

# Dal Quark al Quasar

*Pensieri di Fisica, sulla Natura e sull'Universo*

## L'equazione di Schrödinger

Domenica 23 ottobre 2005

Caro Amico,

l'incredibile e sorprendente varietà e stranezza dei fenomeni del mondo microscopico, di cui hai avuto un accenno nella nostra precedente lettera dedicata ad una sommaria descrizione dell'esperimento di Davisson e Germer, è stata almeno in parte "ingabbiata" nel primo quarto del XX secolo in una costruzione teorica nota come *Meccanica Quantistica* o *Meccanica dei Quanti*. Se da allora ad oggi molta strada è stata fatta, e la Meccanica Quantistica, anche dal punto di vista della sua formulazione teorica, è cresciuta moltissimo, è pur vero che lo schema interpretativo di base dei fenomeni del mondo microscopico, anche conosciuto come *Scuola di Copenhagen*, è sostanzialmente rimasto immutato. In questa lettera, e nelle prossime che si occuperanno di questi temi, vorrei introdurti alla Meccanica Quantistica sorvolando il più possibile sui dettagli matematici e concentrandomi soprattutto sulle idee, anche su quelle scomode o sorprendenti; non potremo comunque fare a meno di scrivere, di quando in quando, qualche formula, ma so che la cosa non ti disturberà. E inizieremo già oggi, perché, come sai, ci occuperemo dell'*equazione di Schrödinger*.

Ogni teoria fisica che abbia la pretesa di essere sufficientemente generale da abbracciare una o più classi di fenomeni ha alle sue spalle una o più ipotesi e una o più equazioni fondamentali. Le ipotesi sono dei dati di fatto, delle evidenze sperimentali, ovvie (perché sotto gli occhi di tutti) o tutt'altro che tali (perché sorprendenti, come spesso succede nel mondo dell'infinitamente piccolo), ma assolutamente da accettare *a priori*, senza alcuna dimostrazione; essendo dei fatti, risultati di esperimenti riproducibili, sono qualche cosa che non si può né dimostrare né confutare (se non con un altro esperimento riproducibile che ne dimostri i limiti o la falsità), ma bisogna accettare; la teoria che parte da essi dovrà prenderli come assunzioni di partenza, ipotesi inopinabili con cui costruire le proprie fondamenta. Le equazioni fondamentali della teoria sono, anche loro, da accettare come dei dati di fatto. La celebre espressione  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$  che esprime, in formule, la ben nota *seconda legge della dinamica* o *legge di Newton*, e che lega la massa (inerziale) di un corpo, la forza a cui è sottoposto e l'accelerazione che ne consegue, è un esempio di quanto voglio dire: non è una legge dimostrabile (in dinamica classica), non è una conseguenza di qualche principio o ragionamento, non è qualche cosa che possa trovare una giustificazione a seguito di un qualche particolare processo logico o matematico. È un'assunzione che si fa *a priori*, accettata ed accettabile fin tanto che *a posteriori* descrive, qualitativamente e quantitativamente, una varietà di fenomeni, che grazie ad essa trovano una spiegazione unitaria, coerente, quantitativamente affidabile. Rinunceremo ad essa quando un'altra teoria, costruita con le stesse modalità, includerà questa come un caso speciale, o quando un esperimento ne evidenzierà i limiti, oltre i quali nuove ipotesi e nuove equazioni fondamentali saranno necessarie (nel caso specifico l'altra teoria sarà la *teoria generale della relatività*, o *Relatività Generale*, di cui magari, un giorno, parleremo).

Non è diverso il caso della Meccanica Quantistica, che nella sua versione non relativistica trova fondamento nell'*equazione di Schrödinger*, anch'essa da accettare come un dato di fatto, una legge naturale, in quanto efficace nel descrivere i fenomeni noti e di prevederne accuratamente altri. Iniziamo, senza indugiare oltre, a vedere com'è fatta questa equazione:

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

Dietro alla sua aria innocua (in fondo è corta e conta pochi simboli) nasconde in realtà numerose insidie e sorprese, e della matematica non sempre banale. Cercheremo però oggi di farci un'idea approssimativa di che cos'è e come funziona questa equazione, e di quali risultati ci permetterà di ottenere (di questi ultimi ne parleremo nella nostra prossima lettera). Incominciamo col definire i simboli di cui è costituita:

- $i$ : l'unità immaginaria, definita come  $i = \sqrt{-1}$ ; può sembrare un po' assurdo che in un'equazione che descrive un fenomeno fisico ci sia un numero complesso, un qualche cosa di così stravagante, di così

fuori dalla comune percezione. In realtà la cosa non deve preoccupare affatto; l'uso della notazione complessa, e quindi dell'unità immaginaria, è un artificio, un trucco matematico per dare all'equazione una forma più compatta. In altre parole, è soltanto una scelta di un formalismo matematico che riassume in sé una varietà di scritture più ampia; rinunciare alla notazione complessa vorrebbe dire rendere più complicata la scrittura dell'equazione di Schrödinger, dovendo contemplare per essa casi diversi (ad esempio i casi di soluzioni esponenziali e di soluzioni trigonometriche) che invece la notazione complessa permette di riassumere in un'unica scrittura. Quindi, volendo, potremmo perfettamente rinunciare all'uso dei numeri complessi; li usiamo, solo perché essi consentono di maneggiare l'equazione, e le sue soluzioni, in maniera più compatta, più pratica e più elegante;

- $\hbar$ : detto *acca tagliato*, è un simbolo di una costante fisica fondamentale; definito come  $\hbar = h / 2\pi$ , dove  $h$  è la *costante di Planck* che nel Sistema Internazionale delle Unità di Misura vale  $6.6260693 \cdot 10^{-34}$  Js.  $\hbar$  è un simbolo che gioca un ruolo fondamentale in Meccanica Quantistica, compare ovunque, e ad esso si devono, in ultima analisi, i comportamenti peculiari dei fenomeni fisici su scala atomica (e a scale inferiori). Infatti  $h$  è anche detto *quanto d'azione* (l'*azione* è la grandezza che si misura in Js), e tutte le grandezze che siamo abituati a considerare continue in un qualunque sistema fisico (come l'energia, o il momento angolare per fare due esempi) in Meccanica Quantistica saranno invece costretti ad essere dei multipli del quanto d'azione, senza poter più assumere, con continuità, qualunque valore. Questa caratteristica, che qui è ancora così nebulosa e tutt'altro che giustificata, sarà ciò che maggiormente differenzierà i risultati della Meccanica Quantistica da quelli della Meccanica Classica, che descrive i fenomeni macroscopici che abbiamo tutti i giorni davanti agli occhi, al punto che, matematicamente, se potessimo far tendere a zero (con un'operazione di limite) il valore di  $h$  le equazioni della Meccanica Quantistica tornerebbero a diventare le usuali equazioni della Meccanica Classica. Naturalmente è un'operazione del tutto ideale:  $h$  è una costante fisica, e non può essere fatta tendere a zero; matematicamente, però, è possibile farlo, e fisicamente tale limite ha senso in tutte quelle condizioni in cui la differenza tra le previsioni della Meccanica Quantistica e quelle della Meccanica Classica è così piccola da poter essere trascurata; in questi casi, che corrispondono poi a sistemi fisici così grandi da allontanarsi dalla scala atomica o molecolare, effettuare il limite per  $h$  che tende a zero, ancorché fisicamente scorretto, diventa accettabile in virtù del fatto che le equazioni della Meccanica Quantistica tornano ad essere quelle della Meccanica Classica, che sappiamo descrivere efficacemente i fenomeni del mondo macroscopico; questa convergenza della Meccanica dei Quanti in quella Classica al crescere delle dimensioni del sistema fisico in esame (e al tendere di  $h$  a zero) è nota come *principio di corrispondenza di Bohr*;
- $\psi$ : lettera greca che si legge *psi*, è anche detta *funzione d'onda* del sistema fisico che stiamo studiando con l'equazione di Schrödinger. Tale equazione, infatti, come tutte le equazioni avrà delle soluzioni. Se pensiamo alle equazioni più semplici, le equazioni algebriche, ben conosciamo il significato dei vari termini che vi compaiono; ad esempio l'equazione algebrica  $2x + 5 = x - 3$  è costituita da due *membri*, a sinistra e a destra del segno di uguale, e da un'incognita,  $x$ , che è un numero tale per cui l'identità proposta dall'equazione sia soddisfatta. Con le usuali regole algebriche, è facile verificare che la *soluzione* dell'equazione proposta è  $x = -8$ . L'equazione di Schrödinger non è differente. A sinistra e a destra del segno di uguale ci sono due membri (sul cui significato fisico discuteremo più oltre), e anch'essa ha un'incognita,  $\psi$  per l'appunto. La differenza fondamentale tra l'equazione di Schrödinger (e molte altre equazioni, naturalmente) e un'equazione algebrica è che l'incognita non è un numero, ma una *funzione*. A prima vista questa cosa può sembrare sorprendente e molto complicata, e infatti la matematica che c'è dietro è senz'altro più complessa rispetto a quella delle equazioni algebriche, ma la cosa non deve preoccuparci troppo, perché come sempre qui non siamo interessati ai dettagli del formalismo, siamo interessati alle idee che ci sono dietro; e le idee, per fortuna, sono semplici. Un'equazione algebrica consente di determinare una soluzione che è un numero, perché quel numero riassume in sé tutta l'informazione necessaria per risolvere il problema da cui è nata l'equazione algebrica in questione. Nel caso di un fenomeno fisico più articolato, come gli spettri di emissione di un atomo, un decadimento radioattivo, un'interazione tra particelle, un solo numero non è sufficiente a descrivere nella sua interezza il fenomeno fisico oggetto di studio; i numeri da considerare potrebbero essere molti, e soprattutto alcuni di essi potrebbero essere rappresentazioni di quantità fisiche che variano con continuità; l'equazione che governa il fenomeno (l'equazione di Schrödinger per l'appunto) dovrà allora avere a che fare con un'incognita non più numerica, ma sotto forma di *funzione*;  $\psi$ , una volta risolta l'equazione di Schrödinger per il problema oggetto di studio, conterrà in sé tutte le informazioni necessarie per conoscere lo stato, presente e futuro, del sistema fisico che stiamo studiando; ne fornirà, se vogliamo, una descrizione completa (nelle prossime lettere, quando parleremo nel dettaglio delle funzioni d'onda, vedremo che questa descrizione è sì completa, ma molto meno completa di quanto ci saremmo aspettati);

- $\frac{\partial}{\partial t}$ : questo simbolo indica un'operazione di *derivata* effettuata rispetto alla variabile  $t$ , che poi è il tempo, sulla funzione  $\psi$  (che infatti nell'equazione di Schrödinger compare subito dopo, a primo membro). L'equazione di Schrödinger, allora, a primo membro vuole che si calcoli una derivata temporale della funzione d'onda; essa sarà quindi *la variazione* al variare del tempo della soluzione  $\psi$  dell'equazione. Vedremo tra poco che cosa questo voglia veramente dire. Basti qui ricordare che spesso si è abituati a

scrivere le operazioni di derivata con una simbologia un po' diversa: ad esempio  $\frac{d}{dx} \sin x = \cos x$  è un modo per scrivere che la derivata effettuata rispetto ad  $x$  della *funzione*  $\sin x$  è uguale a  $\cos x$ . Il simbolo di derivata, in questo caso, è  $d$ . Questo perché nel nostro esempio la funzione  $\sin x$  è funzione (scusa il bisticcio) della sola variabile  $x$ . Se una funzione ha invece più di una variabile indipendente, come è il caso di  $\psi$ , allora la matematica vuole che quando si desidera effettuare un'operazione di derivata rispetto ad una sola di esse si usi il simbolo  $\partial$  in luogo di  $d$ . La cosa è un po' più complicata di così, ma per il momento, senza voler scendere troppo nei dettagli, ci possiamo accontentare. Giustificiamo infine l'uso del simbolo  $\partial$  (detto anche di *derivata parziale*) col fatto che la funzione d'onda  $\psi$  è funzione non solo del tempo ma (solitamente) anche per lo meno delle coordinate spaziali ( $x$ ,  $y$  e  $z$  ovvero le coordinate che indicano la *posizione* in uno spazio tridimensionale);

- $H$ : detta *hamiltoniana* (dal nome del matematico Hamilton), questa grandezza contiene in sé i requisiti fisici che il sistema fisico che studiamo deve soddisfare. In Meccanica Classica l'hamiltoniana è, detto un po' in soldoni, l'energia meccanica del sistema, ovvero la somma della sua energia cinetica e della sua energia potenziale. Così, in Meccanica Classica, un pendolo unidimensionale (che oscilla quindi

lungo una sola direzione  $x$ ) avrà un'energia cinetica pari a  $\frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$  dove abbiamo sfruttato la definizione  $p = mv$  dove  $p$  è detto *impulso*,  $m$  è la massa della particella oscillante e  $v$  è la sua velocità (se vuoi, anche se c'è qualche sottigliezza dietro,  $p$  è la quantità di moto del sistema), e un'energia poten-

ziale pari a  $+\frac{1}{2}kx^2$  dove  $k$  è la costante elastica del pendolo e  $x$  è naturalmente lo spostamento. L'ha-

miltoniana di questo sistema sarà allora  $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$ : la chiamiamo hamiltoniana e non semplicemente *energia totale* o *energia meccanica* perché tale quantità entra in gioco in particolari equazioni che danno forma alla cosiddetta *Meccanica Analitica*, che se vuoi è una formulazione matematicamente più completa, coerente, consistente e potente della Meccanica di Newton (quella che parte da  $\mathbf{F} = m\mathbf{a}$  per intenderci). Orbene, in Meccanica Quantistica il discorso non cambia di molto:  $H$  è sempre l'hamiltoniana del sistema oggetto di studio, essa in qualche maniera rappresenta sempre l'energia totale del sistema; ma mentre in Meccanica Classica l'hamiltoniana è una *funzione* (pensa a quella che abbiamo scritto per il pendolo o *oscillatore armonico*, che è funzione dell'impulso  $p$  e della posizione  $x$  dell'oscillatore), in Meccanica Quantistica essa diventa un *operatore*, ovvero un qualche cosa che agisce su una funzione ( $\psi$  nel nostro caso) trasformandola. Se questo ti sembra un mistero insolubile, non sei lontano dal vero: è in realtà una di quelle assunzioni che bisogna fare *a priori* e di cui discutevamo all'inizio, e che sono giustificate solo in virtù del fatto che reggono alla prova dei fatti, al confronto con l'esperimento. Per farla breve, sempre nel caso ad esempio dell'oscillatore armonico, l'hamiltoniana del sistema sarà assolutamente identica a quella che abbiamo scritto per il caso della Meccanica Classica, con l'avvertenza però che  $x$  non sarà più la posizione del sistema, ma un *operatore moltiplicativo* sulla funzione d'onda  $\psi$ , e  $p$  non sarà più l'impulso del sistema, ma un *operatore di derivazione spazia-*

le  $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ ; l'hamiltoniana dell'oscillatore armonico quantistico, allora, sarà  $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2$

ed essa non sarà più una funzione, ma un operatore che agisce (derivandola o moltiplicandola) sulla funzione d'onda  $\psi$ .

Questa lunga discussione ha forse indugiato fin troppo sulla matematica, sui dettagli, senza rendere chiara l'idea fisica che c'è dietro l'equazione di Schrödinger. Cerco allora di rimediare, ponendo fine al turbinio di formule, e facendo appello all'immaginazione e al senso fisico.

Desideriamo studiare un sistema fisico che sia descritto dalle leggi della Meccanica Quantistica, ovvero dall'equazione di Schrödinger (ad esempio un atomo, un decadimento radioattivo, un urto tra particelle, o anche un oscillatore armonico –benché non sia facile immaginare un "pendolo" quantistico, l'oscillato-

re armonico è il “mattone” fondamentale per molti problemi di elettromagnetismo affrontati sotto l’egida della Meccanica Quantistica). La natura profonda, intrinseca, specifica del sistema fisico è descritta dalla sua hamiltoniana; essa, che differirà da problema a problema, elenca le forme di energia che entrano in gioco nel sistema fisico oggetto di studio (energia cinetica, ovviamente, sia di traslazione che di rotazione –momenti angolari quindi– ma anche energie derivanti da forze elettrostatiche, elastiche o di altra natura ancora ecc.). Le proprietà specifiche del sistema che studiamo saranno racchiuse nell’incognita dell’equazione di Schrödinger, ovvero nella funzione d’onda  $\psi$ : essa dirà come viene “realizzato” il caso specifico di sistema dotato di quella particolare hamiltoniana (esempio: l’hamiltoniana può avere la stessa forma per atomi diversi, ma atomi diversi avranno diverse funzioni d’onda, oppure elettroni diversi nello stesso atomo obbediranno alla medesima equazione di Schrödinger con la medesima hamiltoniana ma avranno funzioni d’onda diverse). L’equazione di Schrödinger mette in relazione la “tipologia” del sistema fisico (la sua hamiltoniana) con la sua “realizzazione” (la funzione d’onda) e con la sua evoluzione temporale (la derivata temporale sulla funzione d’onda che c’è a primo membro). In altre parole, l’equazione di Schrödinger consente di determinare, precisamente, compiutamente e deterministicamente, *com’è fatto* (il secondo membro dell’equazione) e *come si comporterà in ogni istante futuro* (il primo membro dell’equazione) il nostro sistema fisico, grazie al calcolo della funzione d’onda  $\psi$  che, in qualche maniera, lo descrive. Il segno di uguale che collega i due membri dell’equazione (ti faccio notare che la funzione d’onda  $\psi$  compare in entrambi) è quello grazie al quale l’evoluzione temporale del sistema e il modo con cui esso si realizza sono profondamente legati tra di loro.

Ci tengo a precisarlo ancora: l’equazione di Schrödinger è perfettamente *deterministica*: data l’hamiltoniana del problema, la funzione d’onda viene calcolata senza incertezza alcuna (difficoltà matematiche a parte) *ad ogni istante di tempo*; ovvero, ad ogni istante di tempo il comportamento del sistema è *perfettamente noto*. Come sia possibile conciliare questo con l’intrinseca casualità e stocasticità dei sistemi quantistici, di cui un assaggio hai avuto nella lettera scorsa dedicata all’esperimento di Davisson e Germer, sarà oggetto della nostra prossima epistola, in cui parleremo, finalmente, di che cosa sia e di come si possa interpretare la funzione d’onda di un problema quantistico.

A presto,

Marco