

Capitolo 2

Funzione d'onda ed equazione di Schrödinger

Se i corpi luminosi sono carichi d'incertezza, non resta che affidarsi al buio, alle regioni deserte del cielo. Che cosa può esserci di piú stabile del nulla? Eppure anche del nulla non si può essere sicuri al cento per cento. Palomar dove vede una radura del firmamento, una breccia vuota e nera, vi fissa lo sguardo come proiettandosi in essa; ed ecco che anche lí prende forma un qualche granello chiaro (...)

*Italo Calvino
Palomar*

Intorno al 1926 Erwing Schrödinger formulò una teoria fenomenologica che diede un contributo importantissimo allo sviluppo della fisica quantistica, scrivendo per le funzioni d'onda un'equazione analoga alle equazioni della meccanica classica.

Esaminando risultati fenomenologici sulla funzione d'onda, in questo capitolo formuleremo le prime interpretazioni di fenomeni caratteristici della fisica quantistica, quali ad esempio il principio di Heisenberg, l'effetto tunnel e l'esistenza di energie cinetiche minime per gli stati di un sistema fisico.

Cominceremo analizzando le proprietà essenziali che deve possedere la funzione d'onda associata ad una particella materiale, $\Psi(\mathbf{r}, t)$, e successivamente le proprietà dell'equazione adatta a descrivere la propagazione di una

tale funzione d'onda: l'equazione che adotteremo in approssimazione non relativistica è l'equazione di Schrödinger.

2.1 Le proprietà della funzione d'onda

Vediamo a quali proprietà fondamentali devono soddisfare le funzioni d'onda associate a una particella, per essere adatte a interpretare i fatti sperimentali.

Le onde sono onde di probabilità; quindi vogliamo che laddove l'ampiezza dell'onda è grande, più facile sia trovare la particella. Il modo più semplice è imporre la proporzionalità tra l'ampiezza dell'onda e la probabilità w :

$$dw(\mathbf{r}, t) \propto |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = \Psi^*(\mathbf{r}, t)\Psi(\mathbf{r}, t) dV \quad (2.1)$$

che esprime la probabilità di trovare la particella nel volume dV . La relazione di proporzionalità nell'equazione precedente diviene una relazione di uguaglianza se si impone (dove possibile) la condizione di normalizzazione:

$$\int_V dV |\Psi(\mathbf{r}, t)|^2 = 1$$

normalizzando la $\Psi(\mathbf{r}, t)$ mediante un opportuno fattore.

Inoltre imporreemo che le $\Psi(\mathbf{r}, t)$ siano funzioni continue con derivate parziali prime continue in ogni punto dello spazio.

Per spiegare i risultati dell'interferenza delle onde materiali e per motivi di semplicità è desiderabile che per le funzioni d'onda valga il principio di sovrapposizione. Questa proprietà, che viene riscontrata normalmente in elettromagnetismo (si pensi alla luce), può essere descritta affermando che se due funzioni d'onda $\Psi_1(\mathbf{r}, t)$ e $\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ sono valide descrizioni di una particella, lo è anche la loro combinazione lineare $c_1\Psi_1(\mathbf{r}, t) + c_2\Psi_2(\mathbf{r}, t)$ con c_1 e c_2 numeri complessi.

2.2 L'equazione di Schrödinger

La teoria dell'equazione di Schrödinger riguarda un'equazione d'onda che deve descrivere le onde materiali associate a una particella secondo l'ipotesi di Louis de Broglie.

La funzione d'onda è una funzione a valori complessi della posizione e del tempo. In base a quanto detto precedentemente, l'equazione della quale essa è soluzione dovrà essere lineare; in particolare, se a una definita funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ corrisponde un definito stato di moto della particella, anche la funzione $e^{i\gamma}\Psi(\mathbf{r}, t)$, dove γ è una costante reale arbitraria, descriverà lo stesso stato: il significato fisico di entrambe sarà identico per la (2.1). Quindi a ogni funzione d'onda corrisponde uno stato di moto univoco della particella, mentre l'inverso è vero a meno di un fattore complesso di valore assoluto 1.

Nel seguito per semplicità ci restringeremo ad un problema unidimensionale. Consideriamo dapprima una particella libera di massa m , in moto lungo l'asse x con una quantità di moto p . La sua energia sarà

$$E = \frac{p^2}{2m}. \quad (2.2)$$

Per le note relazioni di Planck e de Broglie la (2.2) diventa:

$$\hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.3)$$

Se ipotizziamo che la $\Psi(x, t)$ come onda piana abbia forma matematica $\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}$, derivando rispetto al tempo otteniamo:

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega \Psi(x, t) \quad (2.4)$$

mentre se deriviamo due volte rispetto alla direzione del moto x otteniamo:

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 \Psi(x, t). \quad (2.5)$$

Sostituendo dalle (2.4) e (2.5) nella (2.3) otteniamo infine:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}, \quad (2.6)$$

che è proprio l'equazione di Schrödinger cui deve soddisfare la funzione d'onda di particelle libere non relativistiche. Essa corrisponde a quella che in meccanica classica si direbbe l'equazione del moto a potenziale costante.

In presenza di un potenziale si ottiene, aggiungendo al termine cinetico nella (2.3) l'energia potenziale $U(x, t)$:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x, t) \Psi(x, t). \quad (2.7)$$

Nel caso tridimensionale l'equazione precedente diviene naturalmente:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.8)$$

dove ∇^2 è il laplaciano.

2.2.1 Nota sugli operatori

Osserviamo che nell'equazione di Schrödinger tutto funziona come se si fosse sostituito alla componente della quantità di moto lungo l'asse x l'operatore

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x},$$

che agisce sulla funzione d'onda.

Questo è vero in generale (come vedremo in un capitolo successivo): in meccanica quantistica alle osservabili sono associati opportuni operatori.

L'operatore momento angolare

In analogia con la meccanica classica, definiamo l'operatore momento angolare dalla

$$\hat{\mathbf{L}} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \mathbf{r} \times \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{y}}, \frac{\partial}{\partial \mathbf{z}} \right).$$

In coordinate polari il quadrato dell'operatore momento angolare si esprime come

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2 \left(\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right). \quad (2.9)$$

2.3 L'equazione di Schrödinger stazionaria

L'equazione di Schrödinger è un'equazione alle derivate parziali; in casi particolari essa può essere risolta attraverso la tecnica di separazione delle variabili.

Per il momento limitiamoci per semplicità al caso unidimensionale. Supponiamo che il potenziale sia indipendente dal tempo, $U(x, t) = U(x)$; la (2.7) diviene:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + U(x) \Psi(x, t). \quad (2.10)$$

Proviamo una soluzione nella quale la $\Psi(x, t)$ si possa scrivere come prodotto di una $\phi(t)$ dipendente solo dal tempo ed una $\psi(x)$ solo dalla variabile posizione x ,

$$\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t).$$

Sostituendo nella (2.10) otterremo:

$$i\hbar \frac{\partial(\psi(x)\phi(t))}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2(\psi(x)\phi(t))}{\partial x^2} + U(x)(\psi(x)\phi(t)).$$

Calcolando la derivata seconda spaziale e la prima temporale avremo:

$$i\hbar\psi(x) \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = \phi(t) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) \right).$$

Dividendo infine ambo i membri per $\Psi(x, t) = \psi(x)\phi(t)$ separiamo le variabili:

$$\frac{i\hbar}{\phi(t)} \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m\psi(x)} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + U(x).$$

I due membri dell'uguaglianza dipendono rispettivamente solo dalle coordinate temporali e spaziali. Essendo uguali, essi devono essere uguali a una costante; chiamiamola E . Si hanno quindi le due equazioni differenziali ordinarie:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2\psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\psi(x) &= E\psi(x) \\ i\hbar \frac{\partial\phi(t)}{\partial t} &= E\phi(t), \end{aligned}$$

che, poiché la ϕ dipende solo da t e la ψ solo da x , possono essere scritte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.11)$$

$$i\hbar \frac{d\phi(t)}{dt} = E\phi(t), \quad (2.12)$$

Risolviamo la semplice (2.12) separando le variabili. Otteniamo:

$$\phi(t) = e^{-i\frac{Et}{\hbar}};$$

poiché $\hbar\omega$ eguaglia l'energia della particella, E si identifica con l'energia totale.

La soluzione dell'equazione di Schrödinger per un potenziale indipendente dal tempo è dunque una funzione del tipo

$$\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-i\frac{Et}{\hbar}}$$

dove la $\psi(x)$ viene dalla soluzione della (2.11), che è detta equazione di Schrödinger stazionaria. Si noti che la (2.11) è un'equazione agli autovalori; le funzioni che la risolvono vengono chiamate autofunzioni (eigenfunctions).

Il caso più semplice di moto in una dimensione si ha per un valore di potenziale costante (particella libera); senza ledere la generalità possiamo porre $U(x) = 0$. L'equazione stazionaria diventa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x).$$

Le autofunzioni e le funzioni d'onda sono legate dalla nota relazione $\Psi(x, t) = \psi(x)e^{-iEt/\hbar}$.

Sappiamo che gli autovalori sono uguali all'energia totale E della particella; per quanto detto precedentemente sono accettabili le soluzioni tali che $E \geq 0$. È nota anche la struttura matematica di una possibile funzione d'onda soluzione di questo problema, l'onda piana:

$$\Psi(x, t) = e^{i(kx - \omega t)}.$$

Se risolviamo l'equazione stazionaria otteniamo

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx} \quad (k = \sqrt{2mE}/\hbar)$$

e dunque

$$\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} + Be^{-i(kx + \omega t)}$$

con $k = \sqrt{2mE}/\hbar$.

La soluzione più generale è dunque la combinazione lineare di una funzione d'onda corrispondente a una particella che viaggia nel verso positivo delle x e di una che viaggia nel verso negativo delle x , entrambe delocalizzate (la probabilità $|\Psi^*\Psi|$ di trovarle in un punto qualunque non dipende da x).

2.4 L'equazione di Schrödinger e la buca di potenziale

La configurazione del potenziale in questo caso è descritta nella Figura 2.1. La situazione è la seguente :

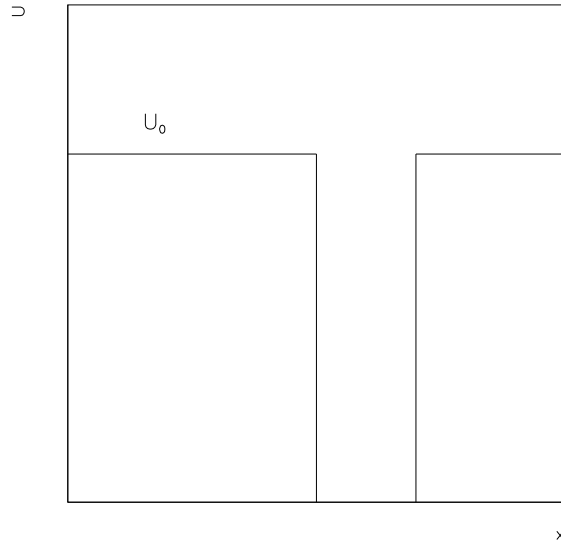


Figura 2.1: Buca di potenziale.

$$U(x) = \begin{cases} U_0 & x < 0; \\ 0 & 0 \leq x \leq a; \\ U_0 & x > a \end{cases}$$

Tale situazione viene detta buca di potenziale di pareti finite, e una particella materiale viene confinata nella regione $0 < x < +a$ fra due valori costanti finiti U_0 del potenziale.

Qui nel seguito studieremo il caso limite in cui la barriera ha pareti d'altezza infinita, e quindi la particella è confinata nella regione $0 < x < a$:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & 0 \leq x \leq a; \\ \infty & \text{altrimenti.} \end{cases}$$

Cerchiamo stati stazionari, cioè soluzioni della

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi,$$

con $\psi(0) = \psi(a) = 0$ poiché $\psi = 0$ dove U è infinita. Si ottiene

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin \frac{n\pi x}{a} \quad (2.13)$$

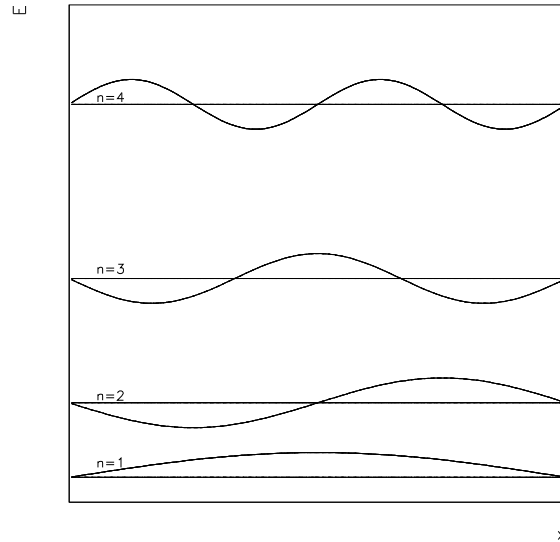


Figura 2.2: Autofunzioni concesse per la buca di potenziale infinita e livelli di energia.

con

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

e n intero *positivo* (per $n = 0$ l'autofunzione non è normalizzabile).

Le energie concesse sono dunque quantizzate come i livelli energetici degli elettroni nell'atomo di idrogeno (l'energia è proporzionale al quadrato di un numero quantico n). Si nota inoltre che lo stato di minima energia ($n = 1$) ha energia cinetica maggiore di 0.

Le autofunzioni stabili sono illustrate in Figura 2.2 e corrispondono agli stati stazionari.

2.4.1 Nota sugli stati legati

L'equazione di Schrödinger stazionaria è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + U(x)\psi = E\psi,$$

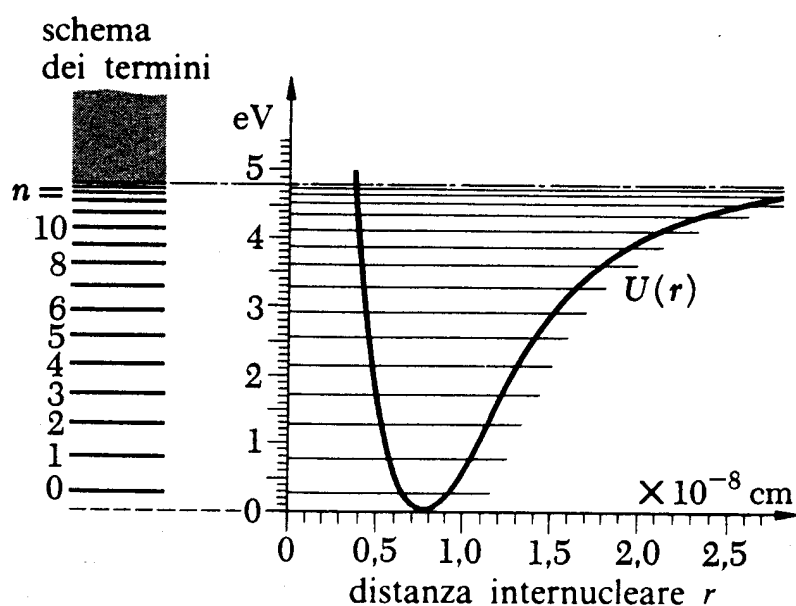


Figura 2.3: Energia potenziale per una molecola biatomica, e spettro degli autovalori.

con $U \rightarrow U_0$ per $x \rightarrow \pm\infty$. Se $E > U_0$, entrambe le soluzioni sono oscillanti e non ci sono stati legati; tutti gli stati energetici sono concessi (spettro continuo). Se $E < U_0$, c'è una soluzione fisicamente valida per gli *autovalori* dell'energia E .

La figura 2.3 rappresenta un esempio: il potenziale di interazione di una molecola biatomica in funzione della distanza (per una soluzione approssimata nell'intorno della posizione di equilibrio si veda il capitolo 4).

2.4.2 Estensione al caso bidimensionale

E' un'importante estensione del caso precedente. Ora la particella è vincolata da una barriera di energia infinita a rimanere in un piano xy (ad esempio un quadrato di lato a). La soluzione dell'equazione di Schrödinger segue la stessa strategia delineata nel caso in una dimensione, anche se ora si tratta di estendere lo schema ad un problema a due variabili:

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} + U(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y).$$

24 CAPITOLO 2. FUNZIONE D'ONDA ED EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

La soluzione di quest'equazione richiede opportune tecniche di separazione delle variabili. Il buon senso ci suggerisce comunque di ammettere che la densità di probabilità fuori dalla buca sia identicamente nulla. All'interno si usa come soluzione di prova una funzione fattorizzata, $\psi(x, y) = f(x)g(y)$, dove f e g sono funzioni esattamente del tipo ottenuto nel caso unidimensionale:

$$\begin{aligned}f(x) &= A_x \sin k_x x + B_x \cos k_x x \\g(y) &= A_y \sin k_y y + B_y \cos k_y y,\end{aligned}$$

e i numeri d'onda k_x, k_y sono ora richiesti separatamente soddisfare alle condizioni di stazionarietà perché la soluzione di prova sia accettabile. Applicando le condizioni di continuità ai bordi, $\psi(0, y) = \psi(x, 0) = \psi(a, y) = \psi(x, a) = 0$ si ottiene ancora una situazione di stazionarietà di onde in due dimensioni (analogamente al caso della vibrazione di una membrana piana vincolata ai bordi, come la pelle di un tamburo). In corrispondenza i numeri d'onda k risultano quantizzati, e l'energia è ancora quantizzata ed assegnabile in funzione di due numeri quantici. La funzione d'onda normalizzata che si ottiene è

$$\psi(x, y) = \frac{2}{a} \sin(n_x \pi x / a) \sin(n_y \pi y / a)$$

e l'energia

$$E = E(n_x, n_y) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2ma^2} (n_x^2 + n_y^2) = E_0 (n_x^2 + n_y^2).$$

Osserviamo che vi sono coppie di numeri quantici differenti (dunque differenti funzioni d'onda) che danno la stessa energia. I valori $(n_x, n_y) = (2, 1)$ e $(n_x, n_y) = (1, 2)$ danno entrambi $E = 5E_0$. Questo è un primo esempio di degenerazione quantistica. Il caso appena citato è tutto sommato accettabile in quanto le due coppie di numeri quantici corrispondono ad uno scambio degli assi coordinati. In realtà la situazione può essere più complessa: le coppie $(n_x, n_y) = (1, 7)$ e $(n_x, n_y) = (5, 5)$ corrispondono alla stessa energia, $50E_0$. Ma le funzioni d'onda (e i loro moduli quadrati) sono di natura sostanzialmente differenti. La degenerazione è tipica di sistemi a più dimensioni (in realtà esistono affascinanti connessioni fra la simmetria di un sistema fisico e le possibili degenerazioni quantistiche).

Quanto detto si estende banalmente al caso di una buca di potenziale tridimensionale.

2.5 Il principio d'indeterminazione (di Heisenberg)

Abbiamo visto che a differenza del caso classico, una particella confinata in un segmento di lunghezza $a = 2\Delta x$ non può stare ferma. La sua quantità di moto è incerta (non è noto il verso), e la minima incertezza possibile vale

$$\Delta p_x = 2 \cdot \sqrt{2mE_1} = 2 \frac{\hbar\pi}{a} = \frac{h}{2\Delta x} \quad (2.14)$$

In generale si dimostra che, chiamando Δx lo scarto quadratico medio della coordinata x e Δp_x lo scarto quadratico medio della componente della quantità di moto lungo x

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Anche nel caso dell'oscillatore armonico l'energia minima risulta compatibile con tale indeterminazione.

La relazione sopra enunciata viene chiamata em principio d'indeterminazione posizione-momento.

Anche tra energia e tempo in cui quest'energia viene misurata esiste un'analogia relazione d'indeterminazione. Infatti un'onda è esprimibile come una funzione $f(kx - \omega t)$: tutte le considerazioni fatte per la coppia di variabili $(p = \hbar k, x)$ valgono per la coppia $(E = \hbar\omega, t)$. Si avrà dunque in particolare

$$\Delta t \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.15)$$

L'energia non è quindi misurabile al meglio di $\sim \hbar/\Delta t$, e questo è anche il limite intrinseco alla conservazione dell'energia. Su una scala di tempo Δt , si possono produrre quanti di energia *virtuali* fino a $\hbar/\Delta t$.

2.5.1 Interpretazione del principio d'indeterminazione

In un'onda piana la lunghezza d'onda (o il numero d'onda, k) sono perfettamente definiti, e l'onda è totalmente delocalizzata nello spazio. Essa non sembra dunque adatta a descrivere una particella nel senso di de Broglie. A prescindere da questo aspetto, è peraltro chiaro che sovrapponendo due onde piane di diversa lunghezza d'onda si assiste ad un fenomeno più o

meno marcato di battimento: l'onda risultante tende periodicamente a localizzarsi in corrispondenza delle interferenze costruttive. Aggiungendo altre lunghezze d'onda la sovrapposizione tende sempre più a concentrarsi, fino ad assumere l'aspetto di un pacchetto localizzato in una zona di ampiezza Δx . La posizione viene determinata sempre meglio a spese della lunghezza d'onda, in modo che $\Delta x \Delta k \sim 1$: se l'onda è poco sparpagliata, è difficile ottenere una stima precisa della sua lunghezza d'onda e viceversa. Lo stesso discorso è fattibile nel dominio del tempo: per un'onda viaggiante, la determinazione precisa della frequenza temporale richiede un tempo lungo di ripetizioni cicliche ovvero, se l'onda dura poco tempo, la sua frequenza sarà male determinata: $\Delta t \Delta \omega \sim 1$. E' ora possibile estendere queste regole di indeterminazione all'onda di de Broglie con fondamentali conseguenze nella comprensione fisica del modello ondulatorio della materia.

Tenuto conto che $p = \hbar k$, dalla $\Delta x \Delta k \sim 1$ si ottiene $\Delta x \Delta p_x \sim \hbar$. Analogamente, dalla $E = \hbar \omega$ e dalla $\Delta t \Delta \omega \sim 1$ si ottiene $\Delta t \Delta E \sim \hbar$. Queste due relazioni costituiscono la forma (rispettivamente spazio-momento ed energia-tempo) del principio di indeterminazione di Heisenberg. In pratica esso stabilisce l'impossibilità di determinare simultaneamente con precisione assoluta posizione e velocità (energia e tempo) di una particella. Le implicazioni sono profonde: è facile accettare e comprendere l'indeterminazione spaziale di un'onda del mare (viste le argomentazioni classiche sulle onde piane sopra descritte), ma per una particella materiale questo è molto più complicato e comunque al di fuori della portata del senso comune. Di fatto è la natura stessa che impone un limite all'accuratezza con la quale possiamo effettuare misure. Considerando ad esempio un elettrone con velocità lungo x pari a $3.6 \cdot 10^6$ m/s, nota con precisione dell'1%, la precisione nella posizione lungo x stimata a partire da: $p_x = 3.310^{-24}$ Kg m/s, $\Delta p_x = 3.310^{-26}$ Kg m/s, $\Delta x \simeq \hbar / \Delta p_x = 0.5 \cdot 10^{-9}$ m (dell'ordine del diametro atomico).

Insomma la rappresentazione ondulatoria implica che, per descrivere una particella localizzata nello spazio, abbiamo bisogno della combinazione lineare di onde con diversi numeri d'onda \mathbf{k} . Il numero d'onda \mathbf{k} corrisponde, attraverso la relazione di de Broglie $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, alla quantità di moto: quindi la quantità di moto di una particella localizzata nello spazio non potrà essere ben definita.

Se si prepara un sistema fisico in un certo modo, potremo misurare grandezze rilevanti entro la loro indeterminazione. Ripetendo la misura si otterranno valori differenti, anche se lo stato iniziale del sistema è lo stesso. Si evidenziano dunque forti connessioni con la teoria della probabilità e sta-

tistica: è impossibile prevedere il singolo evento, ma con tante misure (o con tanti sistemi eguali) si giunge ad una distribuzione di probabilità. La meccanica quantistica fornisce l'apparato matematico per calcolare tali distribuzioni. C'è una differenza critica fra statistica e meccanica quantistica: nella prima l'indeterminismo è causato dalla incompleta conoscenza del sistema all'inizio, nella seconda l'indeterminismo è intrinseco alla natura, insuperabile. L'ampiezza dell'onda di de Broglie è collegata alla probabilità di trovare la particella: così come la probabilità di trovare il fotone di Planck è proporzionale al modulo quadro dell'ampiezza del campo elettrico dell'onda, la probabilità quantistica è proporzionale al modulo quadro dell'ampiezza d'onda di de Broglie.

2.6 Soluzione per altri potenziali unidimensionali costanti a tratti

Cominciamo a rassegna le soluzioni dell'equazione di Schrödinger stazionaria in una dimensione per altri tipi di potenziale $U(x)$. Accenneremo anche alle conferme sperimentali delle previsioni teoriche ottenute.

2.6.1 Gradino di potenziale

Nella Figura 2.4 viene schematizzato il problema di una particella libera che procedendo secondo le x crescenti incontra un potenziale costante $U(x) = U_0$. Questa configurazione viene detta del gradino di potenziale.

Il potenziale è così definito:

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ U_0 & \text{altrove.} \end{cases}$$

Fisicamente questa situazione approssima il potenziale per un elettrone in un metallo in prossimità della superficie. All'interno del metallo l'elettrone è sottoposto all'azione di un potenziale costante, mentre fuori dalla superficie incontra un potenziale bruscamente superiore.

Distinguiamo due casi:

1. la particella proveniente dalle x negative ha energia cinetica $E < U_0$.
Classicamente la situazione viene descritta mediante una forza di tipo impulsivo che per un tempo brevissimo agisce sulla particella nella

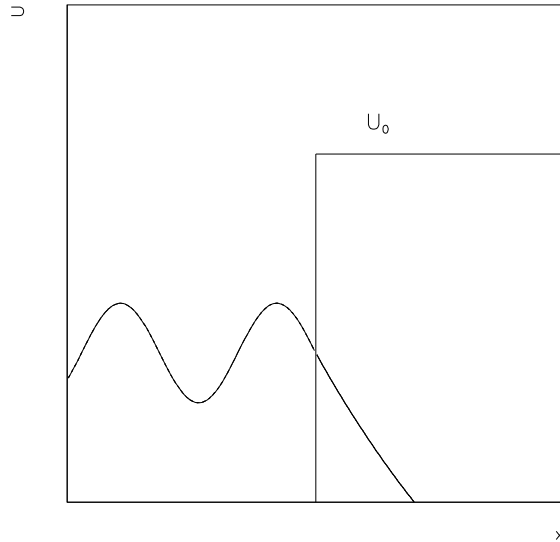


Figura 2.4: Gradino di potenziale.

posizione $x = 0$, nel verso delle x decrescenti, e che determina per il teorema dell'impulso una variazione finita del momento della particella. La particella non può penetrare nella regione delle x positive poiché la sua energia cinetica diverrebbe negativa. Quindi secondo la meccanica classica la particella deve invertire il verso del suo moto e “rimbalzare” sul gradino di potenziale con un momento uguale in modulo ed opposto in verso a quello di incidenza, conservando l'energia cinetica $E = p^2/2m$. Nel punto d'inversione $x = 0$ e $p = 0$.

Nel caso quantistico scriviamo l'equazione di Schrödinger stazionaria per le due regioni:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = E\psi(x) \quad (x < 0) \quad (2.16)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + U_0\psi(x) = E\psi(x) \quad (x \geq 0). \quad (2.17)$$

Si risolvono separatamente queste due equazioni raccordando le soluzioni per $x = 0$ dove le autofunzioni dovranno essere univoche, continue

e finite, assieme alle derivate prime. Si arriva alle soluzioni:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \quad (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar); \\ Ce^{k_2x} + De^{-k_2x} & x \geq 0 \quad (k_2 = \sqrt{2m(U_0 - E)}/\hbar) \end{cases}$$

$C = 0$ si ottiene dalla necessità di normalizzabilità; la condizione di continuità fra le autofunzioni e tra le loro derivate nel punto $x = 0$ implica:

$$\begin{cases} D & = A + B \\ -k_2D & = ik_1A - ik_1B \end{cases}$$

Si ha dunque

$$\begin{cases} A & = \frac{D}{2}(1 + i\frac{k_2}{k_1}) \\ B & = \frac{D}{2}(1 - i\frac{k_2}{k_1}) \end{cases}$$

Le funzioni d'onda corrispondenti sono

$$\begin{cases} \frac{D}{2}(1 + i\frac{k_2}{k_1})e^{ik_1x}e^{-i\omega t} + \frac{D}{2}(1 - i\frac{k_2}{k_1})e^{-ik_1x}e^{-i\omega t} & x < 0 \\ De^{-k_2x}e^{-i\omega t} & x \geq 0 \end{cases}$$

L'interpretazione fisica della prima è che per la regione delle $x < 0$ la sovrapposizione delle funzioni d'onda forma un'onda stazionaria con un'onda incidente ed una riflessa. Calcoliamo il coefficiente di riflessione R che classicamente è dato dal rapporto fra le ampiezze dell'onda riflessa B e quella A dell'onda incidente. In meccanica quantistica si deve definire $R = vB^*B/vA^*A$, rapporto delle correnti di probabilità definite dalle intensità delle due onde riflessa e incidente, per le rispettive velocità. Si ottiene:

$$R = \frac{B^*B}{A^*A} = \frac{(1 - ik_2/k_1)^*(1 - ik_2/k_1)}{(1 + ik_2/k_1)^*(1 + ik_2/k_1)} = 1.$$

Il valore 1 esprime il risultato che la particella viene sempre riflessa per $E < U_0$, in accordo con la meccanica classica. Tuttavia la previsione quantistica sorprendente è che la probabilità di trovare la particella oltre il gradino non è zero. Infatti nella regione $x > 0$:

$$\Psi^*\Psi = D^*D \times \psi^*\psi \times \phi^*\phi = |D|^2|e^{-2k_2x}$$

con k_2 reale.

La probabilità di trovare la particella a $x > 0$ è finita e nonnulla. Questo fenomeno quantistico viene detto penetrazione nella regione proibita classicamente.

2. la particella proveniente dalle x negative ha energia cinetica $E > U_0$. Classicamente la particella procede con una energia totale E e momento p_1 tale che $E = p_1^2/2m$ nella regione delle $x < 0$ nel verso positivo dell'asse. Nel punto $x = 0$ è sottoposta ad una forza che la rallenta nel suo moto; nella seconda regione ha momento p_2 tale che $(E - U_0) = p_2^2/2m$.

Si avrà

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + Be^{-ik_1x} & x < 0 \quad (k_1 = \sqrt{2mE}/\hbar); \\ Ce^{ik_2x} + De^{-ik_2x} & x \geq 0 \quad (k_2 = \sqrt{2m(E - U_0)}/\hbar) \end{cases}$$

Ricordiamo che classicamente una particella in questa situazione fisica ha probabilità 1 di attraversare il gradino nel punto $x = 0$. Vediamo che cosa accade quantisticamente calcolando come precedentemente le autofunzioni a meno di una ampiezza e poi il coefficiente di riflessione e trasmissione. Se supponiamo dalle condizioni iniziali che non ci sia onda proveniente da $x \rightarrow +\infty$, avremo $D = 0$; dalle condizioni di raccordo in $x = 0$:

$$\begin{cases} C & = A + B \\ k_2 C & = k_1(A - B) \end{cases}$$

Si ha dunque

$$\begin{cases} B & = A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \\ C & = A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} \end{cases}.$$

Le autofunzioni sono quindi

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ik_1x} + A \frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} e^{-ik_1x} & x < 0 \\ A \frac{2k_1}{k_1 + k_2} e^{ik_2x} & x \geq 0 \end{cases}$$

Il primo addendo della $\psi(x)$ per $x < 0$ rappresenta l'onda incidente mentre il secondo l'onda riflessa; la seconda equazione invece rappresenta l'onda trasmessa. Calcoliamo ora $R = vB^*B/vA^*A$, cioè il coefficiente di riflessione quantistico, che rappresenta la probabilità della

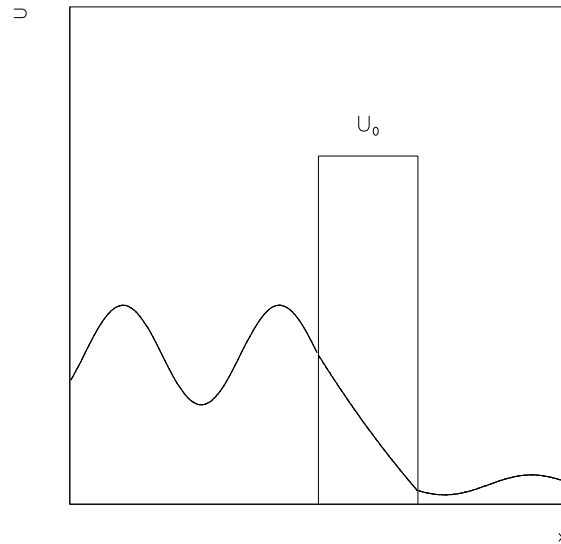


Figura 2.5: Barriera di potenziale, con una visualizzazione dell'effetto tunnel.

particella di essere riflessa nella regione $x < 0$:

$$R = \left(\frac{k_1 - k_2}{k_1 + k_2} \right)^2$$

A differenza del risultato classico, $0 < R < 1$: parte dell'onda viene riflessa. Il coefficiente di trasmissione è $T = 1 - R$.

2.6.2 La barriera di potenziale e l'effetto tunnel

Nella barriera di potenziale (Figura 2.5):

$$U(x) = \begin{cases} 0 & x < 0; \\ U_0 & 0 \leq x \leq a; \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Supponiamo $E < U_0$ e poniamo $k_1 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$ e $k_2 = \sqrt{\frac{2m(U_0-E)}{\hbar^2}}$. Si ha

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ik_1x} + Ae^{-ik_1x} & x < 0; \\ Be^{-k_2x} + Ce^{k_2x} & 0 \leq x \leq a; \\ De^{ik_1x} & x > a, \end{cases}$$

dove il fattore moltiplicativo del primo termine (onda incidente contro la barriera) è stato fissato arbitrariamente all'unità.

Si noti che in questo caso il fattore moltiplicativo C dell'esponenziale con esponente reale e positivo non deve necessariamente annullarsi: l'integrale della funzione non diverge essendo il dominio della funzione stessa di misura finita.

Imponendo le condizioni di continuità abbiamo

$$D = \frac{-4ik_1k_2}{(k_2 - ik_1)^2 e^{(ik_1+k_2)a} - (k_2 + ik_1)^2 e^{(ik_1-k_2)a}}$$

e la probabilità di passare dall'altra parte della barriera (*effetto tunnel*) è proporzionale a

$$|D|^2 = \frac{4k_1^2k_2^2}{(k_1^2 + k_2^2)^2 \sinh^2 k_2a + 4k_1^2k_2^2},$$

che varia come un esponenziale decrescente in k_2a , ma è diversa da zero (per caso: se ne calcoli il valore).

2.7 L'oscillatore armonico in una dimensione

Una situazione molto comune nei modelli fisici sia classici sia quantistici è basata su forze di natura elastica, per la quale il moto è di tipo oscillatorio armonico (per piccole oscillazioni). L'utilità di proporre la soluzione quantistica per questo caso è che esso costituisce un valido punto di partenza per la modellizzazione di sistemi fisici di interesse reale (per piccoli spostamenti dall'equilibrio ogni energia potenziale ha andamento quadratico, $U(x) = kx^2/2$).

Un sistema conservativo a $N > 1$ gradi di libertà può in generale venire diagonalizzato mediante una trasformazione unitaria delle coordinate e scomposto in N sistemi unidimensionali.

L'impostazione classica di questo problema è la seguente. Ponendo lo zero delle coordinate nel punto di equilibrio, la forza può essere descritta al prim'ordine dalla legge di Hooke

$$F = -kx$$

con $k > 0$ ($U(x) \simeq U(0) + \frac{1}{2}kx^2$); si ha dunque per la seconda legge di Newton

$$\frac{d^2}{dt^2}x + \omega^2x = 0$$

con $\omega = 2\pi f = \sqrt{k/m} \Rightarrow k = 4\pi^2 f^2 m$ e dove m è la massa della particella.

Scriviamo ora l'equazione di Schrödinger stazionaria chiamando $\psi(x)$ l'autofunzione incognita:

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) - \frac{4\pi^2 f^2 m^2}{\hbar^2}x^2\psi(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}E\psi(x)$$

e dunque, ponendo $\gamma = 2mE/\hbar^2$ e $\beta = 2\pi m f/\hbar$,

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + (\gamma - \beta^2 x^2)\psi(x) = 0.$$

La soluzione di questa equazione porta a determinare un insieme di possibili valori di γ e cioè dell'energia E . L'equazione differenziale è lineare omogenea ma a coefficienti non costanti. Per il metodo di soluzione si rimanda alla bibliografia (p. es. al testo di Greiner).

Alla fine dei calcoli si determina l'espressione degli autovalori:

$$E_n = hf(n + 1/2) \quad n \in \mathbb{N}_0.$$

Il valore di E differisce da quello della teoria degli oscillatori di Planck per una costante additiva $E_0 = \frac{1}{2}hf = \frac{1}{2}\hbar\omega$. Questo risultato è importante poiché ci dice che nello stato quantistico di energia minima la particella sottoposta al potenziale (l'oscillatore) non può essere ferma, avendo comunque un'energia di punto zero $E_0 > 0$. La presenza di un'energia di punto zero è legata al principio di Heisenberg: valgono considerazioni analoghe a quelle fatte a proposito della buca di potenziale infinita.

L'espressione delle autofunzioni normalizzate è la seguente:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\xi^2/2} H_n(\xi),$$

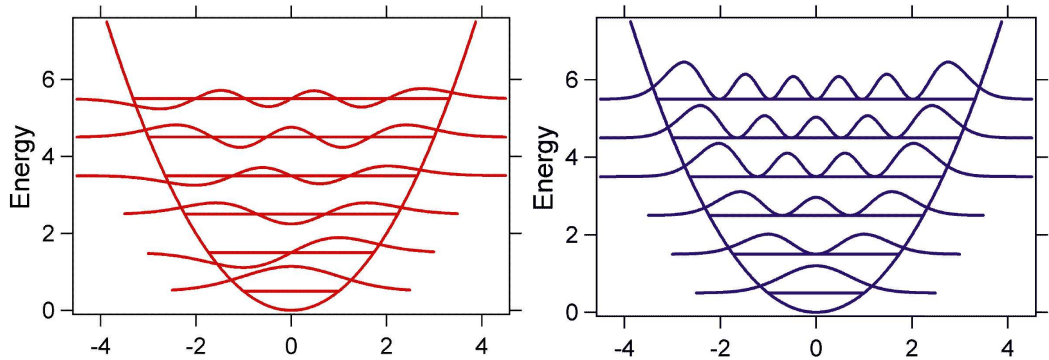


Figura 2.6: Prime autofunzioni dell'oscillatore armonico in funzione dello spostamento x dalla posizione di equilibrio: a sinistra l'autofunzione, a destra la densità di probabilità.

dove $\xi = x\sqrt{\beta}$, le H_n sono i *polinomi di Hermite* definiti dalla

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2} \quad (2.18)$$

e il fattore di normalizzazione vale

$$A_n = \sqrt{\frac{\sqrt{\beta}}{\sqrt{\pi} 2^n n!}}. \quad (2.19)$$

I primi 4 polinomi di Hermite sono:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1 \\ H_1(\xi) &= 2\xi \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2 \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi. \end{aligned}$$

Nella figura 2.6 sono riportati i grafici delle prime autofunzioni dell'oscillatore armonico: la densità di probabilità (in funzione della coordinata x) per n basso è molto diversa rispetto all'occupazione nel caso classico.

La corrispondenza migliora per alti valori di n (si veda la figura 2.7, dove l'andamento classico e quello quantistico sono confrontati per diversi valori di n). L'andamento classico è rappresentato dall'inverso del modulo della velocità, che è proporzionale alla probabilità di trovare il corpo in un punto a un istante di tempo arbitrario.

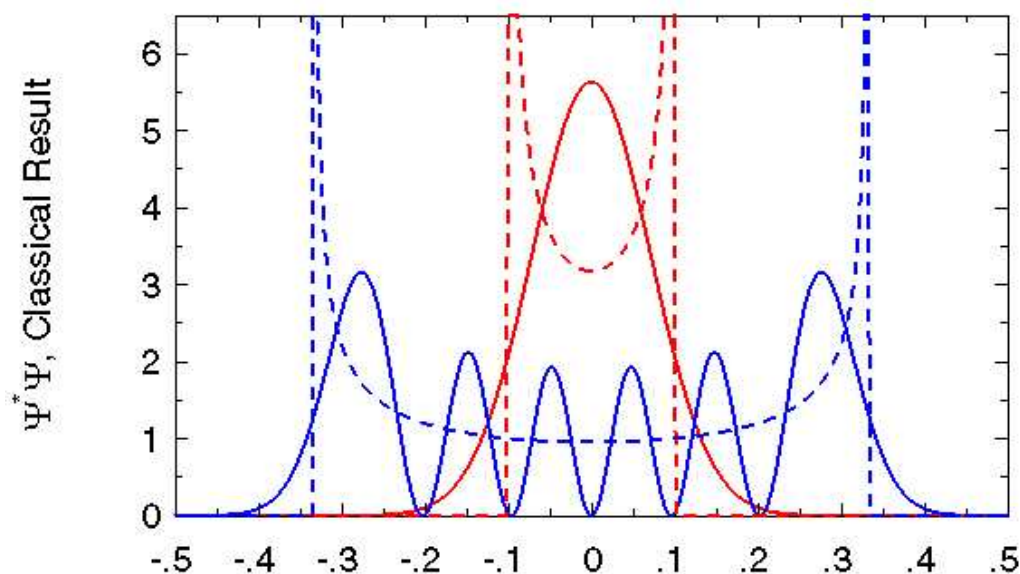


Figura 2.7: Probabilità quantistica (linea continua) e inverso della velocità per la soluzione in meccanica classica (linea tratteggiata) per $n=1$ e $n=6$.

Si noti infine che poiché il potenziale è simmetrico le autofunzioni sono pari o dispari rispetto a un cambiamento di segno della x .

2.7.1 Operatori di creazione e distruzione

Abbiamo visto che le autofunzioni normalizzate per l'oscillatore armonico unidimensionale sono del tipo:

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-(\xi^2/2)} H_n(\xi)$$

Per polinomi di Hermite si ricavano le relazioni:

$$\xi H_n(\xi) = n H_{n-1}(\xi) + \frac{1}{2} H_{n+1}(\xi) \quad (2.20)$$

$$\frac{d}{d\xi} H_n(\xi) = 2n H_{n-1}(\xi). \quad (2.21)$$

Si ricava dalle (2.19), (2.21) e (2.20) che

$$\xi \psi_n = \sqrt{n/2} \psi_{n-1} + \sqrt{(n+1)/2} \psi_{n+1} \quad (2.22)$$

$$\frac{d}{d\xi} \psi_n = 2\sqrt{n/2} \psi_{n-1} - \xi \psi_n \quad (2.23)$$

da cui, inserendo la (2.22) nella (2.23)

$$\frac{d}{d\xi}\psi_n = \sqrt{n/2}\psi_{n-1} - \sqrt{(n+1)/2}\psi_{n+1}, \quad (2.24)$$

che sommata e sottratta alla (2.22) dà:

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right)\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \quad (2.25)$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right)\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}. \quad (2.26)$$

Definiamo i primi membri rispettivamente operatore di distruzione \hat{a} e di creazione \hat{a}^+ :

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi + \frac{d}{d\xi}\right) \quad (2.27)$$

$$\hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\xi - \frac{d}{d\xi}\right). \quad (2.28)$$

Essi operano nel modo seguente:

$$\hat{a}\psi_n = \sqrt{n}\psi_{n-1} \quad (2.29)$$

$$\hat{a}^+\psi_n = \sqrt{n+1}\psi_{n+1}. \quad (2.30)$$

Vediamo come agiscono su un generico stato di numero quantico n : l'operatore di creazione trasforma l'autofunzione dello stato n in quella dello stato immediatamente superiore $n+1$, viceversa l'operatore di distruzione trasforma l'autofunzione dello stato n in quella dello stato immediatamente precedente di numero quantico $n-1$.

I due operatori hanno le seguenti proprietà:

- sono uno l'aggiunto dell'altro;
- $[\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$.

Si ha

$$\psi_n = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}^+)^n\psi_0.$$

Si ha anche

$$\hat{a}^+\hat{a}\psi_n = n\psi_n$$

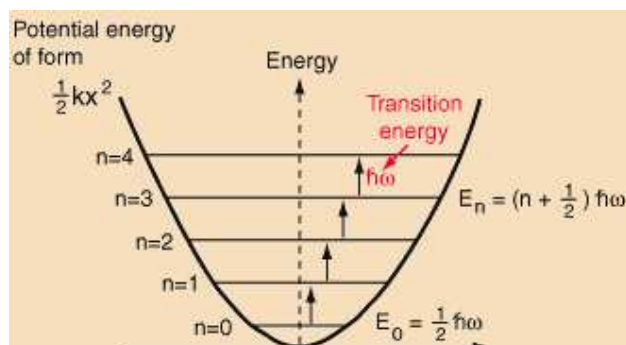


Figura 2.8: Schema della transizione tra livelli mediante assorbimento/emissione di fononi.

per cui possiamo definire l'operatore

$$\hat{N} = \hat{a}^+ \hat{a}$$

che ha gli stessi autovettori dell'hamiltoniano e gli autovalori n . L'operatore hamiltoniano può essere espresso in termini degli operatori di creazione e distruzione mediante la:

$$\hat{H} = hf \left(\hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad (2.31)$$

Se infine applichiamo allo stato fondamentale corrispondente al numero quantico $n = 0$ l'operatore di distruzione \hat{a} otteniamo:

$$\left(\xi + \frac{d}{d\xi} \right) \psi_0 = 0.$$

L'energia dell'oscillatore armonico nello stato generico n è $E_n = hf(n + 1/2)$, dove per $n = 0$ si ottiene l'energia dello stato fondamentale: $E_0 = hf/2$. Quindi lo stato generico ψ_n possiede l'energia E_n più grande di quella minima di nhf . Ogni livello energetico differisce da quelli adiacenti di un quanto hf ; questo quanto per l'oscillatore armonico viene detto *fonone*. Allora si può interpretare l'azione degli operatori \hat{a}^+ , \hat{a} sul generico stato ψ_n come creazione o distruzione di un fonone.

Questi operatori giocano un ruolo fondamentale nella seconda quantizzazione dell'elettrodinamica quantistica (QED), nella quale i quanti dei campi d'onda dell'oscillatore sono i fotoni.

Si osservi che l'energia è quantizzata ed assegnata in termini di un unico numero quantico n secondo la semplice relazione

$$E = E(n) = (n + 1/2)\omega\hbar \text{ dove } \omega = \sqrt{k/m}; n = 0, 1, 2, \dots$$

La sequenza di livelli energetici (lo spettro del sistema) è ora equispaziata (cosa che non accade per la particella in una scatola di energia infinita). Anche qui il livello energetico più basso è maggiore di 0, a differenza del caso classico. Questo è consistente con il principio di Heisenberg.

Problemi

1. Un elettrone è vincolato in una regione unidimensionale di lunghezza dell'ordine di un diametro atomico, 10^{-10}m . Quanta energia (misurata in eV) va fornita all'elettrone per promuoverlo al primo stato eccitato a partire dall'energia più bassa? In questo stato di energia minima, qual è la probabilità di trovare l'elettrone nella regione fra $0.05 \times 10^{-10} \text{ m}$ e $0.15 \times 10^{-10} \text{ m}$?
2. Dimostrare che in una buca quadrata di potenziale a pareti infinitamente alte ed in due dimensioni l'energia è quantizzata e dipende da due numeri quantici secondo la $E = E_0(n_x + n_y)^2$.
3. Calcolare l'intensità di riflessione per una particella che incide contro un gradino di potenziale di altezza U_0 con energia cinetica pari a $E = aU_0$, con $a > 1$. Qual è l'intensità di riflessione nel caso classico?
4. Qual è il significato fisico della condizione di normalizzazione della funzione d'onda?
5. Dimostrare che il valore atteso per x^2 in una buca di energia infinita e larghezza a in una dimensione è dato da $a^2[1/3 - 1/(2n^2\pi^2)]$. Qual è la differenza più importante fra questo risultato ed il valore atteso per x ?