quantità fisica può assumere, quando viene misurata su un insieme di sistemi fisici

È curioso notare che George Paget Thomson (1892–1975) ricevette il premio Nobel nel 1937 insieme con C.J. Davisson per avere dimostrato la natura ondulatoria dell'elettrone, quando il padre J.J. Thomson lo ebbe nel 1906 per averne dimostrato la natura corpuscolare.

W. Elsasser: *Bemerkungen zur Quantenmechanik freier Elektronen [Osservazioni sulla meccanica quantistica di elettroni liberi]*, Die Naturwissenschaften **13** (1925) 711.

³⁷ Confortato dalla conferma sperimentale del comportamento ondulatorio degli elettroni, Born propose l'interpretazione probabilistica dell'equazione di Schrödinger per trattare processi d'urto. L'esatto risultato di un singolo esperimento, secondo Born, è in linea di principio imprevedibile: con la Ψ si calcolano solo delle probabilità relative ai valori che possono acquistare le osservabili fisiche a seguito di una misurazione. M. Born: *loc. cit.* (n. 18 p. 109).

identici, rinunciando alla previsione del valore preciso che questa quantità assume in un sistema particolare ³⁸.

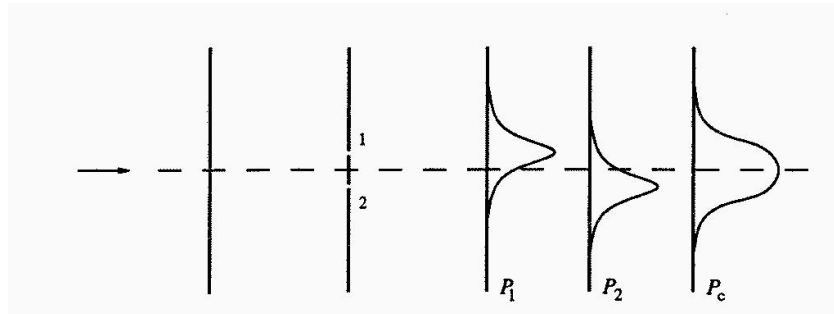


Fig. 5.1. L'esperimento di interferenza di Young con un fascio di particelle classiche: la probabilità totale è la somma delle probabilità relative ai due percorsi possibili.

Il concetto di probabilità preesiste alla meccanica quantistica che ne riprende la definizione *frequenzistica* nel senso che si definisce probabilità di un certo evento la frequenza con cui esso si verifica quando si ripeta numerose volte lo stesso tipo di operazione. Ma il modo di calcolare la probabilità viene drasticamente modificato dalla meccanica quantistica, perché la *legge di composizione* delle probabilità è completamente diversa. Ciò può essere illustrato ricorrendo a un esperimento concettuale basato sullo schema dell'interferometro di Young.

Una sorgente emette elettroni, uno alla volta e tutti con la stessa energia, che vanno ad incidere su uno schermo nel quale sono praticate due fenditure, 1 e 2. Gli elettroni che hanno attraversato l'una o l'altra delle fenditure vengono raccolti e rivelati su una parete successiva. La registrazione del punto di arrivo sulla parete permette di conoscere, alla fine dell'esperimento, come si sono distribuiti gli elettroni, senza sapere però attraverso quale fenditura i singoli elettroni siano passati.

Dal punto di vista della fisica classica, ogni elettrone attraversa o la fenditura 1 o la fenditura 2 (fig. 5.1). Dato che la traiettoria di una particella classica è perfettamente definibile, si può calcolare la probabilità associata al percorso che comprende l'attraversamento di una delle due fenditure, indipendentemente dalla simultanea presenza dell'altra fenditura, sia essa aperta o chiusa. Non sapendo quale sia stata attraversata dai singoli elettroni, la fisica classica vede le due possibilità non

³⁸ La descrizione della meccanica quantistica è profondamente diversa da quella della meccanica statistica classica, in cui l'aspetto statistico e il ricorso a valori medi sono collegati all'impossibilità *pratica* di seguire l'evoluzione deterministica del moto di tutte le particelle che costituiscono il sistema fisico in esame. L'insieme statistico quantistico riguarda repliche identiche dello *stesso* sistema fisico e quindi ha senso anche quando questo è costituito da una sola particella: l'insieme di particelle che si considera in meccanica quantistica in questo caso comprende particelle tutte con le stesse caratteristiche e con la stessa Ψ iniziale; purtroppo, a seguito di una misura, ognuna di queste particelle può fornire a priori un risultato individuale *diverso*.

correlate e calcola la probabilità $P_c(x)$ di rivelare gli elettroni nel punto x della parete finale come somma delle probabilità $P_1(x)$ e $P_2(x)$ relative ai due percorsi possibili attraverso 1 e 2, rispettivamente:

$$P_c(x) = P_1(x) + P_2(x). \quad (5.1)$$

In meccanica quantistica occorre riferirsi alla funzione d'onda $\Psi(x)$ che descrive l'ampiezza di probabilità di rivelare la posizione d'arrivo x degli elettroni sulla parete. L'associata probabilità quantistica è:

$$P_q(x) \equiv \rho(x) = |\Psi(x)|^2. \quad (5.2)$$

D'altra parte, a causa del comportamento ondulatorio degli elettroni, ci si aspetta per $P_q(x)$ una distribuzione simile a quella dell'intensità della luce nell'esperimento di Young (fig. 5.2). In realtà, grazie al principio di sovrapposizione lineare, la $\Psi(x)$ risulta la somma di due contributi,

$$\Psi(x) = \Psi_1(x) + \Psi_2(x), \quad (5.3)$$

ciascuno calcolabile come soluzione dell'equazione di Schrödinger che descrive il propagarsi degli elettroni dalla sorgente alla parete finale attraverso una particolare fendit

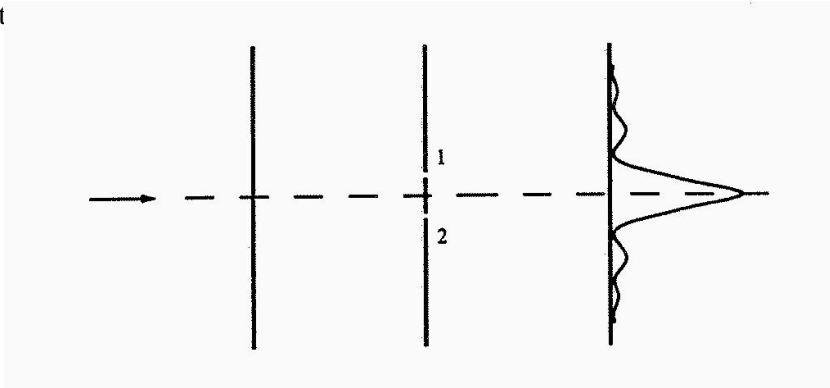


Fig. 5.2. L'interferenza di probabilità quantistica provoca le frange di interferenza nell'esperimento di Young.

In meccanica quantistica dunque non si sommano le probabilità di eventi non correlati: grazie al principio di sovrapposizione lineare che regola l'equazione di Schrödinger, si sommano le *ampiezze* di probabilità. Di conseguenza, la probabilità quantistica diventa:

$$\begin{aligned} P_q(x) &= |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \\ &= |\Psi_1(x)|^2 + |\Psi_2(x)|^2 + \Psi_1^*(x)\Psi_2(x) + \Psi_1(x)\Psi_2^*(x) \\ &= P_1(x) + P_2(x) + \Psi_1^*(x)\Psi_2(x) + \Psi_1(x)\Psi_2^*(x). \end{aligned} \quad (5.4)$$

A causa dei termini interferenziali, $\Psi_1^*(x)\Psi_2(x)$ e $\Psi_1(x)\Psi_2^*(x)$, la probabilità quantistica $P_q(x)$ differisce dalla probabilità classica $P_c(x)$; la differenza è provocata dall'instaurarsi di una interferenza di probabilità tra eventi non correlati, ma a priori ugualmente possibili: un' *interferenza di probabilità* tra alternative possibili.

Sono proprio i termini di interferenza a provocare le modulazioni di probabilità che riproducono le modulazioni di intensità delle frange di diffrazione delle onde di luce nell'interferometro di Young e degli elettroni raccolti sulla parete finale (fig. 5.2).

Le alternative si possono escludere, o chiudendo una delle due fenditure oppure intervenendo con uno strumento di osservazione che decida attraverso quale fenditura sia passata la particella. In tal caso l'osservazione impone la scelta tra le due possibilità alternative: la funzione Ψ_1 o la funzione Ψ_2 , a seconda che si sia chiusa la fenditura 2 o la fenditura 1. Corrispondentemente, la probabilità quantistica in questo caso si identifica con la probabilità classica relativa alla traiettoria individuata con l'osservazione. L'osservazione ha fatto *precipitare* la funzione d'onda (5.3) in una delle due, Ψ_1 o Ψ_2 , di cui a priori era sovrapposizione. In questo senso l'osservazione introduce un disturbo nell'evoluzione dell'onda che attraversa lo schermo con le fenditure, disturbo che distrugge l'interferenza di probabilità e che non è descrivibile dall'equazione di Schrödinger per la Ψ .

III.6. Teorema di Ehrenfest

L'equazione di Schrödinger rispetta anche il principio di corrispondenza tra descrizione classica e descrizione quantistica che fu un principio basilare nel guidare la ricerca della costruzione della nuova meccanica. Questo fatto può essere messo in luce attraverso il seguente teorema dimostrato da Ehrenfest³⁹.

Si consideri per semplicità una sola dimensione spaziale; la funzione d'onda $\Psi(x, t)$ sia normalizzata:

$$\int dx |\Psi(x, t)|^2 = 1. \quad (6.1)$$

Coerentemente con l'interpretazione di Copenhagen, il *valor medio* della posizione della particella lungo l'asse x si ottiene pesando la posizione x con la densità di probabilità di presenza $|\Psi(x, t)|^2$ della particella stessa:

$$\langle x \rangle = \int dx x |\Psi(x, t)|^2. \quad (6.2)$$

Questo valor medio può anche porsi nella forma di un *valore di aspettazione* dell'operatore moltiplicativo associato alla posizione lungo l'asse x :

³⁹ Cfr. n. 19 p. 110.

Teorema di Ehrenfest

$$\langle x \rangle \equiv \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t). \quad (6.3)$$

Il teorema di Ehrenfest stabilisce:

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle = \langle p_x \rangle \equiv -i \hbar \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, t), \quad (6.4)$$

$$\frac{d}{dt} \langle p_x \rangle = \left\langle -\frac{\partial V(x)}{\partial x} \right\rangle \equiv - \int dx \Psi^*(x, t) \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Psi(x, t). \quad (6.5)$$

La (6.4) indica che il valor medio dell'impulso lungo la direzione x si ottiene calcolando il valore d'aspettazione dell'operatore $-i \hbar (\partial / \partial x)$ che, secondo la (3.4), corrisponde all'impulso classico. La (6.5) definisce in modo simile il valor medio della forza, responsabile della variazione temporale del valor medio dell'impulso. Col teorema di Ehrenfest si recuperano così, a livello di valori medi, definizioni e leggi della meccanica classica.

Per dimostrare la (6.4) si può utilizzare l'equazione di continuità per la ρ e integrare per parti:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle x \rangle &= \int dx x \frac{\partial}{\partial t} |\Psi|^2 \\ &= - \int dx x \frac{\partial}{\partial x} j \\ &= \int dx j. \end{aligned}$$

Ma

$$\begin{aligned} \int dx j &= -\frac{i \hbar}{2m} \int dx \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \\ &= 2 \operatorname{Re} \left[-\frac{i \hbar}{2m} \int dx \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right]. \end{aligned} \quad (6.6)$$

D'altra parte:

$$\begin{aligned} 2 \operatorname{Im} \left[-i \hbar \int dx \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \right] &\equiv -i \hbar \int dx \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Psi \frac{\partial \Psi^*}{\partial x} \right) \\ &= -i \hbar \int dx \frac{\partial}{\partial x} |\Psi|^2 \\ &= -i \hbar \left[|\Psi|^2 \right]_{-\infty}^{+\infty} = 0. \end{aligned}$$

Pertanto:

Verso l'equazione di Schrödinger

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle x \rangle &= -\frac{i\hbar}{m} \int dx \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ &\equiv \frac{1}{m} \langle p_x \rangle,\end{aligned}$$

a dimostrazione della (6.4). Per la (6.6), $\langle p_x \rangle$ è, giustamente, una quantità reale.

Per dimostrare la (6.5) occorre calcolare:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle &= -i\hbar \frac{d}{dt} \int dx \Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ &= -i\hbar \int dx \frac{\partial \Psi^*}{\partial t} \frac{\partial \Psi}{\partial x} - i\hbar \int dx \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \frac{\partial \Psi}{\partial t} \\ &= \int dx \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi^* + \Psi^* V(x) \right] \frac{\partial \Psi}{\partial x} \\ &\quad - \int dx \Psi^* \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V(x) \Psi \right),\end{aligned}$$

dove si è utilizzata l'equazione di Schrödinger e la sua complessa coniugata per eliminare la derivata temporale della Ψ e della Ψ^* ⁴⁰. I termini con il laplaciano si compensano, come si può verificare per esempio integrando due volte per parti nel secondo integrale. Pertanto si ottiene

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle &= \int dx \Psi^* \left[V(x) \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} (V(x) \Psi) \right] \\ &= - \int dx \Psi^* \frac{\partial V(x)}{\partial x} \Psi,\end{aligned}$$

che dimostra la (6.5). Anche il valor medio della forza è una quantità reale.

III.7. Spazio degli impulsi e valor medio di un operatore

Il pacchetto di onde associato a una particella libera, in una sola dimensione e con opportuna normalizzazione, può scriversi nella forma:

$$\Psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k) e^{i(kx - \omega t)}. \quad (7.1)$$

Secondo l'interpretazione proposta, la Ψ contiene tutta l'informazione necessaria per calcolare quantità come il valor medio della posizione e dell'impulso mediante espressioni del tipo (6.3) e (6.4).

La (7.1) può essere considerata come lo sviluppo in serie di Fourier della funzione $\Psi(x, t)$ ⁴¹. Sorge il problema di interpretarne i coefficienti $A(k)$. Si consideri:

⁴⁰ Si è anche supposto $V^*(x) = V(x)$.

⁴¹ Per le trasformate di Fourier, cfr. il paragrafo A.3.

Spazio degli impulsi e valor medio di un operatore

$$A(k, t) \equiv A(k) e^{-i\omega t} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi(x, t) e^{-ikx}. \quad (7.2)$$

Se, come si suppone, la Ψ è normalizzata,

$$\int dx |\Psi(x, t)|^2 = 1, \quad (7.3)$$

è anche

$$\int dk |A(k, t)|^2 = \int dk |A(k)|^2 = 1, \quad (7.4)$$

cioè $A(k, t)$ è pure una funzione a quadrato sommabile su \mathbb{R}^3 e normalizzata. Infatti:

$$\begin{aligned} \int dk |A(k, t)|^2 &= \frac{1}{2\pi} \int dk \int dx \int dx' \Psi^*(x, t) \Psi(x', t) e^{ik(x-x')} \\ &= \int dx \int dx' \Psi^*(x, t) \Psi(x', t) \delta(x-x') \\ &= \int dx |\Psi(x, t)|^2 = 1, \end{aligned} \quad (7.5)$$

dove si è utilizzata la rappresentazione di Fourier (A.25) per la delta di Dirac ⁴².

Esiste una certa simmetria tra lo spazio delle posizioni x e la funzione $\Psi(x, t)$ da una parte e lo spazio degli impulsi k e la funzione (7.2) dall'altra. Nello spazio x l'interpretazione di $|\Psi|^2$ come densità di probabilità di presenza della particella permette di attribuire alla (6.3) e alla (6.2) il significato di posizione media; analogamente nello spazio k l'espressione

$$\begin{aligned} \langle p \rangle &\equiv \int dk p |A(k, t)|^2 \\ &= \hbar \int dk k |A(k, t)|^2 \end{aligned} \quad (7.6)$$

può interpretarsi come valore medio dell'impulso. Infatti il risultato (7.6) si può ricavare sostituendo la (7.1) nella definizione (6.4) e operando con la delta di Dirac come nella (7.5):

⁴² La definizione e le proprietà principali della delta di Dirac sono illustrate nel paragrafo A.2.

Verso l'equazione di Schrödinger

$$\begin{aligned}
 \langle p \rangle &= \int dx \Psi^*(x, t) (-i\hbar) \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dk A(k, t) e^{ikx} \\
 &= \frac{\hbar}{2\pi} \int dx \int dk' \int dk A^*(k', t) A(k, t) k e^{i(k-k')x} \\
 &= \hbar \int dk' A^*(k', t) \int dk A(k, t) k \delta(k - k') \\
 &= \hbar \int dk k |A(k, t)|^2.
 \end{aligned}$$

Pertanto $|A(k, t)|^2 dk$ acquista il significato di probabilità che la particella abbia impulso compreso tra $\hbar k$ e $\hbar(k + dk)$, ossia tra p e $p + dp$.

Si calcoli ora la (6.3) sviluppando Ψ con la (7.1):

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \int dx \Psi^*(x, t) x \Psi(x, t) \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \Psi^*(x, t) x \int dk A(k, t) e^{ikx} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \int dk \Psi^*(x, t) A(k, t) \left(-i \frac{\partial}{\partial k}\right) e^{ikx} \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int dx \int dk \Psi^*(x, t) i \frac{\partial A(k, t)}{\partial k} e^{ikx},
 \end{aligned}$$

dove nell'ultimo passaggio si è integrato per parti, con l'ipotesi che $A(k, t)$ si annulli ai limiti, in accordo col fatto che è una funzione a quadrato sommabile. Sostituendo anche Ψ^* si ottiene:

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \frac{1}{2\pi} \int dx \int dk \int dk' A^*(k', t) e^{-ik'x} i \frac{\partial A(k, t)}{\partial k} e^{ikx} \\
 &= \int dk \int dk' A^*(k', t) i \frac{\partial A(k, t)}{\partial k} \delta(k - k') \\
 &= \int dk A^*(k, t) i \frac{\partial}{\partial k} A(k, t),
 \end{aligned} \tag{7.7}$$

avendo utilizzato ancora la definizione (A.25) per la delta di Dirac.

Confrontando i risultati (6.3) e (6.4) con quelli (7.6) e (7.7), si osserva che nel calcolo del valore medio della posizione si è associato l'operatore moltiplicativo x nello spazio delle posizioni e l'operatore $i\hbar\partial/\partial p = i\partial/\partial k$ nello spazio degli impulsi, mentre per il valore medio dell'impulso si è considerato l'operatore $-i\hbar\partial/\partial x$ nello spazio delle posizioni e l'operatore moltiplicativo $p = \hbar k$ nello spazio degli impulsi.

Si è così stabilito un legame tra osservabile fisica, operatore e valore medio, in base al quale la variabile dinamica classica associata all'osservabile fisica viene fatta corrispondere a un operatore nella descrizione quantistica (Tab. 1). Il valore medio di questo operatore, calcolato con la funzione d'onda che risolve l'equazione

Tab. 1. Corrispondenza tra variabili dinamiche classiche e operatori quantistici

variabile dinamica classica	operatore quantistico nello spazio delle posizioni degli impulsi	
x	x	$i\hbar \frac{\partial}{\partial p} = i \frac{\partial}{\partial k}$
p	$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$	$p = \hbar k$
x^n	x^n	$i^n \frac{\partial^n}{\partial k^n}$
p^n	$(-i\hbar)^n \frac{\partial^n}{\partial x^n}$	$(\hbar k)^n$
$L = \mathbf{r} \times \mathbf{p}$	$-i\hbar \mathbf{r} \times \nabla$	$i\hbar \nabla \times \mathbf{k}$
$T = \frac{\mathbf{p}^2}{2m}$	$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$	$\frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}$

di Schrödinger produce un *numero reale* da confrontarsi con la misura della variabile dinamica.

La funzione d'onda che caratterizza lo stato del sistema può essere espressa ugualmente bene nello spazio delle posizioni o nello spazio degli impulsi. La struttura degli operatori dipende dallo spazio scelto per rappresentare la funzione d'onda, ma non ne dipende il loro valore medio che è l'unica quantità della teoria confrontabile con il dato sperimentale. Si sono così individuate due *rappresentazioni equivalenti* per lo stesso stato dinamico del sistema.

In particolare, nello spazio delle posizioni, alla variabile dinamica classica $Q(x)$ corrisponde l'operatore moltiplicativo $Q(x)$ che ha la stessa dipendenza funzionale da x ; il suo valore medio è dato dalla relazione

$$\langle Q(x) \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) Q(x) \Psi(x, t). \quad (7.8)$$

Similmente, a una variabile dinamica classica $Q(p)$, funzione razionale intera di p , corrisponde l'operatore quantistico $Q(-i\hbar \partial/\partial x)$ con la stessa dipendenza funzionale dall'operatore di derivazione; il suo valore medio è dato dalla relazione

Verso l'equazione di Schrödinger

$$\langle Q(p) \rangle = \int dx \Psi^*(x, t) Q(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}) \Psi(x, t). \quad (7.9)$$

Viceversa, nello spazio degli impulsi, alla funzione razionale intera di x , $Q(x)$, corrisponde l'operatore $Q(i\partial/\partial k)$ e alla funzione $Q(p)$ l'operatore moltiplicativo $Q(\hbar k)$. I loro valori medi sono dati, rispettivamente, dalle relazioni

$$\langle Q(x) \rangle = \int dk A^*(k, t) Q(i\frac{\partial}{\partial k}) A(k, t), \quad (7.10)$$

$$\langle Q(p) \rangle = \int dk A^*(k, t) Q(\hbar k) A(k, t). \quad (7.11)$$

Queste considerazioni si estendono immediatamente al caso tridimensionale. Per esempio, nello spazio delle posizioni alle variabili dinamiche classiche di posizione (x, y, z) corrispondono gli operatori moltiplicativi (x, y, z) e alle componenti cartesiane dell'impulso (p_x, p_y, p_z) corrispondono gli operatori di derivazione $(-i\hbar\partial/\partial x, -i\hbar\partial/\partial y, -i\hbar\partial/\partial z)$. Perciò, nello spazio delle posizioni, l'operatore di energia cinetica è proporzionale al laplaciano,

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2, \quad (7.12)$$

mentre nello spazio degli impulsi esso risulta un operatore moltiplicativo:

$$T = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (7.13)$$

Nella traduzione dal classico al quantistico occorre tuttavia prestare attenzione al sistema di coordinate prescelto. Infatti le corrispondenze

$$\mathbf{p} \rightarrow -i\hbar \nabla, \quad T \rightarrow -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \quad (7.14)$$

hanno validità generale quando si usa lo spazio delle posizioni, ma le espressioni esplicite del gradiente, della divergenza e del laplaciano dipendono dal sistema di coordinate prescelto. Passando da coordinate cartesiane a coordinate curvilinee, cioè da una metrica

$$ds^2 = \sum_{i=1}^3 (dx^i)^2$$

a una metrica

$$ds^2 = \sum_{i,k=1}^3 g_{ik} du^i du^k,$$

la divergenza di un vettore \mathbf{v} diventa:

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial v^i}{\partial x^i} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial}{\partial u^i} (\sqrt{g} v^i), \quad (7.15)$$

dove $g = \det\{g_{ik}\}$ ⁴³.

Di conseguenza il laplaciano diventa:

$$\nabla^2 = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x^{i^2}} \rightarrow \frac{1}{\sqrt{g}} \sum_{i,k=1}^3 \frac{\partial}{\partial u^i} \left(\sqrt{g} g^{ik} \frac{\partial}{\partial u^k} \right). \quad (7.16)$$

Esercizio 7.1

Verificare che in un sistema di riferimento ortogonale, individuato dai versori \hat{z}_i e con una metrica di forma ortogonale,

$$ds^2 = \sum_{i=1}^3 (h_i du^i)^2, \quad (7.17)$$

le espressioni del gradiente di una funzione f e della divergenza di un vettore \mathbf{v} risultano:

$$\nabla f = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{h_i} \frac{\partial f}{\partial u^i} \hat{z}_i, \quad (7.18)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left(\frac{\partial v^1 h_2 h_3}{\partial u^1} + \frac{\partial v^2 h_3 h_1}{\partial u^2} + \frac{\partial v^3 h_1 h_2}{\partial u^3} \right). \quad (7.19)$$

⁴³ Si ricorda al proposito la distinzione tra componenti *covarianti* e componenti *controvarianti*: definito $d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^3 (\partial \mathbf{r} / \partial u^i) du^i$ in termini delle sue componenti controvarianti du^i nel sistema di riferimento $\{u^i\}$, le componenti covarianti sono $du_i = \sum_{k=1}^3 g_{ki} du^k$. Il legame inverso, $du^i = \sum_{k=1}^3 g^{ik} du_k$ coinvolge gli elementi reciproci g^{ik} del tensore metrico g_{ik} , cioè i quozienti tra il complemento algebrico dell'elemento g_{ik} e g .

Si veda, per esempio, Bruno Finzi e Maria Pastori: *Calcolo tensoriale e applicazioni*, Zanichelli, Bologna, 1949, cap. IV.

Esercizio 7.2

Tenendo presente che in coordinate polari è

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\phi^2, \quad (7.20)$$

per cui $g = r^4 \sin^2 \theta$, verificare l'espressione acquistata dall'operatore di energia cinetica in coordinate polari:

$$\begin{aligned} T &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \right\} \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Allora, per esempio, la hamiltoniana classica di una particella,

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \quad (7.22)$$

si traduce con queste regole in un operatore quantistico, interpretando in termini operatoriali l'impulso \mathbf{p} e la posizione \mathbf{r} . Se si usa lo spazio delle posizioni, risulta:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}). \quad (7.23)$$

Se $V(\mathbf{r})$ è una funzione razionale intera di \mathbf{r} , nello spazio degli impulsi si ha:

$$H = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V(i\nabla), \quad (7.24)$$

dove ∇ va inteso come il gradiente nello spazio degli impulsi.

In ogni caso l'equazione di Schrödinger (3.20) può scriversi in modo astratto:

$$\left(i \hbar \frac{\partial}{\partial t} - H \right) \Psi = 0, \quad (7.25)$$

senza fare riferimento esplicito alla rappresentazione prescelta. Nella (7.25) H è l'operatore hamiltoniano, somma del contributo di energia cinetica e di energia potenziale, in cui la dipendenza funzionale classica dalle variabili posizione e impulso è sostituita da un'identica dipendenza funzionale quantistica dagli operatori di posizione e impulso corrispondenti allo spazio in cui è definita la Ψ . Adottando lo spazio delle posizioni si ritrova l'espressione (3.20).

Esercizio 7.3

Per una particella libera, verificare che nello spazio degli impulsi la soluzione dell'equazione di Schrödinger è del tipo (7.2), cioè

$$A(k, t) = A(k) e^{-iEt/\hbar},$$

con

$$A(k) = \delta\left(k - \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}\right).$$