

Ultimo contributo di fisica moderna a “Il sillabario”

Invio questi ultimi appunti di fisica quantistica: mi occupo brevemente di fornire almeno un cenno di impostazione formale degli assiomi della meccanica quantistica non relativistica, cioè riguardante le proprietà dei corpi in moto con velocità $v \ll c$, con c velocità della luce. La teoria quantistica relativistica, cioè per corpi a velocità dell'ordine di quella della luce, proprio non la conosco; è formalmente ancora più complicata di quella non relativistica e all'università non ho frequentato corsi che la trattavano in modo sistematico; per così dire, la teoria non relativistica “mi basta e mi avanza”...Spero che questi appunti non vi appaiano troppo oscuri, in caso contrario mi scuserete ma non mi è riuscito di togliere niente di quello che ho scritto, pena un lavoro ancora più incomprensibile di questo. Buona lettura!

1) Stati di un sistema e rappresentazione di Schrödinger

La Meccanica Quantistica è governata da un sistema di assiomi che descrivono il comportamento di un sistema fisico microscopico, ad esempio un elettrone libero o soggetto ad un campo elettrico come nel caso dell'elettrone dell'atomo di idrogeno nel campo elettrico del protone; tali assiomi definiscono gli stati fisici del sistema e la loro evoluzione temporale.

Nella meccanica classica, se ci riferiamo ad esempio ad una singola particella in interazione, il suo stato fisico (più brevemente **stato**) a un dato istante t è rappresentato dal vettore posizione $\vec{r}(t)$. Come noto, per studiare il vettore posizione occorre applicare un insieme di leggi (leggi di Newton, principi di conservazione) che permettono di ricavare $\vec{r}(t)$ dalla conoscenza di $\vec{r}(0)$ e di $\vec{v}(0)$.

In Meccanica Quantistica la situazione è completamente diversa: gli stati possibili di un sistema sono rappresentati dagli elementi di uno spazio vettoriale dotato di prodotto scalare (che chiameremo appunto spazio dei **vettori di stato**) e ogni grandezza fisica è rappresentata da un operatore che agisce sui vettori di stato, in modo da ottenere i possibili valori delle grandezze fisiche a cui l'operatore è associato (chiarirò meglio cosa intendo con questo nel prossimo paragrafo).

Le possibili grandezze fisiche che si possono costruire (che chiameremo **osservabili**), per esempio per una particella in interazione, sono quelle della meccanica classica (su tutte l'energia, che sarà l'unica su cui potrò fare un discorso articolato in questi appunti). Ma ve ne sono anche altre del tutto nuove, completamente “quantistiche”, come la parità o il momento angolare intrinseco (**spin**) di una particella; non ci potremo occupare ora di queste ultime, come potete facilmente immaginare.

Finora tutto appare molto nebuloso (per usare un eufemismo...); per fortuna la meccanica quantistica consente percorsi non troppo complicati per parlare di vettori di stato e osservabili, in particolare l'osservabile energia (che come già detto sarà l'unica che tratteremo con un minimo di articolazione). Gli assiomi della teoria (sui quali non mi posso soffermare, dovete fidarvi...) consentono vari modi di descrivere vettori e osservabili, detti **rappresentazioni**; nella rappresentazione che useremo, detta rappresentazione di

Schrödinger, per una particella un vettore di stato è una funzione **a valori complessi** della posizione e del tempo, indicata con $\Psi(\vec{r}, t)$ e detta **funzione d'onda** della particella.

Una proprietà fondamentale della funzione d'onda di una particella è legata all'informazione sulla probabilità di individuare la posizione della particella in una data zona dello spazio a un certo istante; per l'esattezza la probabilità che la particella occupi a un dato istante t un volumetto infinitesimo $dxdydz$ centrato in un punto P_0 vale:

$$dP = |\psi(\vec{r}_0, t)|^2 dxdydz \quad (1.1)$$

In altre parole $|\psi(\vec{r}_0, t)|^2$ è la **densità di probabilità** di individuare la posizione della particella nello spazio. Per poter chiarire l'uso della (1.1), occorre costruire funzioni d'onda in situazioni concrete; lo faremo in due casi significativi.

2) Stati stazionari e equazione di Schrödinger

Consideriamo una particella (elettrone) immersa in un campo conservativo ad un istante fissato, diciamo $t = 0$. Applicando i principi della teoria, si possono definire particolari stati, detti stati stazionari, e quindi particolari funzioni d'onda $\Psi(\vec{r}, t)$, nei quali l'energia E del sistema non dipende dal tempo; tali stati corrispondono in meccanica classica a quelli in cui vale la legge di conservazione dell'energia (particella libera o in un campo conservativo). In uno stato stazionario con energia E la funzione d'onda si può scrivere:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r}) \cdot e^{-i\omega t} \quad (2.1)$$

con $\omega = \frac{E}{\hbar}$ e con $\psi(\vec{r})$ funzione a valori complessi che rappresenta lo stato del sistema all'istante $t = 0$. Faccio notare che dalla (2.1) la densità di probabilità di individuare la posizione della particella è indipendente dal tempo. Resta da capire come sia possibile individuare i possibili valori di E ; imponiamo che siano numeri reali e, da quanto imparato sull'atomo di Bohr, ci si può aspettare per un dato sistema fisico anche valori discreti e non solo continui come quelli della fisica classica.

In realtà la Meccanica Quantistica fissa i valori possibili E dell'energia di una particella in un'equazione fondamentale, detta equazione di Schrödinger, che contiene come incognite le funzioni $\psi(\vec{r})$ e le cui soluzioni, dette **autofunzioni** dell'osservabile energia, corrisponderanno ognuna a un possibile valore E assunto dall'energia della particella, detto **autovalore**. L'equazione di Schrödinger ha la forma seguente:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U(\vec{r}) \cdot \psi(\vec{r}) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad (2.2)$$

Come si vede la (2.2) è in generale un'equazione differenziale non ordinaria ma **alle derivate parziali**; qui la grandezza $U(\vec{r})$ è la funzione che esprime l'energia potenziale in meccanica classica, ad esempio per l'elettrone nel campo elettrico di un protone (atomo di idrogeno) $U(\vec{r}) = -\frac{k \cdot e^2}{r}$, per la particella libera $U(\vec{r}) = 0$ etc... .

La (2.2) può apparire una “ricetta” un po’ bislacca ma è coerentemente inquadrata nel sistema di assiomi della teoria; è ormai da più di 90 anni il riferimento principale per interpretare un numero enorme di fatti sperimentali relativi a sistemi fisici microscopici in moto con velocità $v \ll c$, cioè in sostanza tutti gli atomi e le molecole che ci circondano (e anche quelli di cui siamo costituiti...).

3) Due applicazioni.

3a Particella libera

Per una particella libera (per fissare le idee, un elettrone di massa m) la (2.2) diventa:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad (3.1)$$

Dobbiamo risolvere la (3.1), per cominciare a trovare le prime (e le più semplici) funzioni d’onda. Possiamo pensare a una preparazione di stati della particella in cui la direzione del moto è prefissata: ad esempio, selezioniamo gli elettroni emessi da un filamento riscaldato con un sistema (lo chiameremo collimatore) che selezioni una ben precisa direzione del moto degli elettroni, che chiameremo al solito asse x . In Ottica succede spesso la stessa cosa selezionando da una sorgente di piccole dimensioni un fascio luminoso di direzione definita, ad esempio con un sistema di lenti convergenti. Con questa operazione preliminare potremo supporre che la funzione d’onda dipenda solo dalla coordinata x , cioè si riduca alla forma $\psi(x)$. Le derivate parziali rispetto a y e z si annullano e possiamo scrivere più semplicemente la (4), ricominciando a usare i familiari apici nella derivazione:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi''(x) = E \cdot \psi(x) \quad (3.2)$$

Ricordiamo che $\psi(x)$ è in generale una funzione a valori nell’insieme \mathcal{C} dei numeri complessi ; i possibili autovalori dell’osservabile energia della particella libera sono (ragionevolmente) collegati dall’impianto teorico della Meccanica Quantistica a quelli dell’osservabile velocità, oppure (che è quasi lo stesso ma preferibile) a quelli dell’osservabile impulso, che nella nostra approssimazione non relativistica vale $p = mv$. Qui non ho usato vettori perché adopero solo una componente essendo nel caso unidimensionale. Per gli autovalori E dell’osservabile energia, dato che per la particella libera è tutta cinetica, qui sono tali che $E \geq 0$; essi sono legati agli autovalori dell’osservabile impulso dalla nota relazione:

$$E = \frac{p^2}{2m} \quad (3.3)$$

Con la (3.3) la (3.2) diventa:

$$\psi''(x) + k^2 \cdot \psi(x) = 0 \quad (3.4)$$

con
$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} = \frac{p^2}{\hbar^2} \quad (3.5)$$

Vediamo dove ci porta questa equazione. Si può dimostrare che la soluzione generale è, ponendo dalla (3.5) $k = \frac{p}{\hbar}$ con p autovalore positivo dell'impulso e con A e B costanti complesse:

$$\psi(x) = A \cdot e^{ikx} + B \cdot e^{-ikx} \quad (3.6)$$

Possiamo ottenere la funzione d'onda della particella libera al generico istante t sostituendo la (3.6) nella (3.1):

$$\Psi(x, t) = A \cdot e^{ikx - \omega t} + B \cdot e^{-ikx - \omega t} \quad (3.7)$$

Analizziamo ciascuno degli addendi della (3.7): il primo rappresenta un'onda piana che si propaga nel verso positivo dell'asse x , il secondo ancora un'onda piana che si propaga nel verso negativo. Se il nostro sistema di selezione del moto della particella, oltre alla direzione, consente di scegliere anche il verso del moto (in genere il nostro collimatore lo fa in modo "automatico", vedi esperienza di Davisson e Germer), possiamo considerare un unico addendo, diciamo il primo, ottenendo un'onda "complessa" (di cui la parte reale o la parte immaginaria corrispondono al tipo di onde che conosciamo) che si propaga nel verso positivo dell'asse x :

$$\Psi(x, t) = A \cdot e^{ikx - \omega t} \quad (3.7bis)$$

Dato che per un'onda armonica $\lambda = \frac{2\pi}{k}$ dalla (3.5) scopriamo che

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (3.8)$$

L'onda ipotizzata da De Broglie per l'elettrone è semplicemente (per modo di dire...) la funzione d'onda per la particella libera.

Osserviamo un fatto interessante, uno dei tanti decisamente sconvolgenti generati dalla teoria: la probabilità di individuare la posizione dell'elettrone è la stessa in tutti i punti, infatti $|\Psi(x, t)|^2$ della (3.7bis) è indipendente da x oltre che dal tempo. Ciò è in realtà del tutto coerente con la teoria: dipende dal fatto che la (3.7bis) è un'autofunzione dell'impulso, cioè l'impulso ha un valore $p = \hbar k$ determinato; uno dei più noti risultati della Meccanica Quantistica (la cosiddetta relazione, o principio, di **indeterminazione**) afferma che allora la posizione deve essere completamente indeterminata. Non posso parlare di questo ora, ci vogliono troppi elementi da chiarire e ritengo che non sia il caso.

3 b : L'atomo di idrogeno

Per l'atomo di idrogeno l'equazione di Schrödinger (2.2) si scrive:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - k \cdot \frac{e^2}{r} = E \cdot \psi(\vec{r}) \quad (3.9)$$

Questa equazione è molto più complicata da risolvere di quella della particella libera; come si può intuire, la simmetria della funzione $U(\vec{r}) = -\frac{k \cdot e^2}{r}$ suggerisce di risolverla usando il corrispondente tridimensionale delle coordinate polari nel piano, con la variabile r e i due angoli corrispondenti alla latitudine e longitudine come sulla superficie terrestre. Utilizzando un formalismo molto raffinato, che non è assolutamente alla nostra portata, sono stati calcolati (Schrödinger propose questa equazione nel 1925) autofunzioni e autovalori della (3.9) ottenendo come risultato per i possibili autovalori dell'energia proprio quelli di Bohr(!):

$$E_n = -\frac{R_y}{n^2} \quad (3.10)$$

con $R_y = 13,6 \text{ eV}$ costante di Rydberg. Gli autovalori dell'energia sono qui descritti da un solo numero intero, detto **numero quantico principale**, che è il solito numero naturale $n \geq 1$; le autofunzioni sono qui la grossa novità, dato che nella teoria di Bohr gli stati dell'elettrone erano le traiettorie del suo moto circolare uniforme.

Le soluzioni della (3.9) sono descritte da tre numeri quantici:

- 1) il numero quantico principale n appena (re)introdotto;
- 2) per ogni fissato n , ci sono n possibili numeri quantici detti l di valori

$$l = 0, 1, \dots, n-1$$

- 3) per ogni fissato l , ci sono $2l + 1$ numeri quantici detti m_l di valori

$$m_l = -l, -(l-1), \dots, 0, 1, \dots, (l-1), l$$

Ogni soluzione della (3.9) si può descrivere dunque in termini della terna (n, l, m_l) .

Nell'atomo di idrogeno per ogni fissato n , e quindi per ogni fissata energia $E_n = -\frac{R_y}{n^2}$, abbiamo, come si può facilmente verificare, n^2 autofunzioni distinte; solo il livello fondamentale, con $n = 1$, è non degenere, tutti gli altri lo sono (ad. es. per $n = 10$ ci sono 100 autofunzioni con quell'energia!).

Come il numero quantico n è associato all'osservabile energia e alla sua conservazione nel sistema atomo di idrogeno, la struttura della meccanica quantistica associa i numeri quantici l e m_l rispettivamente alle osservabili seguenti, associate al **momento angolare** \vec{L} dell'elettrone e alla loro conservazione: quadrato del momento angolare \vec{L}^2 e componente L_z di \vec{L} . Queste due osservabili sono entrambe misurabili simultaneamente tra loro e all'energia (osservabili compatibili) e le nostre autofunzioni hanno contemporaneamente le tre grandezze con valore determinato; la cosa non è scontata ed è una peculiarità della teoria, c'è un esempio famoso di coppia di osservabili non compatibili che sono la posizione e l'impulso di una particella quantistica. Per l'esattezza, gli autovalori dell'osservabile \vec{L}^2 e L_z sono rispettivamente:

$$L^2 = \hbar^2 \cdot l(l + 1) \quad (3.11)$$

$$L_z = \hbar \cdot m \quad (3.12)$$

In conclusione non posso fare a meno di scrivere la soluzione della (3.9) corrispondente al livello fondamentale, che come già detto è l'unico non degenerare, cioè $n = 1, l = m_l = 0$:

$$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi} \cdot a_0^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (3.13)$$

con a_0 raggio di Bohr; la funzione ha simmetria sferica e questo è compatibile con il valore nullo del momento angolare di quello stato.

Giorgio Cellai, docente di matematica e fisica all'I.I.S. "G. Carducci" Volterra.