

L'equazione di Schrödinger

— • —
Sigfrido Boffi

Università di Pavia
— • —

- ⊙ introduzione e cenni storici
 - dualismo onda-corpuscolo
 - ⊙ stato classico e stato quantistico
 - stati di polarizzazione della luce
 - ⊙ grandezze fisiche e stati quantistici
 - ampiezze di probabilità
 - ⊙ spazio degli stati (di Hilbert)
 - rappresentazioni
- • —

XXV Corso di aggiornamento in Fisica – Anno 2002

Esperienze e applicazione di Fisica Moderna

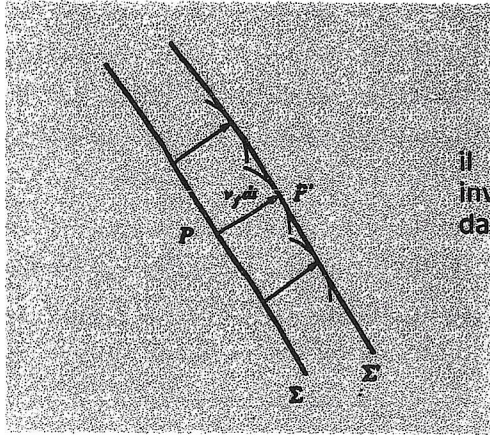
Pavia, 6 novembre 2002

CRISI DELLA FISICA CLASSICA

- 1900: spettro di corpo nero
Max Planck (1858–1947)
- 1905: effetto fotoelettrico
Albert Einstein (1879–1955)
- 1907–1912: calori specifici
Albert Einstein (1879–1955)
Pieter Debye (1884–1966)
- 1913–1916: spettri atomici
Niels Bohr (1885–1962)
Arnold Sommerfeld (1868–1951)
- 1913–1919: stati stazionari nell'atomo
James Franck (1882–1964)
Gustav Hertz (1887–1975)
- 1921–1925: effetto Compton
Arthur Holly Compton (1892–1962)
- 1921: quantizzazione spaziale
Otto Stern (1888–1969)
Walter Gerlach (1899–1979)

Fronte d'onda e principio di Huyghens

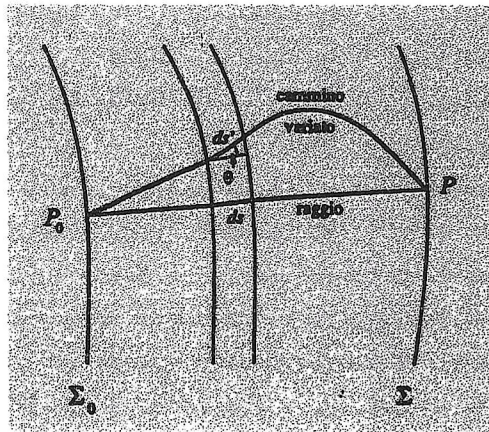
Christian Huyghens (1629–1695)



il fronte d'onda Σ' come
involuppo delle onde emesse
dai punti del fronte d'onda Σ

Cammino ottico e principio di Fermat

Pierre de Fermat (1601–1665)



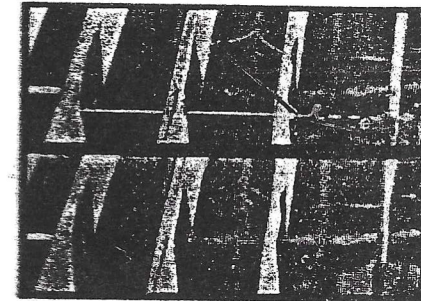
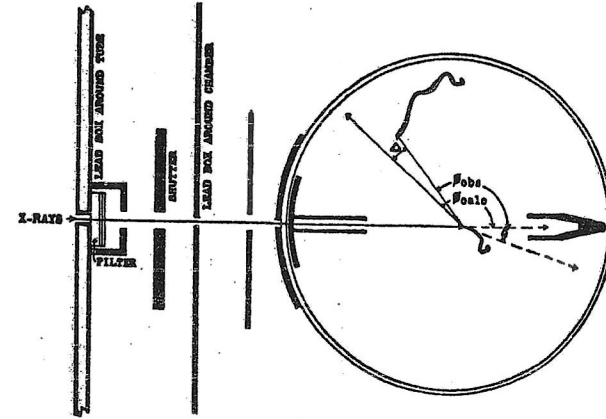
stazionarietà del
cammino ottico L :

$$\delta L = \delta \int_{P_0}^P n ds = 0$$

⇒ raggio

L'effetto Compton

$$\lambda' - \lambda = \frac{h}{mc}(1 - \cos \theta)$$



A.H. Compton, A.W. Simon: P.R. 26 (1925) 289

Louis Victor de Broglie (1892–1987)



Natura ondulatoria dell'elettrone

Louis-Victor de Broglie (1892–1987)

raggio \Leftrightarrow traiettoria

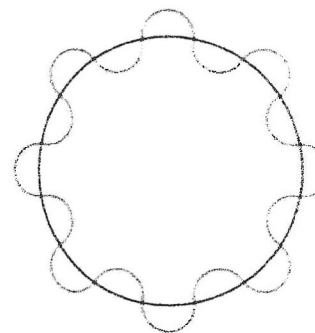
$$\Delta\lambda(n) \Leftrightarrow \Delta p(V)$$

$$(k, \nu) \Leftrightarrow (p, E)$$

*l'azione
d'onda*

$$\int n ds \Leftrightarrow \int p dq$$

$$\text{ma: } n(\nu) = \frac{c}{v_f} = \frac{c}{\nu} \frac{1}{\lambda} \Rightarrow \boxed{p = \frac{h}{\lambda}, \quad E = h\nu}$$



$$nh = \oint p dq = h \oint \frac{ds}{\lambda}$$

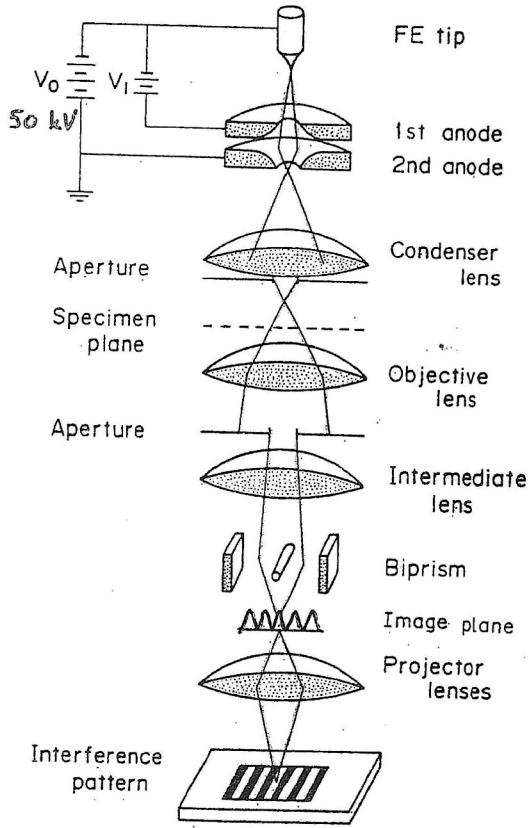
$$\Rightarrow L = n\lambda$$

onde stazionarie
su orbita chiusa

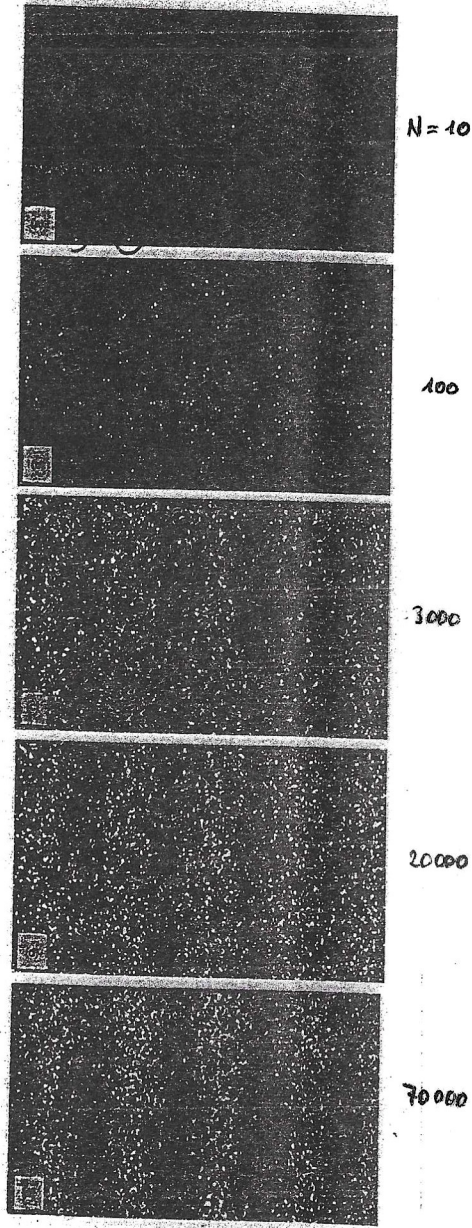
Forse un nuovo elettromagnetismo ci fornirà le leggi di questa complicata propagazione, ma ci sembra di conoscere in anticipo il risultato finale: i raggi dell'onda di fase sono identici ai cammini dinamicamente possibili.

A. Tonomura et al.

Am. J. Phys. 57 (1989) 112

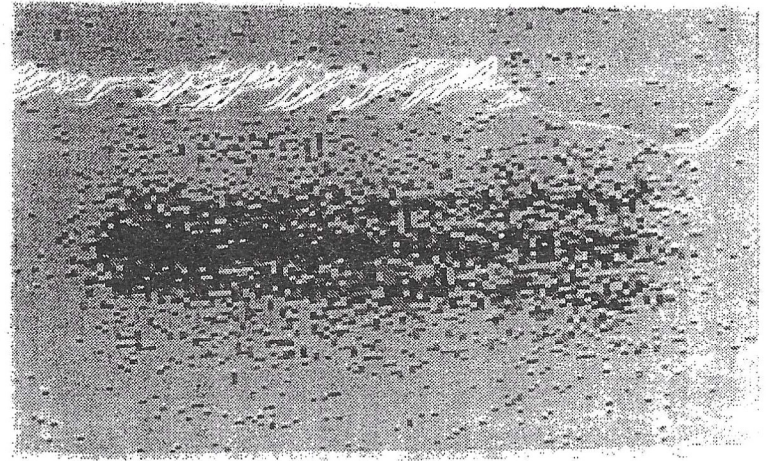
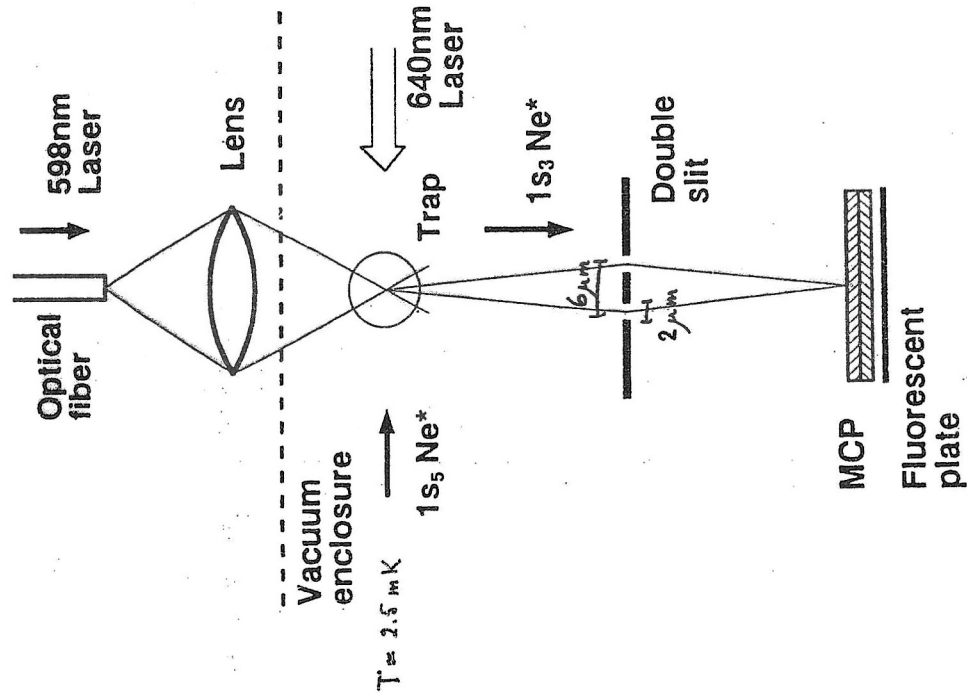


$\lambda = 0.054 \text{ \AA}$

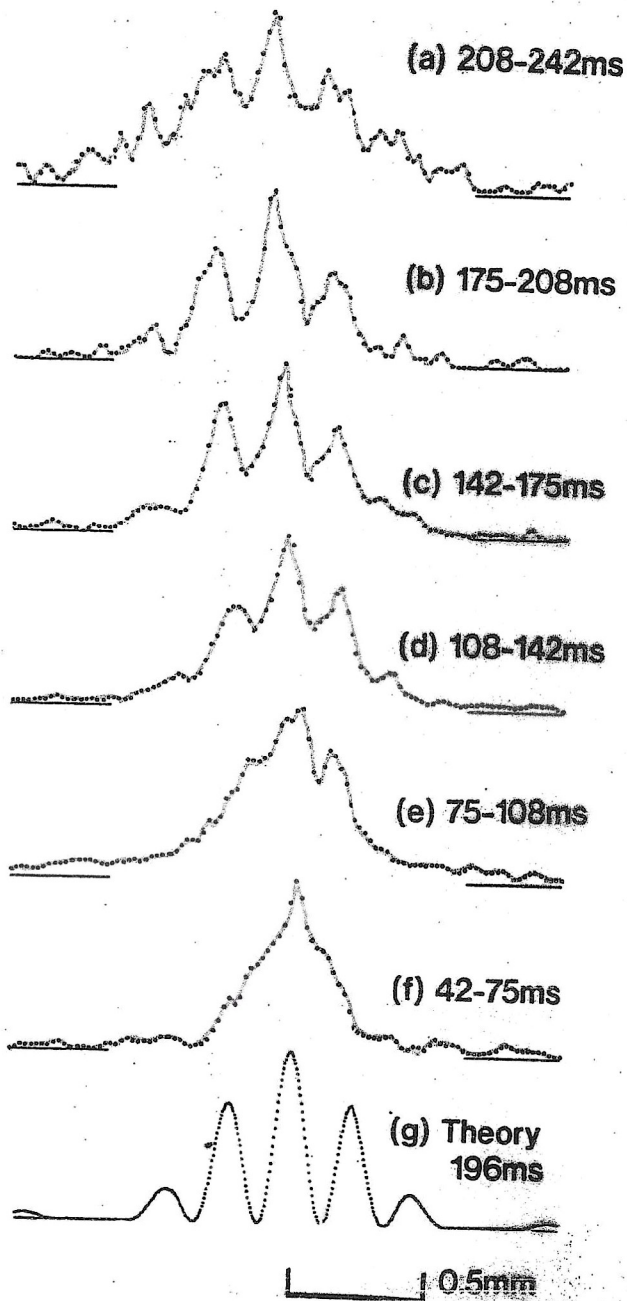


F. Shimizu, K. Shimizu, H. Takuma
 Phys. Rev. A 45 (1992) R17-19

$0.158 \text{ s} \leq t \leq 0.225 \text{ s}$



1 mm



Pierre-Simon de Laplace (1749–1827)

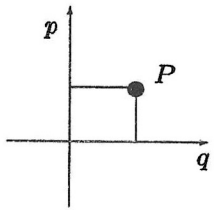
Essai philosophique sur les probabilités

1814

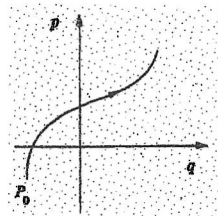
Un'Intelligenza che conoscesse, a un dato istante, tutte le forze da cui è animata la natura e la disposizione di tutti gli enti che la compongono e che inoltre fosse sufficientemente profonda da sottomettere questi dati all'analisi, abbraccerebbe in una stessa formula i movimenti dei più grandi corpi dell'universo e degli atomi più leggeri; per essa nulla sarebbe incerto e ai suoi occhi sarebbero presenti sia il futuro che il passato.

... Ma l'ignoranza delle diverse cause che concorrono alla formazione degli eventi come pure la loro complessità, insieme con l'imperfezione dell'analisi, ci impediscono di conseguire la stessa certezza rispetto alla grande maggioranza dei fenomeni. Vi sono quindi cose che per noi sono incerte, cose più o meno probabili, e noi cerchiamo di rimediare all'impossibilità di conoscerle determinando i loro diversi gradi di verosimiglianza. Accade così che alla debolezza della mente umana si debba una delle più fini e ingegnose fra le teorie matematiche, la scienza del caso o della probabilità.

spazio delle fasi

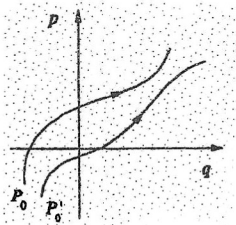


atto di moto \Leftrightarrow punto P

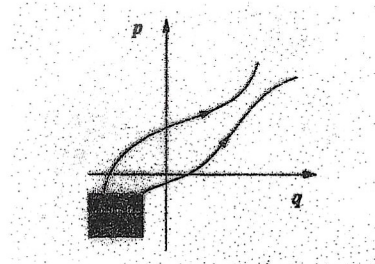


evoluzione temporale \Leftrightarrow traiettoria

condizioni iniziali \Leftrightarrow punto P_0



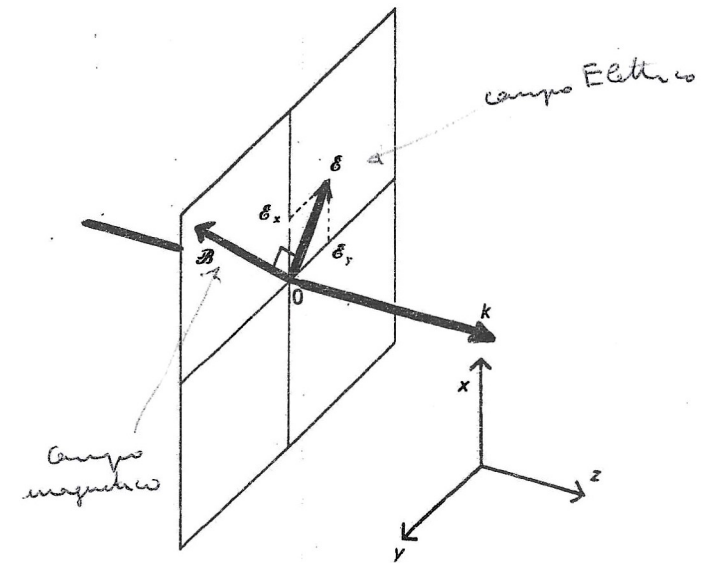
a condizioni iniziali distinte
corrispondono traiettorie
che non si intersecano mai



conoscenza approssimata
delle coordinate (q, p) iniziali
non permette di prevedere
quale traiettoria viene percorsa

Fascio di luce monocromatica

onda piana con ω, k fissati



campo elettrico: $\mathcal{E}(r, t) = \mathcal{E}_0 \sin(\omega t - k \cdot r)$

campo magnetico: $\mathcal{B}(r, t) = \mathcal{B}_0 \sin(\omega t - k \cdot r)$

$$\mathcal{E} \cdot k = \mathcal{B} \cdot k = 0$$

$$\mathcal{E} = \mathcal{B} \times \hat{k}$$

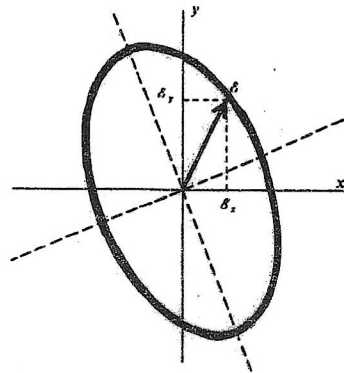
intensità media:

$$I = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \mathcal{E}_0^2$$

Lo stato di polarizzazione della luce

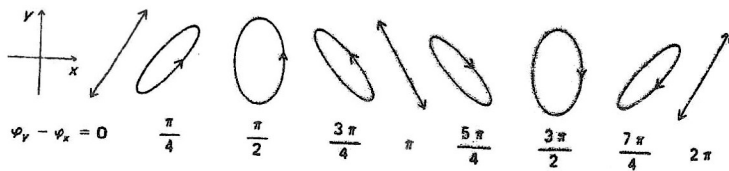
la direzione di \mathcal{E} definisce la polarizzazione dell'onda

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_x(t) &= \mathcal{E}_{0x} \sin(\omega t - \phi_x) \\ \mathcal{E}_y(t) &= \mathcal{E}_{0y} \sin(\omega t - \phi_y) \\ \mathcal{E}_z(t) &= 0 \end{aligned}$$



lo stato di polarizzazione (ellittica) è totalmente caratterizzato da

$$r = \frac{\mathcal{E}_{0y}}{\mathcal{E}_{0x}}, \quad \delta = \phi_y - \phi_x$$



$r = 1 \Rightarrow$ polarizzazione circolare

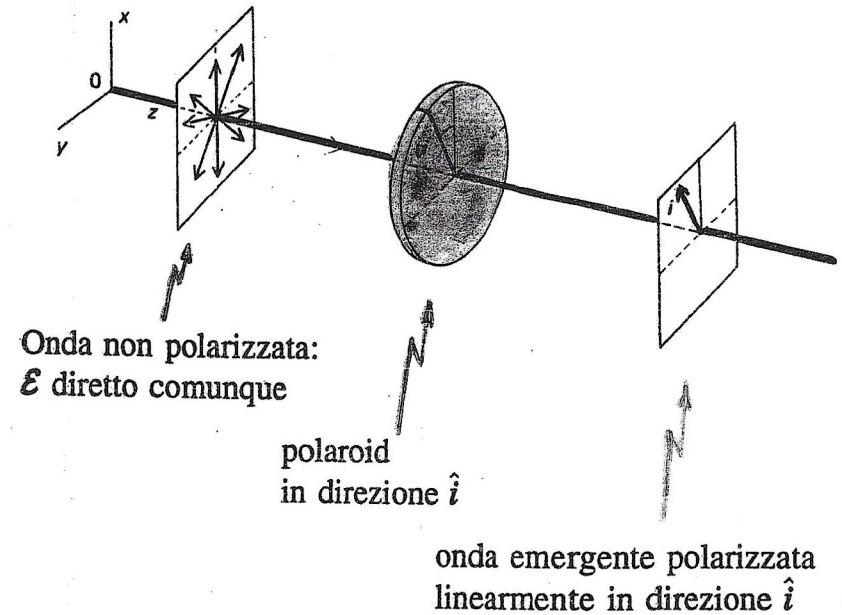


destra



sinistra

Luce polarizzata linearmente



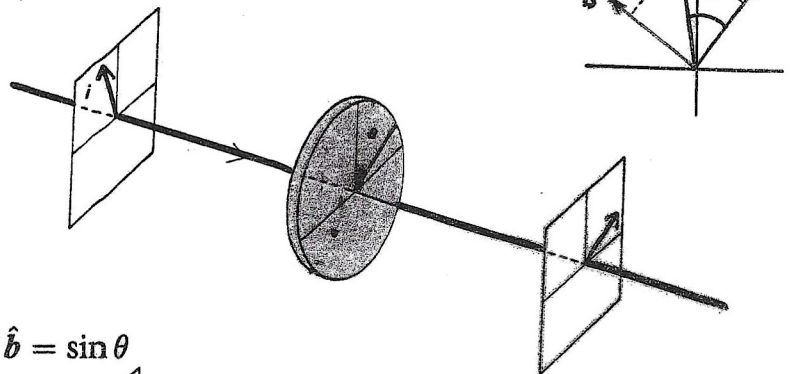
Onda non polarizzata:
 \mathcal{E} diretto comunque

polaroid
in direzione \hat{i}

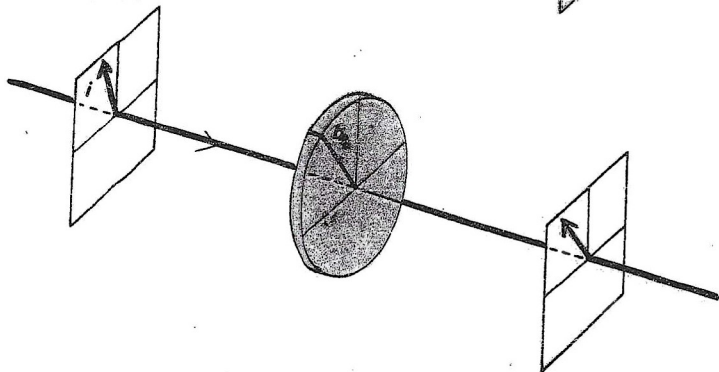
onda emergente polarizzata
linearmente in direzione \hat{i}

Decomposizione secondo due polarizzazioni ortogonali

a): $\hat{i} \cdot \hat{a} = \cos \theta$



b): $\hat{i} \cdot \hat{b} = \sin \theta$

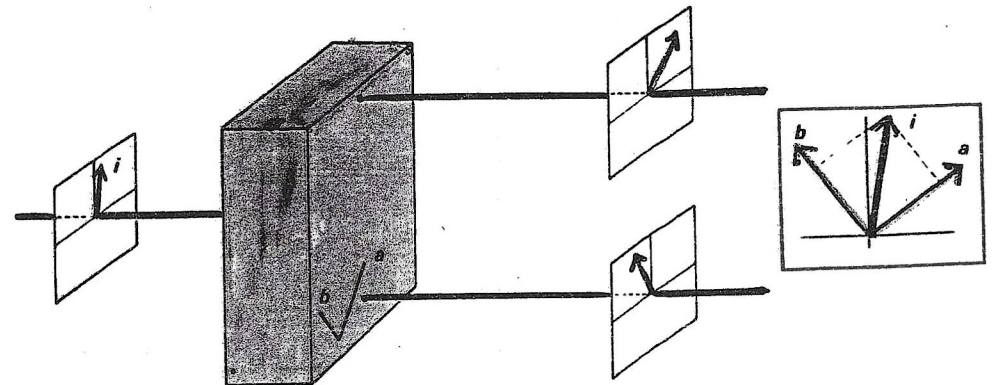


$$\mathcal{E} \equiv \mathcal{E} \hat{i} = (\mathcal{E} \cos \theta) \hat{a} + (\mathcal{E} \sin \theta) \hat{b}$$

intensità: $I \sim \mathcal{E}^2 \rightarrow I_a \sim \mathcal{E}^2 \cos^2 \theta, I_b \sim \mathcal{E}^2 \sin^2 \theta$

$$I = I_a + I_b$$

Analizzatore di polarizzazione



Qualunque sia la polarizzazione iniziale

emergono sempre e solo

le due polarizzazioni lungo a e b

$A(\hat{a}, \hat{b})$ = analizzatore per le direzioni (\hat{a}, \hat{b})

= apparato di misura della polarizzazione sulla base (\hat{a}, \hat{b})

osservare = proiettare

Analisi della polarizzazione e probabilità di transizione

In termini di fotoni: $I = N \overset{h\nu}{\hbar\omega} \rightarrow I_a = N_a \hbar\omega, I_b = N_b \hbar\omega$

$$N_a = N \cos^2 \theta, \quad N_b = N \sin^2 \theta$$

$$N_a + N_b = N$$

ma perché un fotone sceglie il canale a piuttosto che il canale b ?

Se ci si riferisce al singolo fotone occorre parlare di probabilità

● definizione frequenzistica della probabilità:

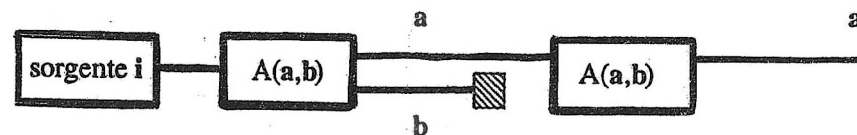
$$\mathcal{P}_a = \lim_{N \gg 1} \frac{N_a}{N} = \cos^2 \theta, \quad \mathcal{P}_b = \lim_{N \gg 1} \frac{N_b}{N} = \sin^2 \theta$$

$$\mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b = 1$$

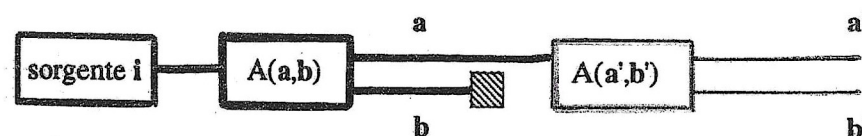
\mathcal{P}_a = probabilità che il fotone compia la transizione dallo stato iniziale $|\hat{i}\rangle$ con polarizzazione lungo \hat{i} allo stato finale $|\hat{a}\rangle$ con polarizzazione lungo \hat{a}

$$\mathcal{P}_a \equiv \mathcal{P}(a \leftarrow i)$$

Osservabili, autostati, autovalori



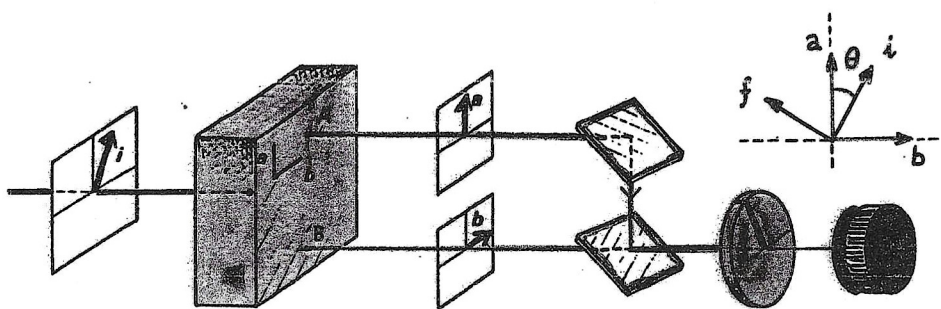
Il risultato netto dell'analisi è di proiettare la polarizzazione del fotone nello stato $|\hat{a}\rangle$ (o nello stato $|\hat{b}\rangle$)



I due stati $|\hat{a}\rangle, |\hat{b}\rangle$ sono stati indipendenti e ortogonali e permettono di decomporre univocamente un qualunque stato di polarizzazione lungo $|\hat{i}\rangle$:

$$\{|\hat{a}\rangle, |\hat{b}\rangle\} = \text{insieme completo ortonormale di autostati della polarizzazione sulla base } (\hat{a}, \hat{b})$$

Ampiezze di probabilità



Se $i \cdot f = 0$, il rivelatore non riceve luce

$$P_a(f \leftarrow i) = P(f \leftarrow a) P(a \leftarrow i) = \sin^2 \theta \cos^2 \theta$$

$$P_b(f \leftarrow i) = P(f \leftarrow b) P(b \leftarrow i) = \cos^2 \theta \sin^2 \theta$$

$$N' = N P_a(f \leftarrow i) + N P_b(f \leftarrow i) = 2N \cos^2 \theta \sin^2 \theta$$

se si ragiona con le particelle: $I \neq 0!$

$$\mathcal{E}_a = (\mathcal{E} \cos \theta) \cos\left(\frac{1}{2}\pi - \theta\right) f = (\mathcal{E} \cos \theta \sin \theta) f$$

$$\mathcal{E}_b = (\mathcal{E} \sin \theta) \cos(\pi - \theta) f = (-\mathcal{E} \sin \theta \cos \theta) f$$

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_a + \mathcal{E}_b = 0$$

se si ragiona con le onde: $I = 0!$

Ampiezze di probabilità

{ ampiezze
quantistiche
di probabilità } \leftrightarrow { ampiezze
classiche
di un'onda }

$$A(f \leftarrow i) \leftrightarrow \mathcal{E}$$

Probabilità: $\mathcal{P} = |A|^2$

Proprietà:

1. Principio di sovrapposizione (delle ampiezze riguardanti alternative possibili)

$$A(f \leftarrow i) = A_a(f \leftarrow i) + A_b(f \leftarrow i)$$

2. Principio di fattorizzazione (delle ampiezze riguardanti transizioni attraverso stati intermedi noti)

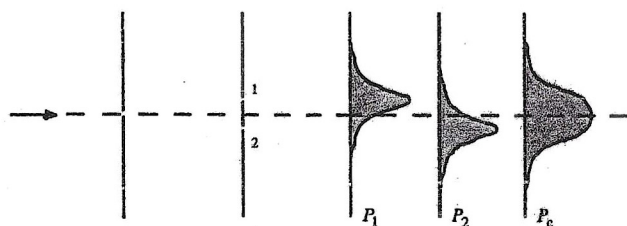
$$A_a(f \leftarrow i) = A(f \leftarrow a) A(a \leftarrow i)$$

In fisica classica: $\mathcal{P} = \mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b$

In fisica quantistica: $\mathcal{P} = |A_a + A_b|^2 \neq \mathcal{P}_a + \mathcal{P}_b$

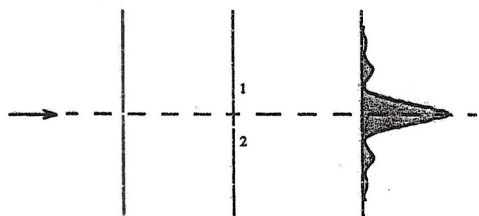
PROBABILITÀ CLASSICA

$$P_c(x) = P_1(x) + P_2(x)$$



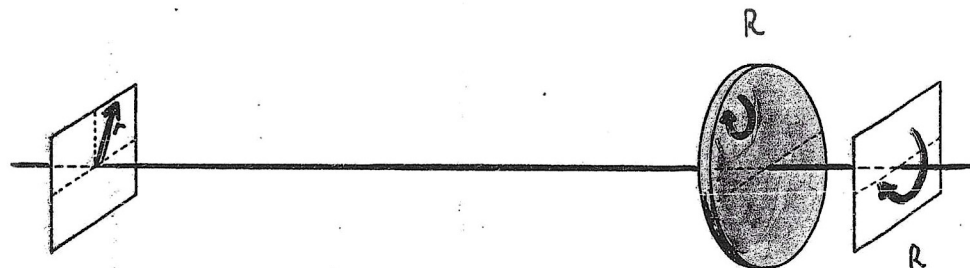
PROBABILITÀ E QUANTISTICA

$$P_q(x) = |\Psi(x)|^2$$

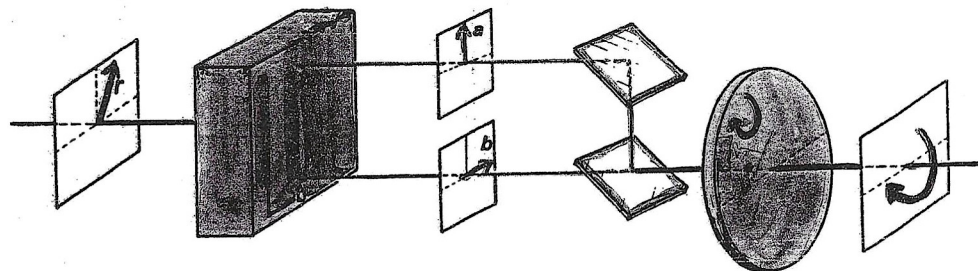


$$\begin{aligned} P_q(x) &= |\Psi_1(x) + \Psi_2(x)|^2 \\ &= P_1(x) + P_2(x) + \Psi_1^*(x)\Psi_2(x) + \Psi_1(x)\Psi_2^*(x) \end{aligned}$$

Luce polarizzata circolarmente



$$\mathcal{P}(R \leftarrow r) = |\mathcal{A}(R \leftarrow r)|^2 = \frac{1}{2}$$

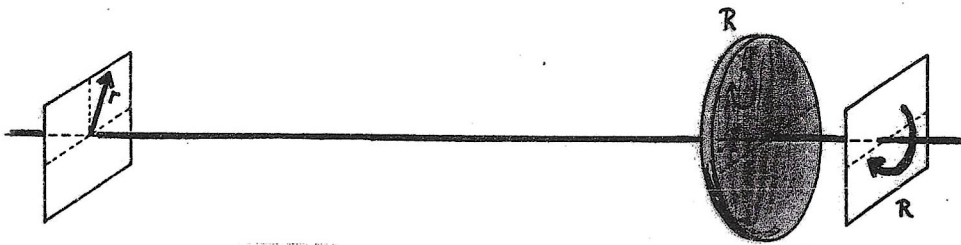


N.B.

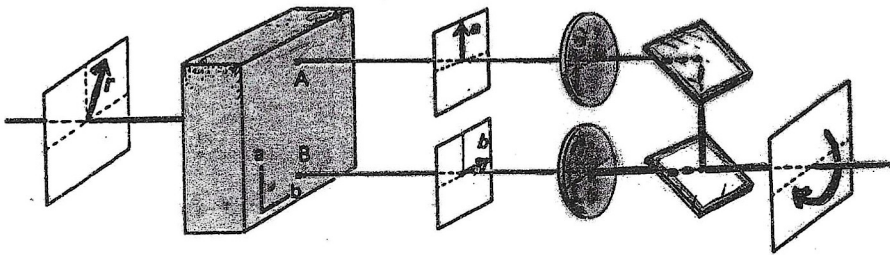
$$\mathcal{P}(L \leftarrow r) = |\mathcal{A}(L \leftarrow r)|^2 = \frac{1}{2}$$

$$\mathcal{P}(R \leftarrow r) + \mathcal{P}(L \leftarrow r) = 1$$

Le ampiezze quantistiche sono numeri complessi



$$\mathcal{P}(R \leftarrow r) = |\mathcal{A}(R \leftarrow r)|^2 = \frac{1}{2}$$



$$\begin{aligned} \mathcal{A}(R \leftarrow r) &= \mathcal{A}(R \leftarrow a) \mathcal{A}(a \leftarrow r) + \mathcal{A}(R \leftarrow b) \mathcal{A}(b \leftarrow r) \\ &= \mathcal{A}(R \leftarrow a) \cos \theta + \mathcal{A}(R \leftarrow b) \sin \theta \end{aligned}$$

$$\text{Ma: } |\mathcal{A}(R \leftarrow r)| = |\mathcal{A}(R \leftarrow a)| = |\mathcal{A}(R \leftarrow b)| = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

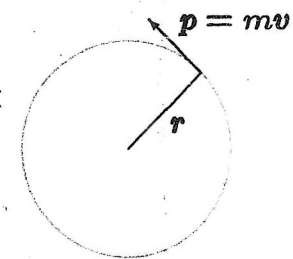
$$\text{Se si sceglie: } \mathcal{A}(R \leftarrow a) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad \mathcal{A}(R \leftarrow b) = -i \frac{1}{\sqrt{2}}$$

$$\Rightarrow \mathcal{A}(R \leftarrow r) = e^{-i\theta} \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Quando la meccanica quantistica?

$$h = 6.626\,075\,5(40) \times 10^{-34} \text{ J s}$$

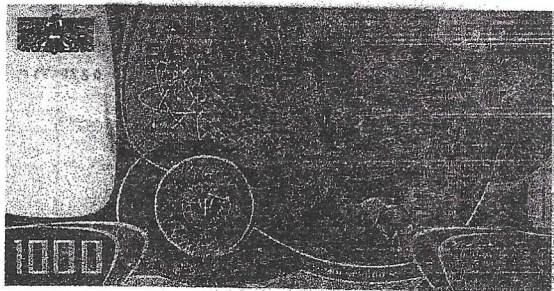
$$\begin{aligned} [h] &= [\text{azione}] = [\text{energia} \cdot \text{tempo}] \\ &= [\text{lunghezza} \cdot (\text{quantità di moto})] \\ &= [\text{momento angolare}] \end{aligned}$$



$$\bullet \begin{cases} m = 1 \text{ kg} \\ v = 1 \text{ m s}^{-1} \\ r = 1 \text{ m} \end{cases} \rightarrow L = mvr = \boxed{1 \text{ J s}}$$

$$\bullet \begin{cases} e = 1.6 \times 10^{-19} \text{ C} \\ \frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2} \\ r = a = 0.53 \times 10^{-10} \text{ m} \end{cases} \rightarrow L = \sqrt{\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} ma} = \boxed{1.05 \times 10^{-34} \text{ J s}}$$

Erwin Schrödinger (1887–1961)



Equazione di Schrödinger: quando e come?

- riguarda sistemi conservativi
- energia E data da hamiltoniana H
- H = somma di energia cinetica e potenziale:

$$H = T + V$$

- funzione d'onda associata: Ψ

⊙ prescrizione: $E\Psi = H\Psi$

$$E \rightarrow i\hbar \frac{\partial}{\partial t}, \quad H \rightarrow \text{operatore}$$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$$

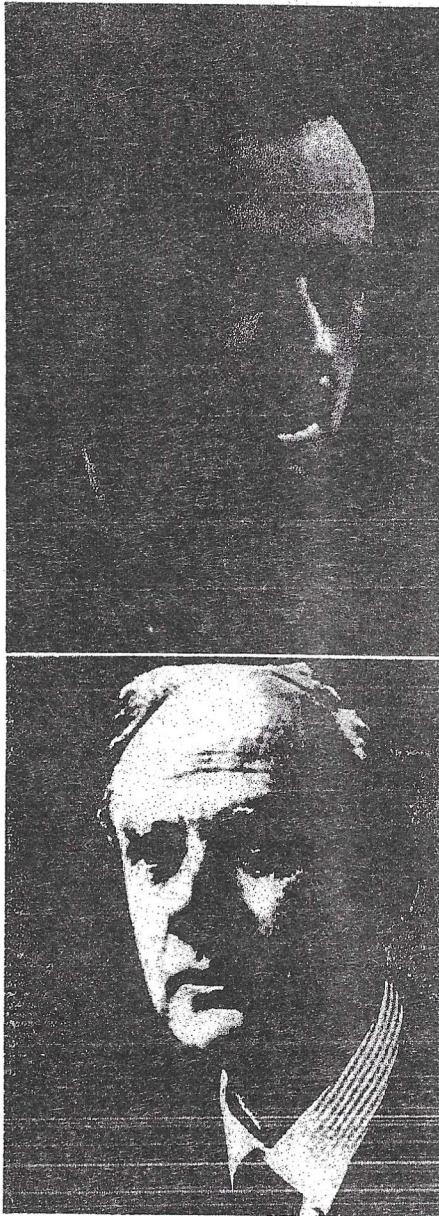
⊙ per una particella (1D): $H = \frac{p^2}{2m} + V(x)$

onda associata alla particella: $\Psi = \Psi(x, t)$

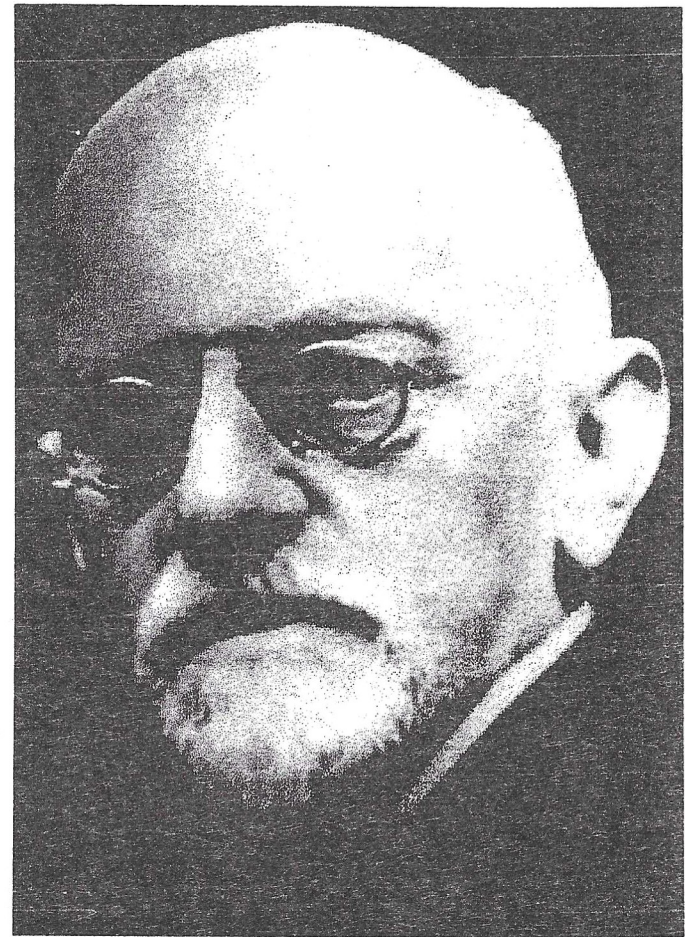
con le sostituzioni: $p \rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad V(x) \rightarrow V(x)$

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \right] \Psi(x, t)$$

Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984)

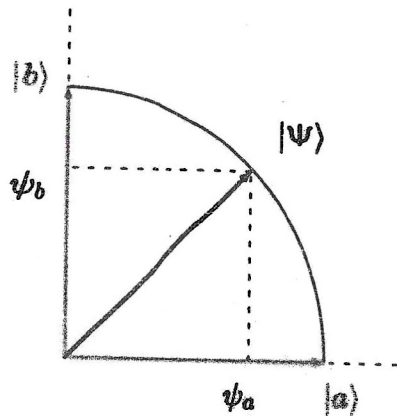


David Hilbert (1862–1943)



Lo spazio degli stati quantistici (di Hilbert)

- polarizzazione della luce: due stati indipendenti
 - spin dell'elettrone: due orientazioni (Stern-Gerlach)
- ⊙ principio di sovrapposizione lineare
⇒ stato quantistico = vettore $|\Psi\rangle$



$\{|a\rangle, |b\rangle\}$ = vettori di base

$$|\Psi\rangle = \psi_a |a\rangle + \psi_b |b\rangle$$

ψ_a (ψ_b) = ampiezza di probabilità che una misurazione fornisca lo stato $|a\rangle$ ($|b\rangle$)

N.B. in generale spazio vettoriale complesso a infinite

dimensioni: $|\Psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle$

Rappresentazioni

$$|\Psi\rangle = \psi_a |a\rangle + \psi_b |b\rangle$$

il vettore $|\Psi\rangle$ è noto quando sono note le sue componenti $\{\psi_a, \psi_b\}$ sulla base $\{|a\rangle, |b\rangle\}$

il vettore $|\Psi\rangle$ è rappresentato dalle sue componenti $\{\psi_a, \psi_b\}$

in uno spazio a infinite dimensioni

$$|\Psi\rangle = \int dx \psi(x) |x\rangle$$

il vettore $|\Psi\rangle$ è rappresentato dalla funzione d'onda $\psi(x)$.

quando $\{|x\rangle\}$ è la base dell'osservabile posizione e lo stato dipende dal tempo:

$$|\Psi(t)\rangle = \int dx \psi(x, t) |x\rangle$$

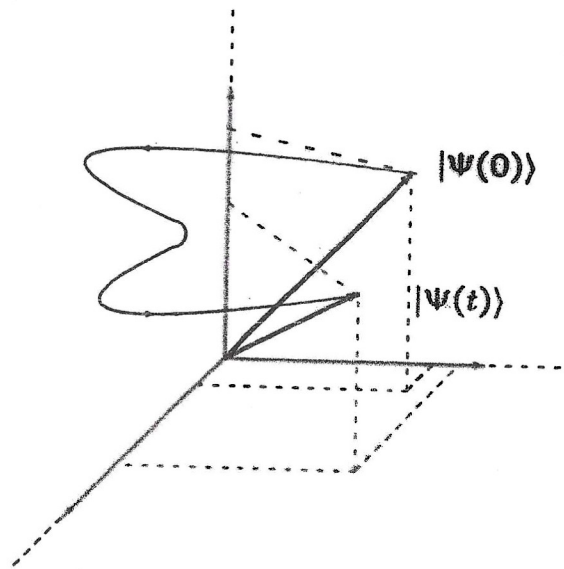
la funzione d'onda $\psi(x, t)$ è l'ampiezza di probabilità di trovare la particella in x all'istante t

la funzione d'onda $\psi(x, t)$ soddisfa l'eq. di Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H \psi(x, t)$$

Evoluzione temporale

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle = H |\psi\rangle$$



lo stato del sistema ruota nello spazio degli stati
il vettore che lo rappresenta ha lunghezza costante
le sue proiezioni sugli stati di base variano nel tempo



W.E. Hill, 1945

"Mia moglie e mia suocera"

ovvero delle osservabili non compatibili

pv.infn.it/~boffi/quaderni.html