

Ciclo formativo per Insegnanti di Scuola Superiore - anno scolastico 2017-2018

Seconda lezione - Milano, 24 ottobre 2017

LA STRUTTURA FORMALE DELLA MECCANICA QUANTISTICA

Luciano Colombo

Dipartimento di Fisica - Università degli Studi di Cagliari

Cittadella Universitaria, 09042 Monserrato (Ca)

E-mail: luciano.colombo@unica.it

Website: people.unica.it/lucianocolombo

© 2017 Luciano Colombo – AVVERTENZA

La riproduzione, anche parziale, di questa dispensa in qualsivoglia formato cartaceo, elettronico o multimediale è **severamente vietata**.

Eventuali richieste di autorizzazione all'uso di questa Dispensa vanno indirizzate tramite messaggi di posta elettronica direttamente all'Autore.

Presentazione

A circa 100 anni dalla pubblicazione dell'equazione di Schrödinger, l'equazione costitutiva della meccanica quantistica, possiamo a ragione considerare quest'ultima come uno dei pilastri portanti della fisica moderna, con applicazioni che spaziano da problemi di fisica fondamentale alle moderne nanotecnologie.

Attualmente la meccanica quantistica ha raggiunto un grado di raffinata sofisticazione teorica: apparato logico-formale di formidabile robustezza concettuale, formulazione matematica rigorosissima, implementazioni numeriche efficienti e versatili. Le sue predizioni sono tra le più accurate esistenti in campo fisico, con verifiche sperimentali di elevatissima precisione.

Questo stato dei fatti può indurre a sminuire il faticoso, ma entusiasmante, percorso sperimentale e concettuale che ha portato al superamento dei paradigmi classici e al successivo affermarsi della ipotesi quantistica. Il formalismo quanto-meccanico viene in certi contesti presentato addirittura solo in forma assiomatica, prescindendo dal complesso dei fenomeni che l'hanno necessitato.

In questa dispensa riassumerò a grandi linee e in forma semplificata le radici fenomenologiche e i fondamenti teorici della vecchia *fisica dei quanti*, presentandola come un tentativo davvero innovativo di superamento della fisica classica. Gli sviluppi concettuali ad esso connessi presero forma nel primo quarto del XX secolo, allorquando emersero alcune risultanze sperimentali -non spiegabili classicamente- riguardanti problemi di paradigmatica importanza, quali: i calori specifici dei solidi, l'effetto fotoelettrico, lo spettro di emissione di un corpo nero, la diffrazione di elettroni, la stabilità della materia e la natura discreta degli spettri atomici di emissione e assorbimento. Questa parte è completata da una serie di applicazioni a semplici casi di interesse paradigmatico.

Descriverò questo scenario seguendo un criterio storico-concettuale attraverso tre passaggi: la discussione di alcuni esperimenti, la constatazione della inadeguatezza della fisica classica a spiegarli e, infine, l'introduzione di concetti del tutto nuovi e propedeutici alla successivo sviluppo formale della meccanica quantistica. Sebbene questi modelli pre-quantistici siano ovviamente superati alla luce del moderno formalismo quanto-meccanico, a mio avviso essi vanno nondimeno studiati perché (i) conservano intatta la loro valenza educativa e (ii) rendono ragione di un rivoluzionario cambiamento di paradigma scientifico.

La dispensa continua con un secondo capitolo dedicato alla costruzione del formalismo quantistico basata su un ristretto numero di assiomi. Sebbene essi siano formulati in modo astratto, il loro senso fisico trova le radici nella presentazione fenomenologica che li ha preceduti.

È doveroso sottolineare che questa dispensa non rappresenta né un trattato di storia della fisica, né tantomeno un manuale di meccanica quantistica; è da intendere piuttosto come un semplice ausilio didattico offerto agli Insegnanti che seguono questo ciclo di lezioni e come una guida per approfondimenti personali. Lo stile di scrittura è molto conciso e le argomentazioni sono spesso di tipo euristico, lasciando alla cura del Lettore la ricostruzione dettagliata di tutti i passaggi ed il completamento del quadro concettuale. A tal fine è disponibile un gran numero di eccellenti testi dove gli argomenti discussi in questa modesta dispensa sono trattati molto più in dettaglio. Tra i tanti, il mio gusto personale preferisce

1. M. Alonso, E. J. Finn, *Fundamental University Physics* vol.III (Addison-Wesley Publishing Co., 1968)
2. R. Eisberg, R. Resnick, *Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles* (John Wiley & Sons, 1974)
3. D. A.B. Miller, *Quantum mechanics for scientists and engineers* (Cambridge University Press, 2008)

dove si trovano numerosi dettagli, applicazioni, esempi ed esercizi svolti.

NOTE

- In linea generale, ho cercato di giustificare ogni affermazione fatta. A volte la giustificazione prende la forma di una dimostrazione formale, altre volte si utilizzano evidenze sperimentali, altre volte ancora si usano argomenti di analogia con risultati noti.
- Quando ho ritenuto non essenziale dimostrare un certo risultato (avendo stimato inutilmente complesso il doverlo fare) ho inserito una chiara indicazione della cosa.
- Al fine di aumentare la leggibilità della dispensa ho adottato alcuni artifici grafici: (i) ogni capitolo si apre con un *syllabus*; (ii) le parole-chiave sono evidenziati in colore blu; (iii) i risultati più significativi sono evidenziati con uno sfondo in colore grigio.
- Per quanta cura e attenzione io possa aver messo nel redigere questa dispensa è inevitabile che abbia commesso errori. Invito il Lettore a segnalarmeli (a mezzo posta elettronica), senza alcun timore di risultare né inopportuno né sgradito. Al contrario, apprezzerò ogni segnalazione intesa a migliorare questa dispensa e sarò riconoscente per avermela inviata.

Indice

Costanti fisiche	6
1 La struttura formale della meccanica quantistica	7
1.1 Un'equazione per le onde di materia	8
1.2 I postulati fondamentali	8
2 Semplici applicazioni del formalismo quantistico	14
2.1 La particella libera	15
2.2 La particella confinata	15
2.2.1 Applicazione ingegneristica: lo schema concettuale del laser a pozzo quantico . . .	16
2.3 L'oscillatore armonico	18

Costanti fisiche

Simbolo	Grandezza	Valore
R	costante universale dei gas	8.314 J K^{-1}
\mathcal{N}_A	numero di Avogadro	6.022×10^{23}
k_B	costante di Boltzmann	$1.3807 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
$k_B T$	a temperatura $T=293\text{K}$	$4.05 \times 10^{-21} \text{ J}$
m_e	massa elettrone	$9.11 \times 10^{-31} \text{ Kg}$
m_p	massa protone	$1.67 \times 10^{-27} \text{ Kg}$
e	carica elettrone	$1.60 \times 10^{-19} \text{ C}$
e/m	rapporto carica/massa elettrone	$1.76 \times 10^{11} \text{ C Kg}^{-1}$
h	costante di Planck	$6.62 \times 10^{-34} \text{ J s}$
\hbar	$h/2\pi$	$1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}$
c	velocità della luce nel vuoto	$3.00 \times 10^8 \text{ m s}^{-1}$
σ	costante di Stefan	$5.67 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
\mathcal{R}	costante di Rydberg	109677 cm^{-1}
μ_B	magnetone di Bohr	$9.27 \times 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$

Capitolo 1

La struttura formale della meccanica quantistica

Syllabus - In questo capitolo discuteremo le basi concettuali e formali della meccanica quantistica. Inizieremo con un argomento di carattere fenomenologico che, tuttavia, ci consentirà di ricavare -almeno sotto ipotesi semplificatrici opportune- l'equazione costitutiva della meccanica delle onde materiali.

Successivamente, abbandoneremo l'approccio storico-fenomenologico in precedenza adottato per passare ad una formulazione di tipo assiomatico. La fondatezza dei postulati enunciati sarà provata euristica-mente tramite la loro applicazione a specifici problemi di fisica atomica discussi nella terza lezione del ciclo.

Il formalismo matematico è sviluppato deliberatamente a un livello elementare, senza tuttavia perdere in rigore concettuale. In particolare, eviteremo di addentrarci nella teoria degli operatori quantistici e nella formulazione matriciale della meccanica quantistica.

Per approfondimenti sugli aspetti operatoriali e matriciali si rimanda ad una diversa dispensa attualmente in preparazione.

1.1 Un'equazione per le onde di materia

Pur acquisita la nozione che a livello microscopico le particelle debbano essere trattate come fenomeno ondulatorio, ancora non disponiamo di una equazione costitutiva che ne descriva il comportamento.

Per ricavarla, partiremo dall'assunto che **tutti i fenomeni ondulatori, di qualsivoglia natura, sono descritti dall'equazione di d'Alembert**. Questo assunto è ampiamente convalidato dal successo di questa equazione nello spiegare fenomeni ondulatori di varia natura fisica, quali onde meccaniche (propagazione del suono, onde di compressione nei solidi, onde superficiali nei liquidi) e onde elettromagnetiche: noi assumeremo che sia parimenti valida per le onde di materia.

Per semplicità di dimostrazione considereremo il caso di un elettrone di massa m in moto unidimensionale lungo la direzione x con velocità v e lunghezza d'onda di de Broglie $\lambda = h/mv$. Conveniamo quindi di chiamare $\Psi(x, t)$ l'ampiezza dell'onda di materia che lo descrive nel punto x al tempo t . Sotto queste ipotesi possiamo scrivere l'equazione di d'Alembert per un'onda materiale

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} = 0 \quad (1.1)$$

Assumendo una dipendenza dal tempo di tipo armonico $\Psi(x, t) = \psi(x) \exp(i\omega t)$ si ottiene per sostituzione

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{\omega}{v}\right)^2 \psi(x) = 0 \quad (1.2)$$

dove $\omega = vk = v 2\pi/\lambda$ avendo indicato con $k = 2\pi/\lambda$ il vettore d'onda associato all'onda materiale che descrive l'elettrone. Usando la relazione di de Broglie si ottiene $v = \hbar\omega/mv$ dove abbiamo introdotto il nuovo simbolo $\hbar = h/2\pi$. Sostituendo questo valore di v in eq.(1.2) otteniamo

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \left(\frac{mv}{\hbar}\right)^2 \psi(x) = 0 \quad (1.3)$$

Se ora immaginiamo che l'elettrone sia soggetto ad un potenziale $V(x)$, la sua energia totale E si scrive come $E = mv^2/2 + V(x)$ e quindi l'eq.(1.3) può essere riscritta come

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - V(x)] \psi(x) = 0 \quad (1.4)$$

che riorganizzata opportunamente assume l'aspetto della

equazione per le onde di materia (in una dimensione)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (1.5)$$

Questa è l'equazione costitutiva della meccanica dell'onda materiale che descrive le particelle microscopiche.

A rigore osserviamo che la dimostrazione qui fornita ha valore solo euristico. Nelle trattazioni più formali e complete matematicamente -tipo quella sviluppata per assiomi nel prossimo Capitolo- si dimostra che l'equazione per l'onda di materia assume la forma data in eq.(1.5) solo sotto certe ipotesi aggiuntive. In ogni caso, essa rappresenta solo una parte dell'edificio concettuale della meccanica quantistica.

1.2 I postulati fondamentali

Consideriamo un sistema fisico (un atomo, una molecola, un solido, ...) formato da N particelle le cui coordinate indicheremo con $\{x_1, x_2, \dots, x_N; y_1, y_2, \dots, y_N; z_1, z_2, \dots, z_N\}$. Senza perdere di generalità possiamo per il momento supporre di riferirci a coordinate cartesiane.

1. **Primo postulato: la funzione d'onda.** Lo stato fisico del sistema¹ è descritto dalla

¹Con la locuzione "stato fisico di un sistema" noi intendiamo quell'insieme di informazioni che caratterizzano la totalità delle grandezze fisiche associate al sistema.

funzione d'onda

$$\Psi = \Psi(x_1, x_2, \dots, y_1, y_2, \dots, z_1, z_2, \dots; t) \quad (1.6)$$

che dipende da tutte le coordinate associate ai diversi gradi di libertà e dal tempo. Questa funzione è chiamata **funzione d'onda** o **funzione di stato** del sistema considerato. La funzione d'onda $\Psi(x_1, x_2, \dots; t)$ è una funzione a valore complesso e, pertanto, indicheremo con $\Psi^*(x_1, x_2, \dots; t)$ la sua complessa coniugata.

Alla funzione d'onda attribuiamo la seguente proprietà: il prodotto

$$\Psi\Psi^*d\tau = |\Psi|^2dV \quad (1.7)$$

rappresenta **la probabilità di trovare al tempo t il sistema entro l'elemento di volume dV** .

L'attribuzione di questo significato probabilistico a Ψ - dovuta al fisico M. Born - ne determina immediatamente alcune proprietà matematiche importanti. Innanzitutto, visto che $|\Psi|^2dV$ rappresenta una *probabilità di presenza*, è necessario che $|\Psi|^2$ sia una funzione *a un solo valore reale, continua* e tale per cui

$$\int_{\text{spazio accessibile}} |\Psi|^2dV = 1 \quad (1.8)$$

Questa relazione costituisce la **condizione di normalizzazione della funzione d'onda** e ha un preciso significato fisico: essa impone che la probabilità di trovare il nostro sistema in un punto qualsiasi *dello spazio ad esso accessibile* è ovviamente pari alla certezza, matematicamente rappresentata dal numero 1. Ciò implica immediatamente che se si considera una porzione limitata di tutto lo spazio disponibile, la probabilità di ivi trovare il sistema fisico è sempre minore di uno. In altre parole, secondo la meccanica quantistica non si può più dire *“la particella occupa l'esatta posizione P ”*, ma bisognerà, invece, limitarsi a dire:

il sistema è contenuto entro un volume dV - centrato attorno al punto P - con una probabilità pari a $|\Psi|^2dV$.

Abbiamo, quindi, introdotto **un linguaggio di tipo probabilistico**, la cui novità concettuale è talmente grande, che merita un approfondimento.

Come detto la funzione d'onda è una funzione a valori complessi (ovvero: $\Psi \in \mathbb{C}$) e, quindi, *non può essere associata direttamente ad alcuna grandezza fisica misurabile in laboratorio*. Per giustificare il significato dato al formalismo quantistico, ci faremo guidare dall'equivalenza tra descrizione ondulatoria e descrizione corpuscolare valide per la radiazione elettromagnetica. Una radiazione elettromagnetica in descrizione ondulatoria è caratterizzata in ogni punto dello spazio da una intensità che è proporzionale al quadrato dell'ampiezza dell'onda stessa. Adottando la descrizione corpuscolare alla Einstein possiamo invece dire che la stessa intensità dipenderà dalla probabilità di trovare in quello stesso punto un certo numero di fotoni. Poichè entrambe le descrizioni sono vere, concludiamo **attribuendo al quadrato dell'ampiezza dell'onda elettromagnetica il significato di misura della probabilità di trovare fotoni nel volume infinitesimo centrato sulla posizione selezionata**. Usando ora il dualismo onda-corpuscolo per le onde materiali, risulta naturale associare al quadrato della funzione d'onda una analoga misura della probabilità di presenza del sistema fisico da essa descritto. In pratica questo significa che misure ripetute della sua posizione forniranno risultati differenti, ciascuno con probabilità data dal quadrato della funzione d'onda calcolata nel punto in questione. Secondo l'interpretazione probabilistica alla Born, descrivere un sistema tramite un'onda di materia impedisce che esso venga rappresentato come un punto materiale in una determinata posizione dello spazio; piuttosto, al sistema deve essere associata una **nuvola di probabilità di presenza**, la cui maggiore o minore densità indicherà graficamente quanto sia più o meno probabile trovarlo in quella regione. Questo concetto è illustrato in Fig.1.1.

2. **Secondo postulato: gli operatori quantistici.** Ad ogni grandezza fisica misurabile (cioè a ogni *osservabile* fisica: posizione, velocità, quantità di moto, momento angolare, energia, ...) viene associato un **operatore quantistico** secondo la seguente regola:



Figura 1.1: Illustrazione pittorica del significato fisico di eq.(1.8) nel caso in cui il sistema fisico corrisponda ad un elettrone confinato nel volume corrispondente al rettangolo in figura: le diverse densità di colore corrispondono a valori diversi di $|\psi|^2 d\tau$ e definiscono quanto sia localmente probabile trovare l'elettrone.

- si scriva l'espressione classica per la grandezza fisica in termini di coordinate posizionali, di momenti lineari (quantità di moto) e del tempo;
- a questo punto si costruisca il corrispondente operatore quantistico in modo che le coordinate posizionali e il tempo intervengano come operatori di moltiplicazione, mentre a ogni componente del momento lineare lungo una certa direzione sia associato l'operatore $-i\hbar\partial/\partial q$ (dove $q = x, y, z$ rappresenta la direzione relativa alla componente considerata).

Lo schema di costruzione di un operatore quantistico è riportato in Tab.1.1.

Tabella 1.1: Schema di costruzione degli operatori quantistici

<i>osservabile classica</i>	<i>operatore quantistico</i>
posizione: componente x	moltiplicazione per x
posizione: componente y	moltiplicazione per y
posizione: componente z	moltiplicazione per z
tempo t	moltiplicazione per t
momento lineare: componente x	applicazione di $-i\hbar\partial/\partial x$
momento lineare: componente y	applicazione di $-i\hbar\partial/\partial y$
momento lineare: componente z	applicazione di $-i\hbar\partial/\partial z$

Consideriamo, per esempio, la osservabile fisica *energia cinetica* E_{cin} di una particella di massa m e velocità $\mathbf{v} = (v_x, v_y, v_z)$. Classicamente la sua espressione è

$$E_{\text{cin}} = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} \quad (1.9)$$

dove abbiamo naturalmente posto $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$. Utilizzando la regola suddetta risulta immediato scrivere l'espressione per l'**operatore quantistico energia cinetica** come:

$$E_{\text{cin}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 \quad (1.10)$$

dove $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$.

Analogamente, se consideriamo l'osservabile fisica classica *energia potenziale elettrostatica* E_{pot} di interazione nucleo-elettrone nell' atomo di idrogeno

$$E_{\text{pot}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1.11)$$

allora il corrispondente **operatore quantistico energia potenziale coulombiana** è

$$E_{\text{pot}} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1.12)$$

cioè risulta essere formalmente identico alla espressione classica. In entrambe le espressioni va naturalmente inteso: $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ se (x, y, z) rappresentano le componenti cartesiane del vettore posizione dell'elettrone rispetto a di un sistema di riferimento centrato sul nucleo.

Combinando questi due risultati siamo in grado di scrivere anche l'operatore quantistico associato alla *energia totale* E_T di un elettrone nell' atomo di idrogeno. Infatti, se classicamente abbiamo che

$$E_T = E_{\text{cin}} + E_{\text{pot}} = \frac{p^2}{2m_e} - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1.13)$$

allora l'operatore energia totale H , chiamato **operatore hamiltoniano**, si scrive immediatamente come:

$$H_{\text{atomo idrogeno}} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r} \quad (1.14)$$

È utile riportare l'espressione per l'operatore *momento angolare* \mathbf{L} che classicamente è dato dalla

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} \quad (1.15)$$

mentre quantisticamente risulta associato a

$$\mathbf{L} = -i\hbar \mathbf{r} \times \nabla \quad (1.16)$$

dove, con ovvio significato dei simboli, abbiamo posto

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial x} \mathbf{i} + \frac{\partial}{\partial y} \mathbf{j} + \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{k} \quad (1.17)$$

essendo $\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}$ i versori dei tre assi cartesiani. È immediato constatare che in meccanica quantistica il momento angolare si misura in unità di costanti di Planck \hbar .

Molto utili in fisica atomica e molecolare sono gli operatori associati al *quadrato del momento angolare* L^2 e alla componente z del momento angolare L_z di una particella. È facile ricavarne le espressioni in coordinate cartesiane:

$$\begin{aligned} L^2 &= L_x^2 + L_y^2 + L_z^2 \\ L_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{aligned} \quad (1.18)$$

3. **Terzo postulato: valori di aspettazione.** Quando un sistema fisico si trova al tempo t in uno stato quantistico descritto dalla funzione d'onda $\Psi(x_1, x_2, \dots; t)$, allora tutti i valori possibili r che assume una certa osservabile descritta dall'operatore R sono dati dalla equazione

$$R\Psi = r\Psi \quad (1.19)$$

Questa relazione si chiama **equazione agli autovalori** per l'operatore R . I numeri r rappresentano *valori di aspettazione* per l'osservabile fisica associata a R . Possiamo adesso apprezzare il ruolo chiave della funzione d'onda Ψ : essa, infatti, non solo permette di valutare con che probabilità il nostro sistema si trovi in un certo punto dello spazio, ma **permette anche di calcolare il valore di tutte le grandezze fisiche di cui sia noto in corrispondente operatore**.

L'eq.(1.19) si legge come segue:

il numero reale r rappresenta il valore misurabile sperimentalmente per la grandezza fisica associata all'operatore R quando il sistema su cui si esegue la misura è descritto dalla funzione d'onda Ψ .

Quando è verificata l'eq.(1.19) allora si dice che Ψ è una **autofunzione** di R e che r è un **autovalore** di R . In breve: l'osservabile R ha il valore r .

Da un punto di vista matematico, l'eq.(1.19) è un'equazione differenziale che andrà di volta in volta risolta tenendo conto delle specifiche condizioni al contorno che definiscono il nostro problema

fisico. Può accadere che l'eq.(1.19) abbia più soluzioni (cioè l'osservabile associata ad R ha più valori possibili), oppure nessuna soluzione. In questo secondo caso diremo che lo stato del sistema non è un autostato dell'operatore associato alla osservabile di nostro interesse.

Esiste una importante conseguenza concettuale di questo postulato. Supponiamo che il sistema sia descritto dalla funzione d'onda Ψ che, a sua volta, sia una autofunzione di R di autovalore r . Consideriamo una seconda osservabile associata a un nuovo operatore N . Si danno due soli casi possibili:

- Ψ risulta essere un'autofunzione anche di N (cioè l'equazione agli autovalori $N\Psi = n\Psi$ ammette soluzioni per la stessa Ψ che soddisfa anche l'eq. (1.19));
- Ψ risulta non essere un'autofunzione di N (cioè il problema agli autovalori $N\Psi = n\Psi$ non ammette soluzioni).

Nel primo caso diremo che **lo stato Ψ è contemporaneamente un autostato di R e di N** , ovvero che le corrispondenti osservabili fisiche hanno simultaneamente dei valori ben definiti pari, rispettivamente, a r e n . In termini pratici: si può eseguire una misura contemporanea delle due osservabili sul sistema descritto dall'unica funzione d'onda Ψ e trovare i due valori r e n . Nel secondo caso, al contrario, la osservabile fisica associata a N non ha un valore ben determinato, quando lo stato del sistema è descritto da Ψ , autofunzione di R . In termini pratici: una misura contemporanea delle due osservabili produce un valore preciso pari a r per la prima osservabile, mentre non fornisce alcun valore preciso per l'osservabile associata a N .

Questo importante risultato è profondamente diverso da ciò che ci ha insegnato la fisica classica ove è, in linea di principio, sempre possibile misurare una qualunque coppia di osservabili fisiche contemporaneamente sullo stesso sistema. Al contrario, i fenomeni regolati dalla meccanica quantistica sono, in un certo senso, più sfuggenti: esistono stati fisici che sono autostati di alcuni operatori, ma non di altri. Ovvero: esistono stati fisici in cui alcune osservabili sono misurabili (hanno un valore ben determinato), mentre altre non lo sono (non hanno un valore ben determinato). È importante sottolineare che questa limitazione **non è legata a questioni di precisione strumentale**, ma è piuttosto una manifestazione nuova intrinsecamente legata alla descrizione degli oggetti fisici come onde di materia.

4. **Quarto postulato: l'equazione di Schrödinger.** L'evoluzione temporale della funzione d'onda (cioè: l'evoluzione temporale dello stato fisico di un sistema descritto da una funzione d'onda Ψ) è data dalla seguente

equazione di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi \quad (1.20)$$

dove H è l'operatore hamiltoniano, cioè l'operatore quantistico assegnato alla espressione classica dell'energia totale del sistema considerato. Questa espressione rappresenta **l'equazione fondamentale della meccanica quantistica**.

L'equazione di Schrödinger può essere manipolata in un modo molto conveniente qualora si considerino **sistemi conservativi**, sistemi cioè in cui l'energia totale è costante nel tempo². Se questo è vero, allora anche l'operatore hamiltoniano H *non dipende dal tempo*; i due termini a sinistra e destra dell'uguaglianza (1.20) comportano, dunque, solo derivate rispetto al tempo o rispetto allo spazio, rispettivamente. È naturale, quindi, separare la dipendenza di Ψ dalle coordinate spaziali e dal tempo come segue:

sistemi conservativi

$$\Psi(x_1, x_2, \dots, y_1, y_2, \dots, z_1, z_2, \dots; t) = \psi(x_1, x_2, \dots, y_1, y_2, \dots, z_1, z_2, \dots) \xi(t) \quad (1.21)$$

dove, quindi, la funzione ψ descrive la *parte spaziale* della funzione d'onda totale, mentre ξ descrive la sua *parte temporale*. Questo modo di procedere è del tutto generale e viene ampiamente utilizzato

²Noi considereremo sempre e solo sistemi conservativi.

nelle applicazioni pratiche del formalismo quantistico: ogni qual volta il problema fisico presenta una simmetria tale che consenta di separare le variabili in gruppi, allora la funzione d'onda totale è data da un prodotto di funzioni che dipendono ciascuna da un solo gruppo di variabili.

Tornando al caso della dipendenza spaziale e temporale, possiamo facilmente verificare per sostituzione diretta nella (1.20) che la funzione

$$\Psi = \psi \xi = \psi e^{-iEt/\hbar} \quad (1.22)$$

soddisfa l'equazione di Schrödinger, purchè valga la seguente

equazione agli autovalori per l'energia

$$H\psi = E\psi \quad (1.23)$$

dove, naturalmente, E rappresenta l'energia totale (che non dipende dal tempo) del sistema fisico descritto dalla funzione d'onda ψ . L'eq.(1.23), quindi, rappresenta l'equazione agli autovalori per l'operatore hamiltoniano (energia) del sistema: i suoi autovalori rappresentano le possibili energie del sistema e le sue autofunzioni descrivono i corrispondenti stati fisici. Essa è la controparte di eq.(1.5) ove si consideri l'identificazione $H = -(\hbar^2/2m) d^2/dx^2 + V(x)$.

È doveroso osservare che i quattro postulati fin qui enunciati non esauriscono in modo completo l'edificio concettuale della meccanica quantistica. Tuttavia essi rappresentano gli aspetti di gran lunga più importanti del formalismo quantistico e risultano del tutto sufficienti a sviluppare le applicazioni di nostro interesse.

Capitolo 2

Semplici applicazioni del formalismo quantistico

Syllabus - In questo capitolo discuteremo tre semplici applicazioni della meccanica quantistica: la particella libera, la particella in una buca di potenziale e l'oscillatore armonico.

Questi tre esempi sono stati scelti, tra i tanti possibili, per la loro paradigmatica importanza concettuale. In tutti i casi svilupperemo il formalismo nel caso unidimensionale al fine di semplificare la trattazione. Naturalmente tutti i risultati sono facilmente estendibili alla tre dimensioni.

2.1 La particella libera

Nel caso di una particella libera di massa m l'energia potenziale è nulla e l'equazione agli autovalori per l'energia risulta essere particolarmente semplice:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + E\psi(x) = 0 \quad (2.1)$$

dove l'energia E , contenente il solo contributo cinetico, è positiva. La funzione d'onda $\psi(x)$ deve essere rappresentata matematicamente da una funzione che, a meno del segno, sia uguale alla sua derivata seconda. Possiamo, dunque, ipotizzare una forma del tipo

$$\psi(x) = A \cos(kx) \quad (2.2)$$

dove A e k sono costanti da definire. Per sostituzione diretta della (2.2) nella (2.1) otteniamo

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + E = 0 \quad (2.3)$$

ovvero

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar} \quad (2.4)$$

Ricordando che per la particella libera $E = p^2/2m$ concludiamo che: [il risultato espresso dall'eq. \(1.27\) rappresenta nient'altro che la relazione di de Broglie per il vettore d'onda di un'onda materiale piana \(e armonica\)](#).

L'ipotesi (1.25) non è l'unica possibile. Infatti, anche la soluzione

$$\psi(x) = B \sin(kx) \quad (2.5)$$

soddisfa a tutte le condizioni richieste e riproduce il risultato di de Broglie. Ne segue che la più generale soluzione della equazione di Schrödinger per la particella libera è rappresentata da una combinazione lineare delle due soluzioni particolari trovate:

$$\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx) \quad (2.6)$$

Questo risultato dimostra in modo rigoroso il risultato anticipato nella discussione del principio di indeterminazione di Heisenberg sulla base dell'intuito fisico: [la funzione d'onda di una particella libera \(o, equivalentemente, l'onda materiale associata alla particella libera\) è rappresentata da un'onda piana ad ampiezza costante in tutto lo spazio](#). Per dimostrare ciò basta porre, in accordo al primo postulato che definisce la funzione d'onda come funzione a valori complessi, che: $A = 1$ e $B = i$. In questo modo risulta immediatamente:

$$\psi(x) = \cos(kx) + i \sin(kx) = e^{ikx} \quad (2.7)$$

2.2 La particella confinata

Consideriamo ora un caso leggermente più complesso: quello di una particella di massa m non soggetta a forze, ma confinata entro una regione di spazio $\Delta x = L$. Matematicamente, la situazione è descritta da un potenziale di confinamento $V(x)$ tale che: $V = 0$ per $0 < x < L$, mentre $V = +\infty$ per $x \leq 0$ o $x \geq L$. La Fig.1.2 (sinistra) riassume la situazione. Questo problema è noto in letteratura come il problema della "particella in una scatola" o come il problema di una "particella in una buca di potenziale" (a pareti infinitamente alte).

La forma del potenziale $V(x)$ suggerisce che la funzione d'onda $\psi(x)$ descrivente lo stato della particella debba essere nulla sia per $x \leq 0$ che per $x \geq L$. A queste regioni, infatti, la particella non può avere accesso: coerentemente con il significato di probabilità di presenza associato alla funzione d'onda, dobbiamo quindi dire che sarà nulla la probabilità di ivi trovare la particella. Consideriamo ora la regione $0 < x < L$. Dentro la buca di potenziale non agiscono, come detto, forze: la particella è dunque libera e la sua funzione d'onda è data dalla (1.29). In questo caso, tuttavia, esistono delle condizioni al contorno ben definite che ci consentono di determinare il valore delle costanti A e B . Ricordando che la $\psi(x)$ deve essere continua (primo postulato), dobbiamo avere che $\psi(x=0) = \psi(x=L) = 0$. Per sostituzione

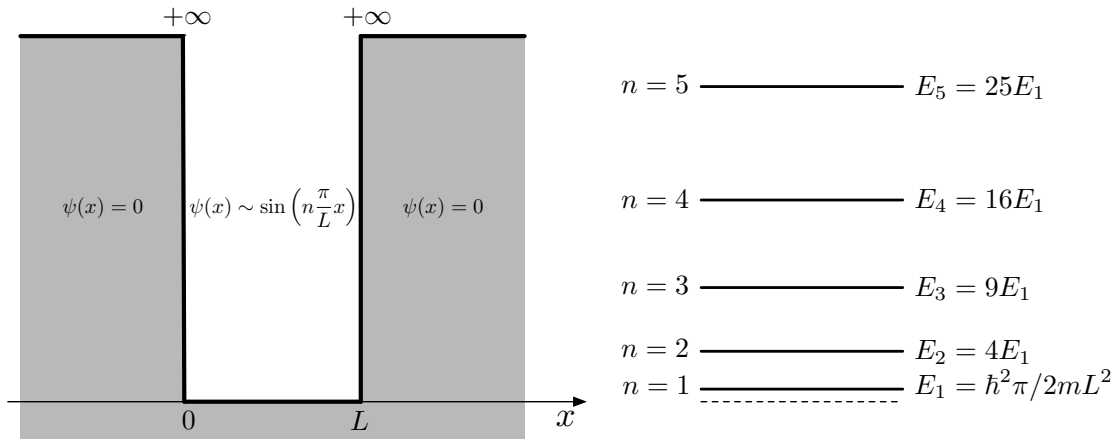


Figura 2.1: Andamento del potenziale $V(x)$ per una particella in una scatola (sinistra) e corrispondente diagramma dei livelli di energia ammessi (destra).

diretta nella (1.29) si dimostra facilmente che la condizione al contorno $\psi(x=0) = 0$ impone che sia $A = 0$, mentre la condizione $\psi(x=L) = 0$ impone che sia

$$\sin(kL) = 0 \quad (2.8)$$

ovvero che l'argomento della funzione seno sia un multiplo intero n di π :

$$kL = \frac{\sqrt{2mE_n}}{\hbar} L = n\pi \quad (2.9)$$

dove abbiamo indicato con E_n l'energia della particella confinata nella buca. Questo risultato equivale a affermare che le **uniche energie permesse ad una particella confinata in una regione di spessore L sono:**

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (2.10)$$

dove $n = 1, 2, 3, \dots$. Questo risultato è molto importante perché rappresenta **la condizione di discretizzazione dello spettro di energie di un sistema fisico**, non discendente da assunzioni ad hoc, ma imposta dalla matematica sottostante. In Fig.1.2 (destra) è rappresentato lo schema dei livelli energetici per la particella nella scatola di larghezza L .

Le forme delle onde materiali associate ai diversi livelli energetici E_n si ottengono facilmente per sostituzione della (1.32) nella (1.29) (ricordando che $A = 0$). Esse sono rappresentate dall'equazione

$$\psi(x) = B \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) \quad (2.11)$$

e corrispondono a **onde stazionarie: le uniche funzioni d'onda ammissibili sono dunque quelle tali per cui nella scatola sono contenute esattamente un numero dispari di mezze lunghezze d'onda**

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2mE_n}} = \frac{2L}{n} \quad (2.12)$$

La Fig.1.3 illustra l'andamento delle prime tre funzioni d'onda (sinistra), le corrispondenti ampiezze di probabilità (centro) e le relative probabilità di presenza (destra).

2.2.1 Applicazione ingegneristica: lo schema concettuale del laser a pozzo quantico

Consideriamo una eterostruttura a semiconduttore formata da un sottile strato di GaAs, confinato a destra e a sinistra da due spessori di barriera molto più larghi di lega $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. La situazione è riportata

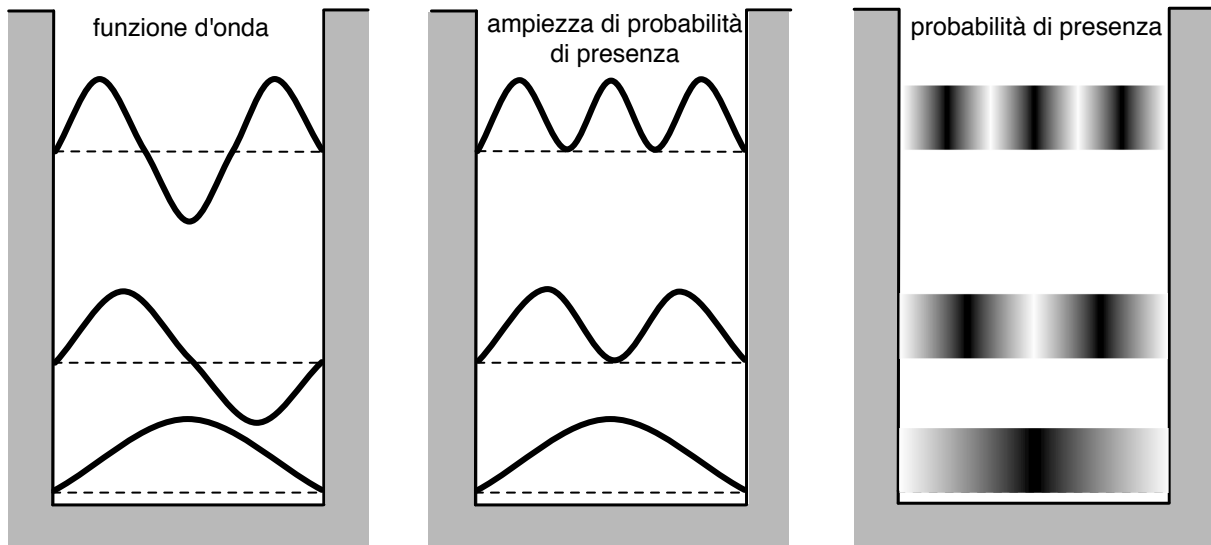


Figura 2.2: Le prime tre funzioni d'onda di particella libera confinata in una scatola (sinistra), le corrispondenti ampiezze di probabilità (centro) e le relative probabilità di presenza (destra).

in Fig.2.3 (sinistra) e corrisponde a situazioni reali in cui la larghezza della parte centrale può variare dal nm al μm . I materiali che formano l'eterostruttura hanno la stessa costante reticolare a , dunque, le interfacce sono strutturalmente prive di difetti; tuttavia, la differente composizione chimica determina una discontinuità tra la struttura elettronica dei due spessori confinanti e dello strato centrale, risultante nella formazione di un profilo di energia potenziale tipo quello rappresentato in figura. Il punto chiave è che, fissando in maniera opportuna la profondità di buca (questo si può fare ad esempio selezionando la composizione stechiometrica della lega) e la sua larghezza (semplicemente regolandone lo spessore durante la fase di crescita dei diversi strati), è possibile *ingegnerizzare la struttura dei livelli confinati*: possiamo determinarne il numero (legato alla profondità della buca) e la posizione energetica (legata allo spessore di buca). Assumiamo di aver congegnato le cose in modo che nello strato di GaAs ci siano solo due stati confinati, corrispondenti ai numeri quantici $n = 1$ ed $n = 2$ come illustrato in Fig.2.3 (a destra).

Ammettiamo ora che sia possibile iniettare elettroni dagli spessori di barriera $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ nello strato confinato di GaAs: inizialmente essi occuperanno lo stato a più alta energia con $n = 2$. Tuttavia, tramite un processo di decadimento spontaneo verso lo stato a minore energia (quello con $n = 1$), essi perderanno un'energia pari alla differenza $E_2 - E_1$. Come vedremo nel Capitolo 6, una simile transizione tra stati elettronici comporta l'emissione di un fotone di energia esattamente pari a questa differenza. Poiché ogni elettrone che compie la transizione perde esattamente la stessa quantità di energia, ne risulta che *questo dispositivo emette una radiazione elettromagnetica monocromatica*, cioè consistente di fotoni tutti della stessa energia: si dice, pertanto, che *il dispositivo emette luce laser*. Questa situazione,

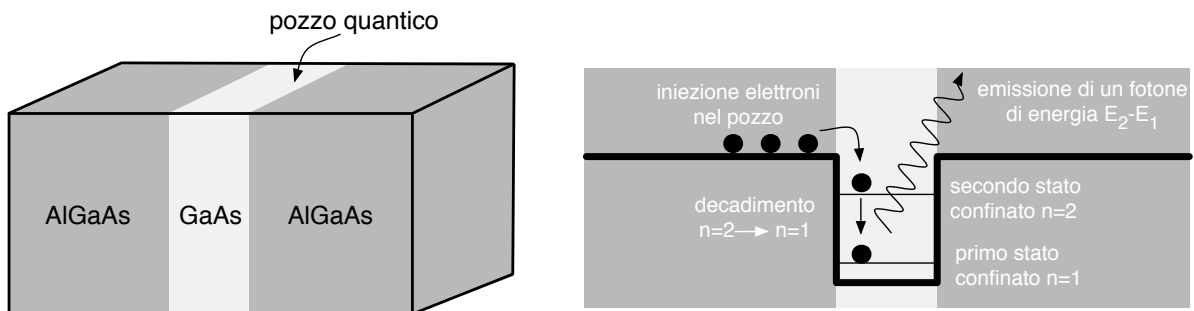


Figura 2.3: Struttura concettuale di un laser a pozzo quantico.

seppur qui descritta in forma idealizzata e tralasciando alcuni importanti dettagli, rappresenta abbastanza fedelmente il concetto di [laser a pozzo quantico](#), dove la locuzione “pozzo quantico” indica sinteticamente l’eterostruttura a buca di potenziale. Il laser a pozzo quantico è un esempio importante di nanodispositivo optoelettronico a funzionamento totalmente quantistico.

2.3 L’oscillatore armonico

La terza applicazione che discuteremo riguarda un sistema fisico di massa m che oscilla armonicamente attorno a una posizione di equilibrio posta a $x = 0$, verso la quale è richiamata da una forza elastica $F = -kx$, dove k rappresenta la costante di forza della “molla” di richiamo e x lo spostamento dalla configurazione di equilibrio. Un tale sistema è soggetto al potenziale $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$ e l’espressione classica per l’energia totale è

$$E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.13)$$

Il corrispondente [operatore hamiltoniano di oscillatore uni-dimensionale](#) si scrive come segue:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2 \quad (2.14)$$

e l’equazione agli autovalori dell’energia a esso associata è

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}kx^2\psi(x) = E\psi(x) \quad (2.15)$$

La soluzione di questa equazione differenziale al secondo ordine non è immediata come nei due casi precedenti. La sua matematica, infatti, è decisamente più complessa e va oltre il livello di trattazione che stiamo sviluppando. Tuttavia noi riportiamo il risultato finale per le energie di oscillatore armonico che, anche in questo caso, risultano quantizzate secondo i valori interi di un *numero quantico vibrazionale* $v = 0, 1, 2, 3, \dots$. In dettaglio, si ottiene che [lo spettro degli autovalori \$E_v\$ dell’energia di un oscillatore armonico quantistico](#) è

$$E_v = \left(v + \frac{1}{2}\right) h\nu \quad (2.16)$$

dove ν è la frequenza normale di vibrazione dell’oscillatore legata, alla massa e alla costante di forza dalla relazione

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (2.17)$$

Un primo risultato interessante della (1.39) è che [anche quando il numero quantico vibrazionale assume il valore minimo \$v = 0\$, l’oscillatore armonico quantistico possiede una energia non nulla pari a \$\frac{1}{2}h\nu\$](#) . Tale energia è detta *energia di punto zero* e non ha analogo classico. Questo risultato, infatti, è strettamente legato al principio di indeterminazione di Heisenberg: lo stato quantistico $v = 0$ corrisponde, infatti, a quello di vibrazione nulla in cui la particella occupa (classicamente) la posizione di equilibrio a $x = 0$. Se non vi fosse alcun moto di punto zero, noi finiremmo per conoscere con assoluta certezza sia la posizione $x = 0$ dell’oscillatore che il suo momento $p = 0$. L’esistenza, al contrario, di una energia di punto zero (a cui è ovviamente associata una sia pur minima oscillazione della particella) garantisce il rispetto della condizione minima $\Delta x \Delta p = h$.

Infine, l’equazione (1.39) costituisce la più convincente dimostrazione dell’assunzione fatta da Planck sugli oscillatori atomici per spiegare lo spettro di corpo nero e successivamente applicata da Einstein per giustificare la legge di Dulong–Petit per i calori specifici dei solidi. In quel contesto la quantizzazione delle energie di oscillatore armonico era stata introdotta come ipotesi arbitraria e non giustificata (se non per la correttezza delle sue previsioni). Ora, invece, essa discende come conseguenza matematica necessaria della equazione di Schrödinger.