



Lezione n. 1

Il dualismo onda - particella

Fisica dei Semiconduttori

SOMMARIO

In questa lezione ripercorriamo i principali fatti che, agli inizi del novecento, portarono alla crisi della meccanica classica ed al concetto di dualismo onda-particella:

- a. L'ipotesi di Planck e il corpo nero**
- b. L'effetto Fotoelettrico**
- c. Primi modelli atomici - Atomo di Bohr**
- d. Elettroni come Onde di Materia**
- e. Principio di Indeterminazione di Heisenberg**
- f. Particella come pacchetto d'onda**
- g. L'equazione di Schroedinger**

Introduzione al dualismo onda - particella

Una particella è caratterizzabile tramite le grandezze fisiche posizione, quantità di moto (detta anche *momento lineare* o più semplicemente *momento*) energia cinetica, massa, carica elettrica.

Un'onda è invece caratterizzata da lunghezza d'onda, frequenza, velocità, ampiezza, intensità, energia, momento.

Classicamente, una importante differenza tra i concetti di onda e particella è che la particella è localizzata in un punto dello spazio mentre l'onda è generalmente dispersa e può occupare una grande porzione di spazio.

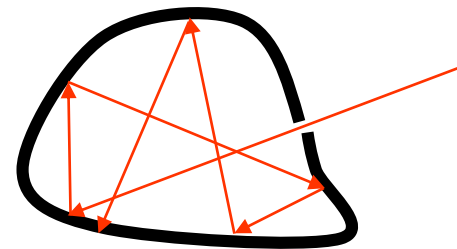
Dai primi anni del secolo ventesimo ci si è resi conto che molti fenomeni osservati sperimentalmente venivano spiegati con successo se si interpretavano le onde come corpuscoli e le particelle come onde: un fenomeno detto *dualismo onda-particella*.

Quantizzazione dell'energia elettromagnetica

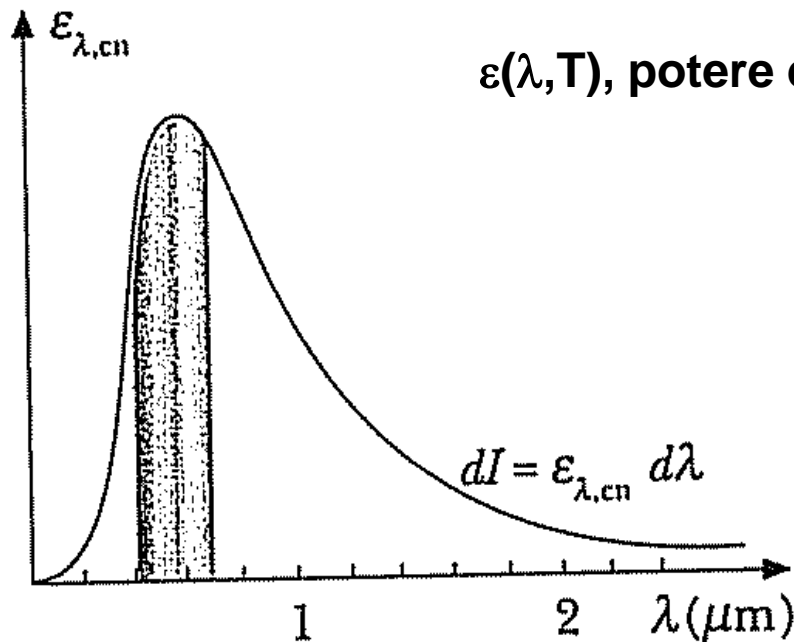
a. Corpo nero

Qualsiasi corpo solido o liquido che si trovi ad una certa temperatura emette radiazioni elettromagnetiche (**irraggiamento**). Lo spettro di emissione di tale radiazione dipende fortemente dal potere del corpo di riflettere e assorbire le radiazioni elettromagnetiche che lo colpiscono. Per ricavare una legge generale che descriva l'emissione termica dei corpi solidi e liquidi ci si riferisce in genere ad un corpo ideale chiamato **CORPO NERO**. Esso ha la proprietà di assorbire completamente qualsiasi radiazione che lo colpisca, ovvero non riflette la radiazione elettromagnetica che lo colpisce. Per visualizzare il concetto di corpo nero si può considerare una cavità munita di un piccolo

foro. La radiazione elettromagnetica che entra nel foro colpisce le pareti della cavità venendone parzialmente riflessa più volte finché non viene completamente assorbita dagli atomi delle pareti. La radiazione elettromagnetica che è entrata dal foro rimane così intrappolata nella cavità e tutta la sua energia viene assorbita dagli atomi sulle pareti della cavità, il piccolo foro appare infatti nero se lo si guarda dall'esterno.



Lo spettro di emissione di un corpo nero venne misurato con precisione la prima volta verso la fine del 1800. L'andamento di ϵ , **potere emissivo specifico del corpo nero**, rispetto alla lunghezza d'onda è mostrato in figura. Tale risultato sperimentale è detto **legge di Wien**. Il grafico si riferisce alla temperatura di 6000K, corrispondente alla temperatura della superficie del sole (che con buona approssimazione si comporta appunto come un corpo nero).



$\epsilon(\lambda, T)$, potere emissivo specifico, si misura in W/m^3 .

$dI = \epsilon(\lambda, T)d\lambda$, area sottesa da una porzione infinitesima di curva, rappresenta l'energia emessa dal corpo nero per unità di tempo e di superficie, ovvero la sua intensità, riferita all'intervallo infinitesimo di lunghezza d'onda $d\lambda$ considerato.

Nella figura è evidenziato l'intervallo delle lunghezze d'onda visibili dall'occhio umano: la **luce**. Il massimo della curva, intorno a $\lambda = 500\text{nm}$, corrisponde all'incirca al colore giallo.

Legge di Stefan-Boltzmann

La potenza irradiata dal corpo nero per unità di superficie, cioè l'area complessiva sottesa dalla curva del potere emissivo specifico in funzione della lunghezza d'onda, risulta proporzionale alla quarta potenza della temperatura assoluta del corpo nero:

$$I = \int_0^{\infty} \varepsilon(\lambda, T) d\lambda = \sigma T^4$$

La costante σ è detta **costante di Stefan** e vale:

$$\sigma = 5.6705 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2 \text{ K}^4 .$$

Questa legge quantifica il fenomeno della trasmissione del calore, che avviene tra corpi nel vuoto e senza che essi siano a contatto a causa appunto dell'irraggiamento di radiazione elettromagnetica.

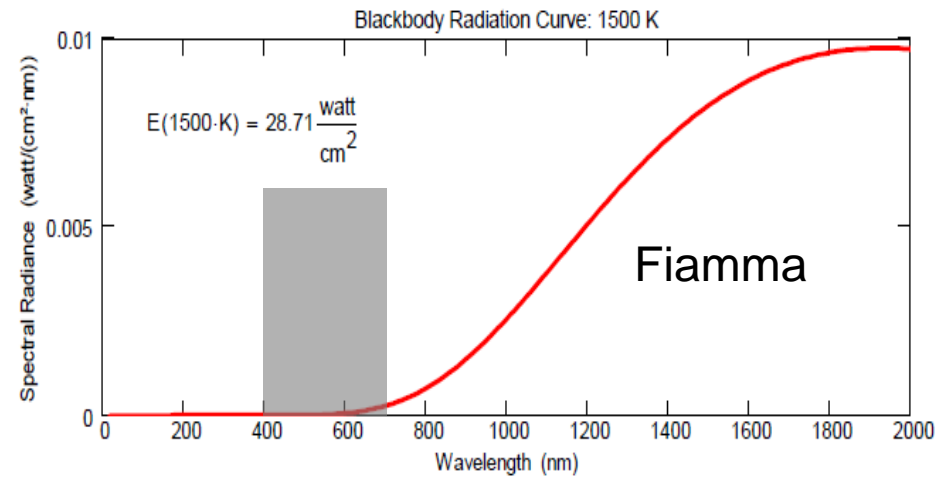
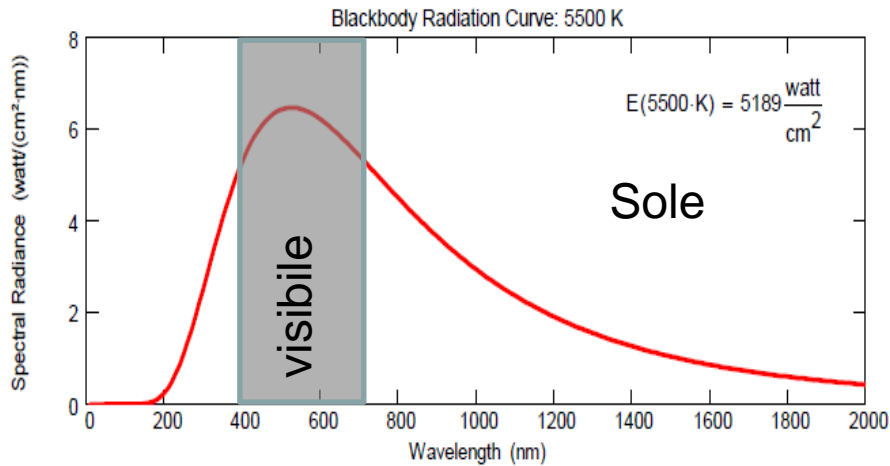
Legge di Wien

E' possibile associare allo spettro di ogni sorgente di radiazione luminosa una temperatura caratteristica T:

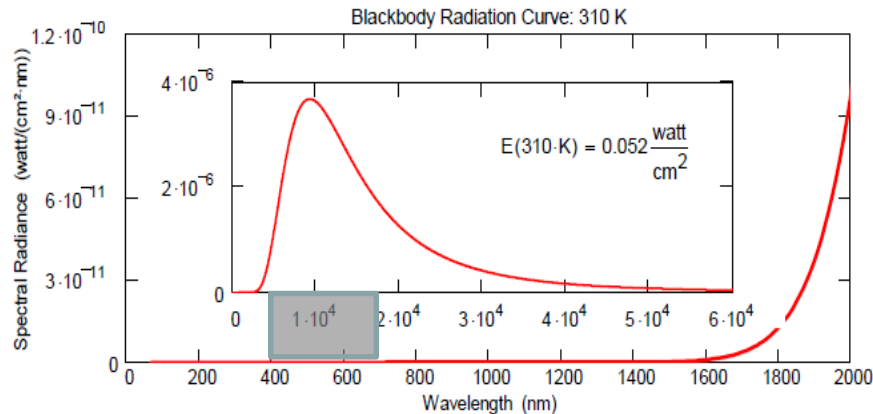
$$\lambda_{max}T = b = 2.8978 \times 10^{-3} mK$$

Luce del sole (mezzogiorno, estate, media latitudine) ≈ 5500 K

Luce di un fiammifero ≈ 1700 K



Corpo a T ambiente



Primi modelli per spiegare l'emissione di corpo nero

Gli atomi delle pareti della cavità del corpo nero si comportano come **oscillatori armonici** che emettono e assorbono energia (**onde elettromagnetiche**).

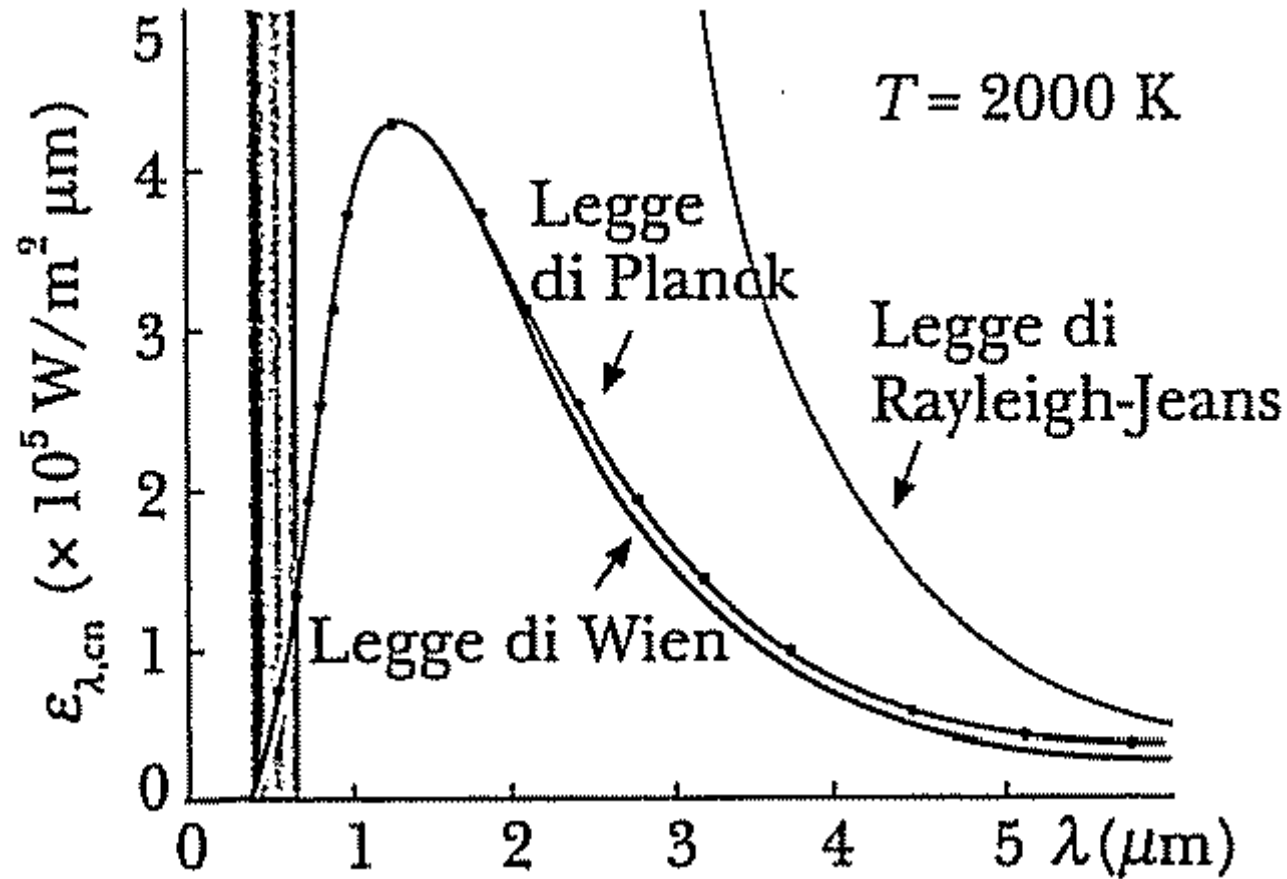
Nella trattazione classica gli oscillatori, nel loro moto armonico, possono assumere un qualsiasi valore della lunghezza d'onda. Essendo possibili tutte le lunghezze d'onda, la densità di energia totale (potere emissivo integrale) è infinita (**catastrofe ultravioletta o legge di Rayleigh-Jeans**).

Il problema è risolto da Planck nel 1900.

**Quantizzazione dell'energia dell' oscillatore armonico: $E = h\nu$,
 ν frequenza di oscillazione h costante di Planck :**

$$h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ Js.}$$

Confronto tra **legge di Wien** (misura sperimentale), **legge di Planck** (ottenuta mediante quantizzazione) e **Legge di Rayleigh - Jeans** (ottenuta con trattazione classica) per un corpo nero a $T = 2000\text{K}$. La legge di Planck descrive bene il risultato sperimentale, mentre quella di Rayleigh-Jeans diverge a basse lunghezze d'onda.



b. L'effetto fotoelettrico

Estrazione di elettroni da un metallo mediante esposizione a radiazione elettromagnetica.
Scoperto da Hertz nel 1887.

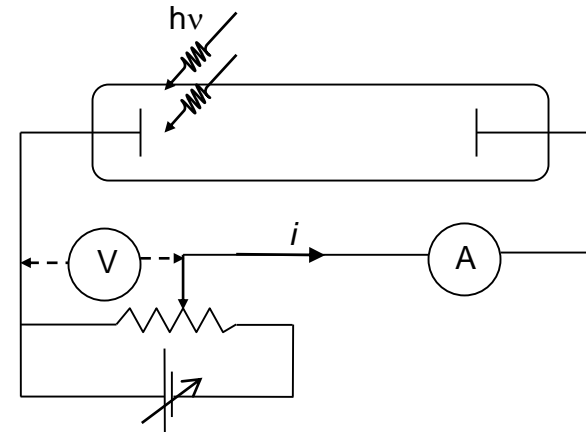
- Tubo a vuoto con due elettrodi metallici mantenuti a differenza di potenziale V .
- Fascio di radiazione elettromagnetica che incide su un elettrodo (fotocatodo).

Poniamo V tale che gli **elettroni estratti vengano accelerati** e raccolti all'anodo
E registriamo corrente nel circuito.

funzione lavoro $= \phi =$ energia minima necessaria per estrarre un elettrone dal metallo.

Energia cinetica E_K degli elettroni estratti variabile da zero al valore massimo

$E_{K_{max}} = E - \phi$, con E energia trasportata dalla radiazione.



Generatore di tensione regolabile

Interpretazione **classica** : **L'energia necessaria ad estrarre l'elettrone dal metallo è raggiunta sempre, qualunque sia la frequenza della radiazione, purché si esponga il metallo alla radiazione per un tempo sufficientemente lungo.**

INVECE: al di sotto di una certa soglia di frequenza, non si verifica passaggio di corrente, quale che siano l'intensità della radiazione e il tempo di esposizione.

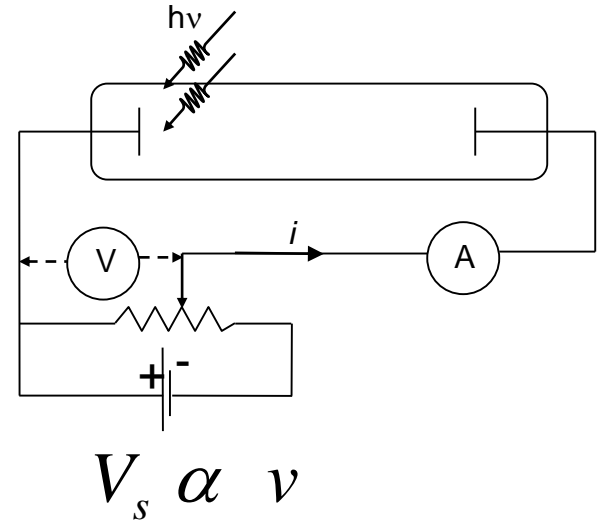
Invertiamo la polarità del generatore: **gli elettroni estratti vengono rallentati dal potenziale ritardante V** . Moduliamo V in modo che l'energia di frenamento sia esattamente pari all'energia cinetica massima degli elettroni estratti $E_K = eV_s$, ($V_s =$ stopping voltage), condizione in cui **non si ha**

passaggio di corrente valutiamo

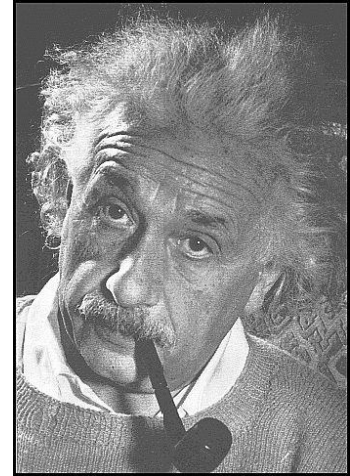
l'energia cinetica degli elettroni estratti in diverse condizioni di intensità e frequenza dell'onda.

Contrariamente all'interpretazione classica:

V_s è indipendente dall'intensità dell'onda e **dipende linearmente dalla frequenza dell'onda:**



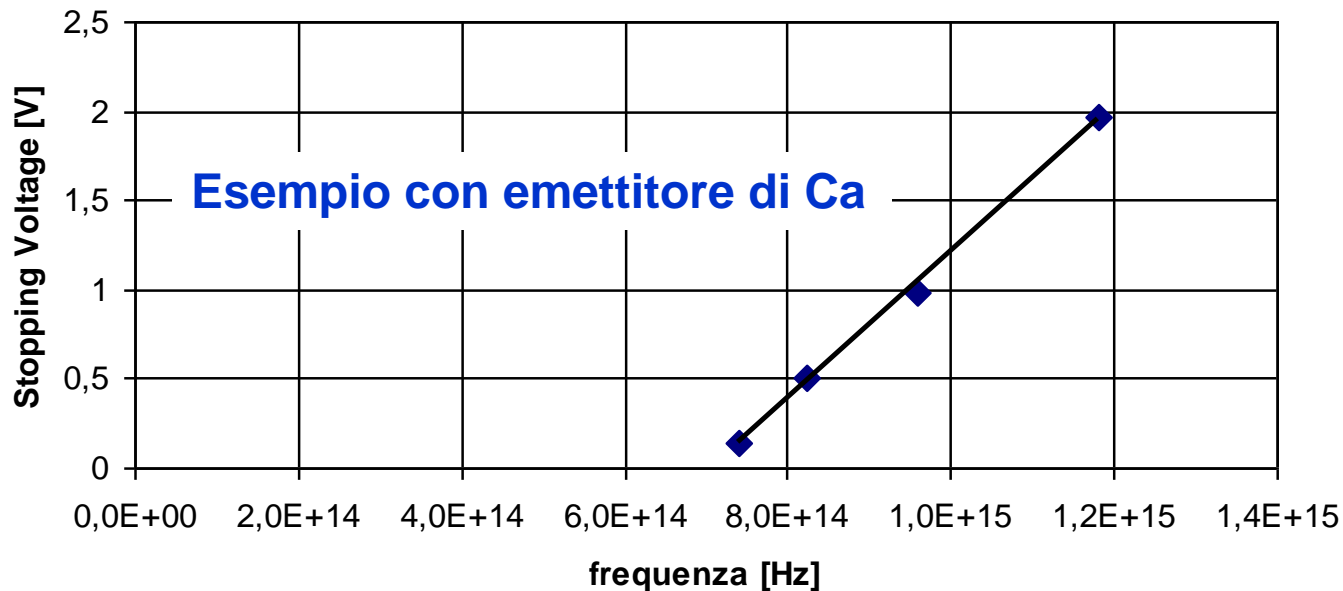
Nel 1905 Einstein spiega i risultati dell'effetto fotoelettrico ricorrendo all'ipotesi quantistica di Planck. Il quanto di energia elettromagnetica, che chiameremo **fotone**, di energia $E = h\nu$, viene assorbito dal singolo elettrone estratto. L'energia di ogni singolo fotone dipende solo dalla frequenza, è quindi indipendente dal numero di fotoni incidenti sul metallo per unità di tempo e superficie: **non è perciò in alcuna relazione con l'intensità dell'onda.** L'energia cinetica dell'elettrone estratto dipende invece dall'energia del fotone e quindi dalla frequenza dell'onda elettromagnetica.



Relazione di Einstein:
$$E_K = eV_s = h\nu - \phi$$

La frequenza di soglia dei fotoni incidenti è quella che corrisponde alla funzione lavoro: $h\nu_{th} = \phi$: per frequenze minori l'energia del fotone non è sufficiente ad estrarre gli elettroni.

Mediante l'effetto fotoelettrico è possibile determinare il valore della costante di Planck e la funzione lavoro ϕ del materiale emettitore.



Quantità di moto (momento) della radiazione elettromagnetica

Un'onda elettromagnetica, oltre all'energia, trasporta momento.

Equazione di un'onda piana :

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}$$

Esempio onda armonica: $\phi = E_0 \cos(kx - \omega t)$. Allora:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} = -k^2 \varphi$$

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -\omega^2 \varphi \quad \text{otteniamo:} \quad \omega = kc \quad \text{moltiplicando per } \hbar = \frac{h}{2\pi}$$

$$E = \hbar\omega = \hbar kc = pc \quad \text{Con } p = \hbar k \quad \text{quantità di moto dell'onda.}$$

L'energia E e il momento p in un'onda elettromagnetica che viaggia nel vuoto sono legate dalla relazione $\mathbf{E} = \mathbf{p}c$ dove c è la velocità della luce nel vuoto.

Fotoni come quanti di radiazione elettromagnetica

La **teoria della relatività di Einstein** fissa una **relazione di equivalenza energia-massa**:

$$E = mc^2 = c\sqrt{m_0^2c^2 + p^2}$$

Con m **massa dinamica** ed m_0 **massa a riposo** (massa che assume la particella quando è ferma). Nel caso del fotone $m_0 = 0$ e quindi $E = pc$

Poiché $E = h\nu$ abbiamo :

$$p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$$

Associamo all'onda elettromagnetica di frequenza ν la **particella fotone**, con le seguenti caratteristiche:

Energia : $E_f = h\nu$; momento: $p_f = mc = h/\lambda$; massa a riposo nulla.

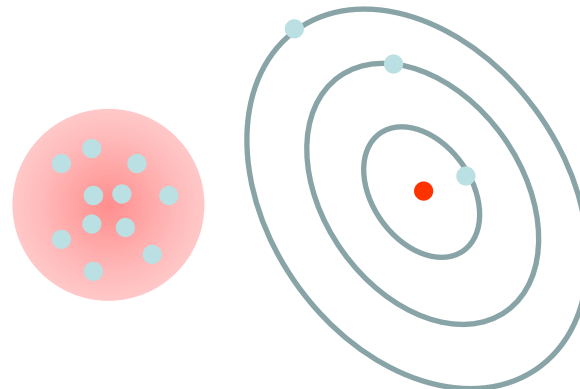
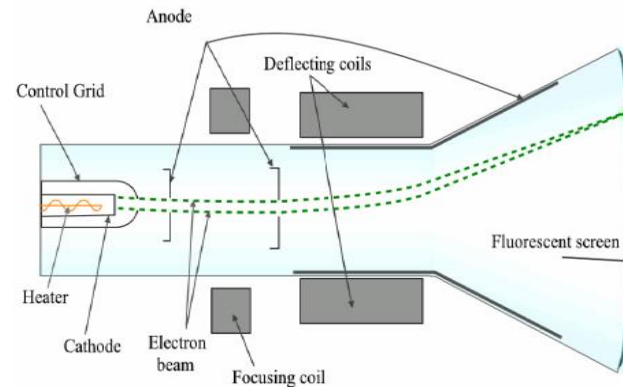
Primi Modelli Atomici

L'idea che la materia fosse composta da piccolissime particelle indivisibili chiamate **atomi** (che in greco vuol dire senza parti, cioè indivisibile) fu proposta già da filosofi greci del V secolo a.C. Dopo la sua scoperta dell'elettrone, nel 1897 (deflessione nei raggi catodici), Thomson

sviluppa un primo modello, in cui l'atomo è composto da una regione di carica positiva nella quale sono immersi gli elettroni (detto anche *modello a panettone*: gli elettroni come l'uvetta , la regione in cui sono immersi la pasta).

Esperimenti di Rutherford nel 1909 (bombardamento di sottili fogli d'oro con particelle alfa) mostrano che gran parte della massa dell'atomo deve essere concentrata in un nucleo molto piccolo e compatto di carica positiva.

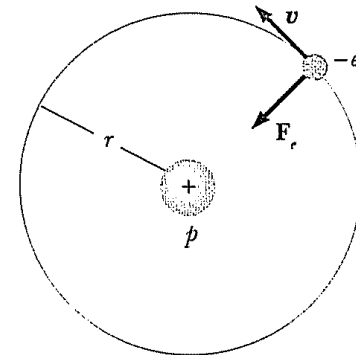
In questo modello (detto *planetario*) gli elettroni ruotano intorno al nucleo a diverse distanze da esso, come in un sistema solare miniaturizzato .



Il modello planetario

Nel modello planetario gli elettroni sono considerati in orbita intorno ad un nucleo carico positivamente, posto al centro. Nel caso semplice dell'idrogeno, con un solo elettrone, che compie un'orbita circolare di raggio r attorno al protone, su di esso agisce la forza di Coulomb che corrisponde alla forza centripeta che mantiene l'elettrone sull'orbita circolare:

$$m \frac{v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

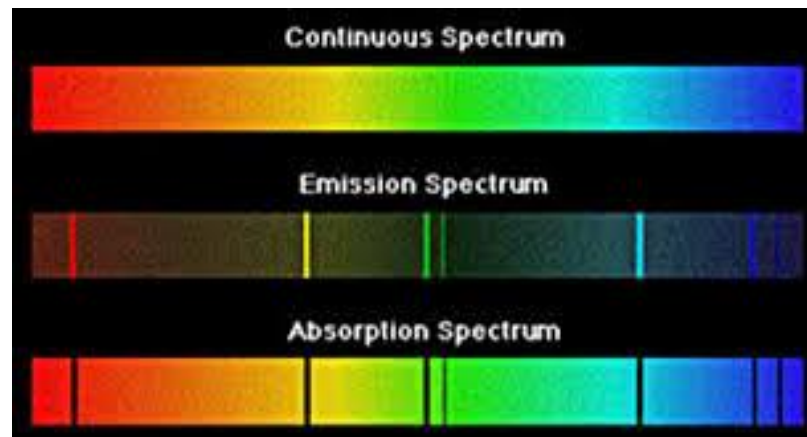


L'energia totale dell'elettrone è la somma dell'energia cinetica e dell'energia potenziale:

$$U = E_k + U_e = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{2} m_e v^2 = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Problemi del modello planetario

1. Nella trattazione classica, l'elettrone in orbita, essendo in moto accelerato, **emette radiazione elettromagnetica**, dovrebbe quindi perdere progressivamente energia fino a cadere sul protone. **Quindi l'elettrone in orbita intorno al nucleo classicamente non è in una configurazione stabile.**
2. Sperimentale era già noto che tutti gli atomi emettono ed assorbono radiazione elettromagnetica soltanto a ben determinate frequenze. **La luce emessa da atomi di un particolare elemento chimico non è caratterizzata dallo spettro continuo ma da una serie di righe (linee spettrali) in corrispondenza di tali frequenze.** Viceversa, se illuminiamo con spettro continuo tali atomi osserviamo che l'assorbimento produce delle righe nere nello spettro, in corrispondenza con le frequenze di radiazione assorbita.



L'atomo di Bohr

Nel 1913 Niels Bohr, al fine di risolvere le contraddizioni del modello planetario, estese il modello di Rutherford in modo da comprendervi l'ipotesi di Planck. **Il suo modello semi-classico si fonda su tre postulati:**

1. Nell'atomo l'elettrone può occupare soltanto determinate traiettorie discrete di energia E_n (**$n = \text{numero quantico} = 1,2,3 \dots$**) detti stati stazionari.
2. L'elettrone in un' orbita stazionaria non emette radiazione. In caso di passaggio da un livello energetico n ad un altro livello più basso/alto m viene emessa/assorbita energia pari a $\Delta E = E_n - E_m = h \nu$ sotto forma di un fotone .
3. Il momento angolare dell'elettrone è quantizzato secondo la regola:

$$L = m_e v r = n \frac{h}{2\pi} = n \hbar$$

E' semplice mostrare che attraverso il 3° postulato si quantizzano il raggio r delle orbite possibili per l'elettrone

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} n^2 = (0.529 \cdot 10^{-10}) n^2 \quad ; \quad n = 1, 2, \dots$$

e la sua energia:

$$U_n = -\frac{1}{2} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_n} = -\frac{1}{2} \frac{m_e e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{2.176 \cdot 10^{-18} \text{ J}}{n^2}$$

$$U_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV} \quad n = 1, 2, \dots$$

n = numero quantico

Emissione/ Assorbimento di fotoni da parte dell'atomo

Nel modello di Bohr l'atomo, costituito dal nucleo più gli elettroni, posti su orbite circolari stazionarie, ha un'energia fissata dalla regola di quantizzazione. Esso può acquisire energia per interazione con l'esterno: in tal caso passa temporaneamente ad uno stato eccitato, con l'elettrone su un'orbita di raggio maggiore e quindi energia maggiore. Da tale stato eccitato tornerà dopo breve tempo allo stato fondamentale (processo di diseccitazione). La seconda ipotesi di Bohr è che in una qualsiasi transizione da uno stato con numero quantico $n = k$ ad uno stato con numero quantico minore $n = l < k$ l'atomo emetta un quanto di energia elettromagnetica:

$$h\nu = U_k - U_l = \frac{m_e e^4}{2(4\pi\epsilon_0)^2 \hbar^2} \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{l^2} \right) = 13.6 \left(\frac{1}{k^2} - \frac{1}{l^2} \right) \text{ eV} .$$

Questo modello ha il pregio di spiegare sia la stabilità dell'atomo che gli spettri a righe (in realtà con questo modello si spiega soddisfacentemente praticamente solo l'atomo di idrogeno). Si basa però su postulati *ad hoc*, inconciliabili con altri principi di meccanica quantistica, che vedremo più avanti (vedi principio di indeterminazione di Heisenberg).

Elettroni come onde di materia



Louis De Broglie

Abbiamo visto che l'onda elettromagnetica può essere interpretata come **corpuscolo di energia pari a $E = h\nu$ e zero massa a riposo**. Nel 1924 Louis de Broglie propose che, se la radiazione elettromagnetica poteva essere interpretata come una particella, allora particelle dotate di massa, come gli elettroni, potevano in certe circostanze comportarsi come onde.

Per il fotone abbiamo: $E = h\nu$; $p = \frac{E}{c}$ \longrightarrow $p = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

Per analogia associamo alla particella dotata di massa m e momento $p = mv$ una lunghezza d'onda (detta di de Broglie):

$$\lambda = \frac{h}{p}$$

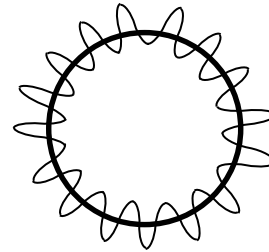
$$\longrightarrow k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{2\pi p}{h} \quad \longrightarrow p = \frac{h}{2\pi} k = \hbar k$$

Per l'elettrone libero l'energia (solo cinetica) è: $E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

L'interpretazione dell'elettrone come onda di materia fornisce un argomento a sostegno dei postulati di Bohr

l'elettrone è visto infatti come **onda stazionaria** intorno al nucleo:

$$2\pi r = n\lambda$$



per avere interferenza costruttiva con se stesso e quindi essere stabile la lunghezza dell'orbita deve essere pari ad un multiplo intero della lunghezza d'onda dell'elettrone. Imponendo questa relazione tra r e λ utilizzando l'espressione della lunghezza d'onda di de Broglie si ottiene infatti il 3° postulato di Bohr:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{m\nu}; \quad 2\pi r = n\lambda$$



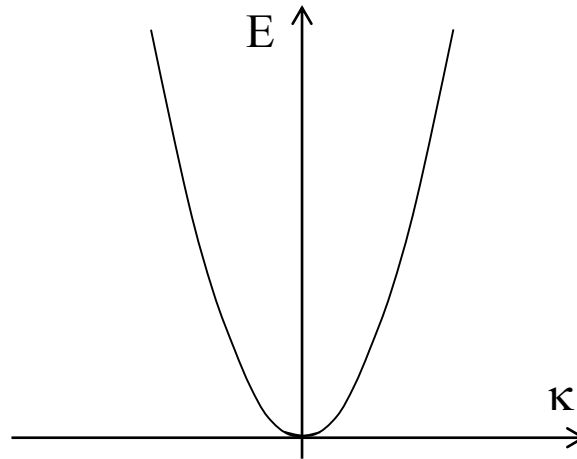
$$2\pi r = n\lambda = n \frac{h}{m\nu} \rightarrow m\nu r = n\hbar$$

Esprimiamo l'energia dell'elettrone **libero** (quindi solo cinetica) :

$$E_K = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m} \quad \text{usando l'ipotesi di de Broglie:} \quad p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi} = \hbar k$$

Otteniamo la relazione tra l'energia e il numero d'onde per l'elettrone libero:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

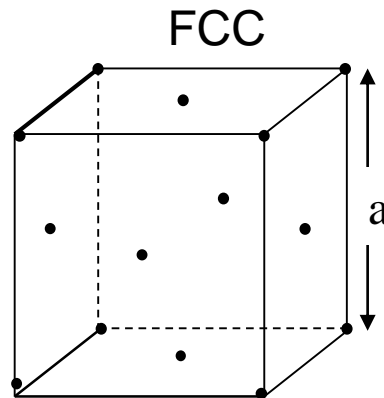
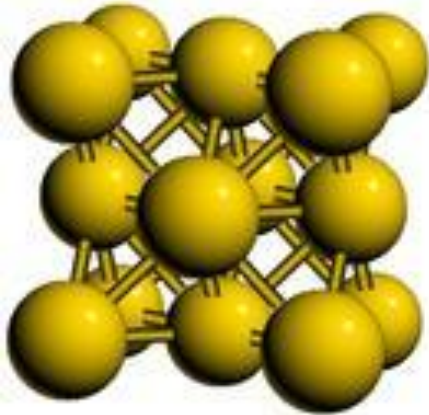


Esperimenti di diffrazione con fasci di elettroni

Come è possibile mostrare sperimentalmente che l'elettrone può comportarsi come un'onda ? Sappiamo che l'interferenza e la diffrazione sono fenomeni tipicamente ondulatori. L'interesse degli scienziati si volse quindi a voler verificare la possibilità di osservare sperimentalmente figure di interferenza/diffrazione a partire da fasci di elettroni.

Allora era già noto come fosse possibile ottenere figure di diffrazione facendo interagire un fascio di raggi X con il reticolo cristallino dei solidi.

Vedremo più avanti che, in forma cristallina, i solidi si dispongono in strutture tridimensionali ordinate, con costante reticolare a confrontabile con la lunghezza d'onda dei raggi X.

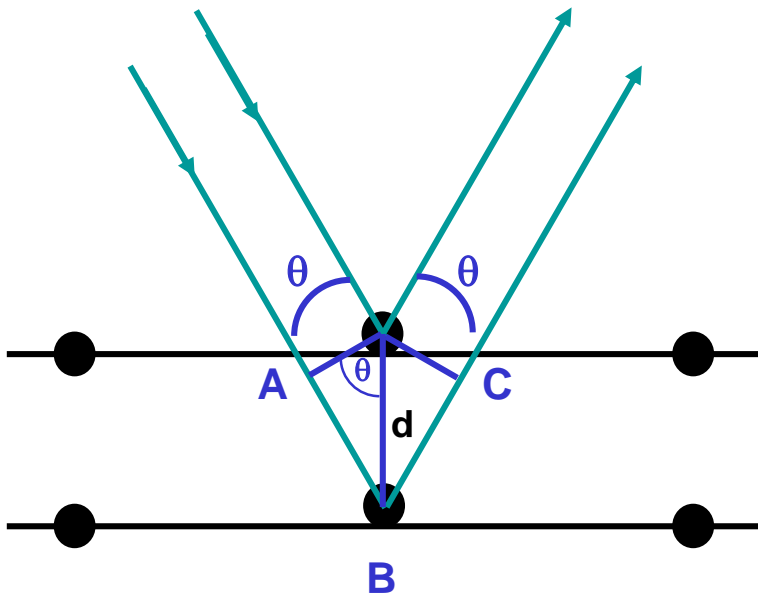


Un reticolo cristallino molto comune in natura è per esempio il reticolo cubico a facce centrate (FCC).

Reticolo FCC	a (Å)
C (diamante)	3.57
Si	5.43
Ge	5.66
α -Sn	6.49
GaAs	5.65

Legge di Bragg

Bragg aveva dimostrato (1913) che un piano di atomi nel cristallo riflette la radiazione nello stesso modo nel quale la luce viene riflessa da uno specchio, perciò l'angolo in uscita è uguale all'angolo incidente. Se si considera la radiazione come riflessa da piani di Bragg paralleli e successivi, è possibile che i fasci riflessi dai vari piani interferiscano costruttivamente.



Perché si abbia interferenza costruttiva, la differenza di cammino tra le due onde riflesse deve essere tale che:

$$AB + BC = n\lambda$$

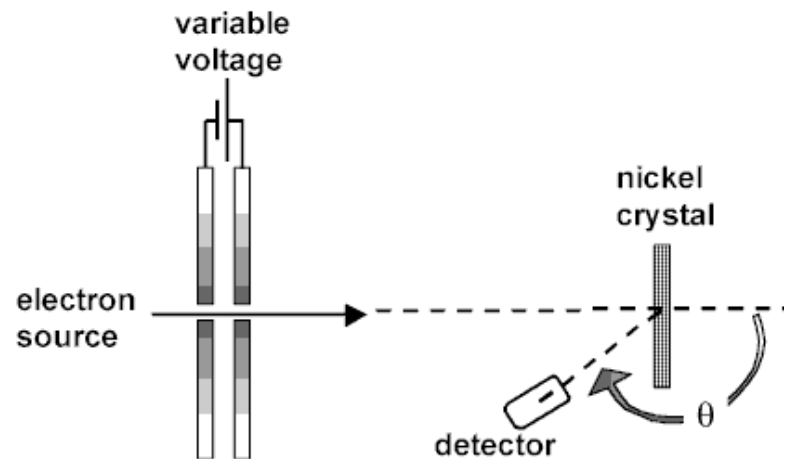
ossia deve valere la legge di Bragg:

$$2d \sin \theta = n\lambda$$

Poiché la distanza tra piani d corrisponde a qualche Å il fenomeno non si osserva con luce visibile ($\sim 5000 \text{ Å}$). E' necessario usare fotoni X.

Esperimenti di diffrazione eseguiti con fasci di elettroni dettero concretezza all'ipotesi di De Broglie. I primi esperimenti per osservare la diffrazione di fasci di elettroni furono compiuti da C.J. Davisson e L. H. Germer presso i Bell Telephone Laboratories nel 1927. Essi diressero un fascio di elettroni da 54eV contro un cristallo di Nickel, la cui distanza interatomica era nota (2.15\AA) da misure di diffrazione con fasci X, e misurarono l'intensità degli elettroni riflessi in funzione dell'angolo di incidenza .

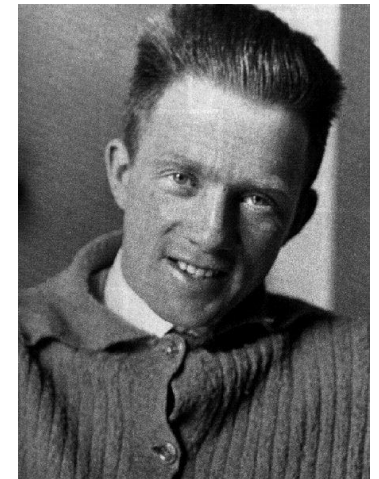
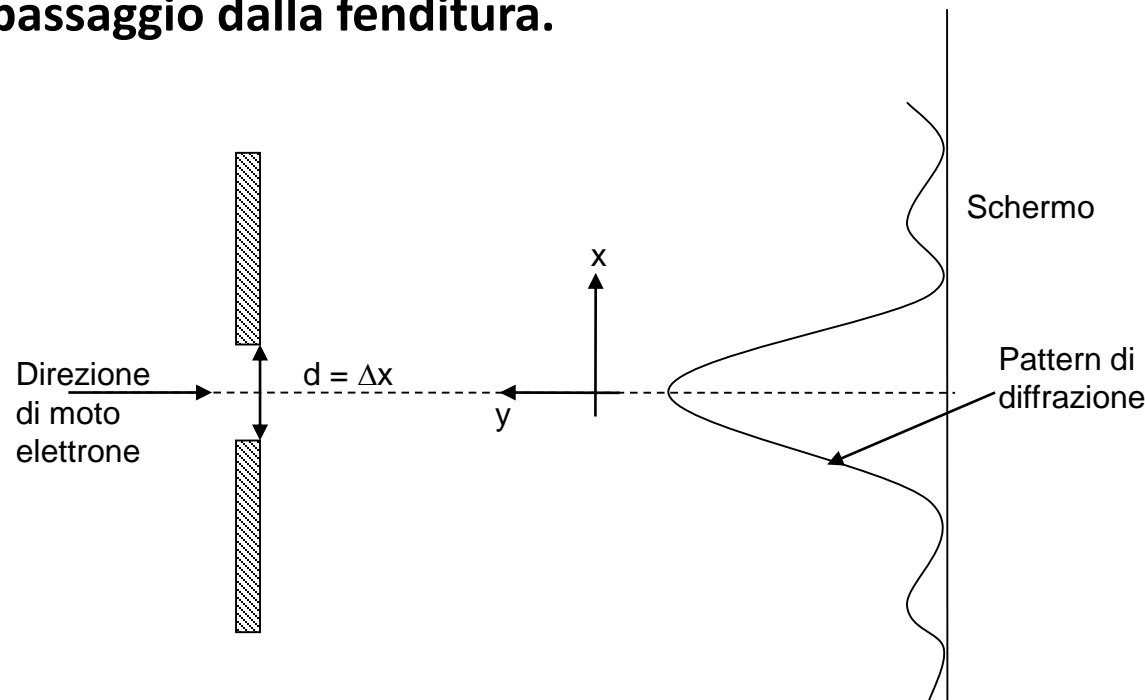
Trovarono un picco di intensità per angoli intorno a 50° rispetto alla normale della superficie del cristallo. Utilizzando la relazione di Bragg determinarono una lunghezza d'onda pari a 1.65\AA , in accordo con l'ipotesi di de Broglie (a meno di una piccola correzione dovuta al potenziale accelerante del cristallo di Nickel).



N.B: Poco più tardi, G. P. Thomson, studiò la trasmissione di elettroni attraverso sottili fogli di metallo, osservando figure di diffrazione circolari . Fisico inglese, figlio di J. J. Thomson, il fisico che scoprì l'elettrone nel 1897, come il padre egli vinse il premio Nobel che gli venne assegnato nel 1937 assieme a C. J. Davisson per avere dimostrato il comportamento ondulatorio degli elettroni previsto anni prima da Louis de Broglie (Nobel nel 1929). Thomson e Davisson pervennero indipendentemente allo stesso risultato.

Principio di indeterminazione di Heisenberg

Il principio di indeterminazione di Heisenberg è un pilastro fondamentale della meccanica quantistica. Per spiegarlo qualitativamente, consideriamo per esempio di avere un **elettrone di cui non si conosce la posizione ma di cui sia noto il momento, sia in direzione che in verso**. Per determinarne la posizione possiamo porre una fenditura di larghezza d perpendicolarmente alla sua direzione di moto e verificarne la posizione finale su uno schermo fluorescente posto ad una certa distanza. L'incertezza sulla posizione sarà data dalla larghezza della fenditura $\Delta x = d$. **Per la sua natura ondulatoria la particella sarà diffratta nel passaggio dalla fenditura.**



Werner Heisenberg

Prima di passare attraverso la fenditura la componente della quantità di moto lungo x è nota ($p_x = 0$) mentre non si conosce la posizione lungo x dell'elettrone. Al passaggio dalla fenditura la componente p_x del suo momento non è più sicuramente nulla, ma assume un'incertezza Δp_x perché la particella potrebbe stare muovendosi verso un punto appartenente alla figura di diffrazione. **Dalla teoria della diffrazione il primo punto di intensità nulla si trova all'angolo α tale che $\text{sen}\alpha = \lambda/d$.** Anche se non sappiamo esattamente dove l'elettrone colpirà lo schermo, possiamo essere ragionevolmente certi che p_x avrà valore tra 0 e $p \text{sen}\alpha$. Associando all'elettrone la lunghezza d'onda di de Broglie $\lambda = h/p$:

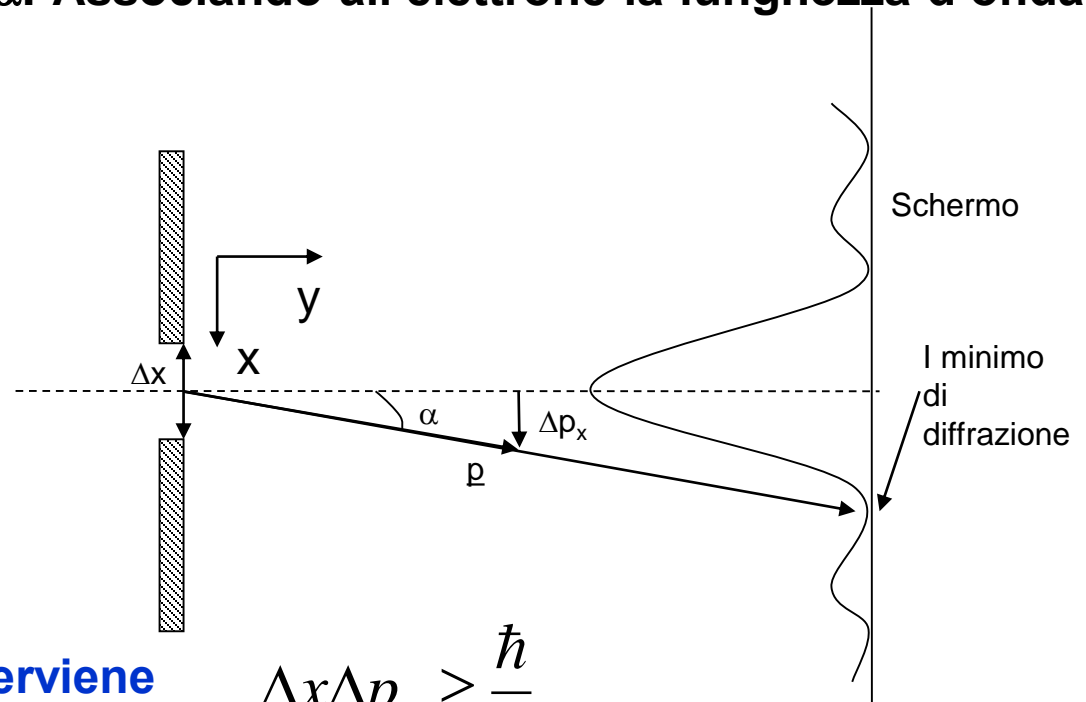
$$\Delta p_x \approx p \text{sen}\alpha = \frac{h}{\lambda} \frac{\lambda}{d} = \frac{h}{d}$$

da cui otteniamo una relazione tra l'incertezza sulla posizione e quella sul momento:

$$\Delta x \Delta p_x \approx h$$

Da un'analisi più accurata si perviene alla formulazione

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



Conseguenze del principio di indeterminazione di Heisenberg

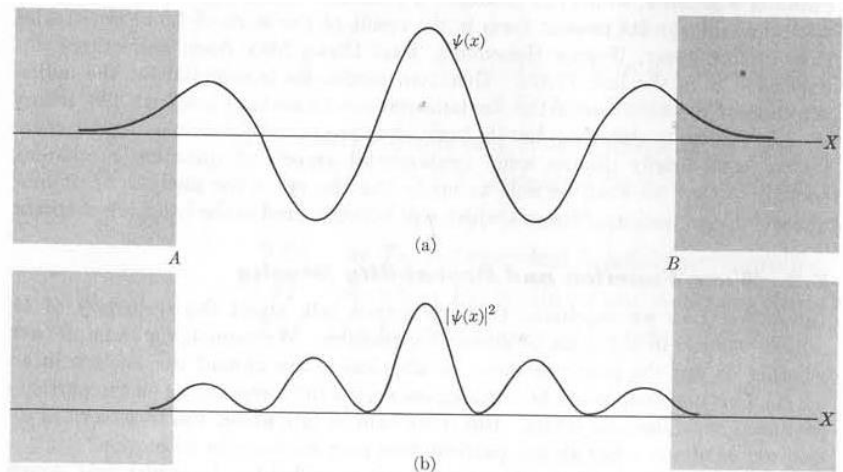
Lo stato iniziale della particella non può mai essere completamente determinato, tale indeterminazione iniziale si riflette sugli stati successivi, bisogna quindi abbandonare il determinismo tipico della fisica classica.

L'interpretazione moderna della natura ondulatoria delle particelle, formulata da Max Born nel 1926, considera **l'intensità dell'onda**, misurata come quadrato della sua ampiezza, che esprime la **densità di probabilità** di trovare la particella in un dato luogo e tempo.

$\psi(\underline{r}, t)$ → Funzione d'onda associate alla particella
 $|\psi(\underline{r}, t)|^2$ → **densità di probabilità** di trovare la particella nella posizione \underline{r} al tempo t

$$P_V = \int_V |\phi(x, y, z)|^2 dx dy dz$$

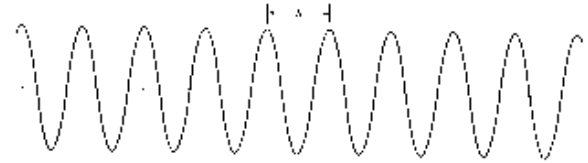
Probabilità di trovare la particella
Nel volume V



Elettrone come pacchetto d'onda

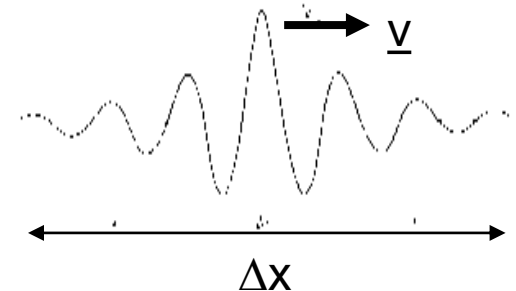
Un'onda piana armonica con lunghezza d'onda λ e frequenza ν ha la forma:

$$\varphi(x, t) = A \sin(kx - \omega t)$$



con $k = 2\pi / \lambda$ e $\omega = 2\pi\nu$. Essa si estende verso l'infinito in entrambe le direzioni spaziali, **quindi non può rappresentare una particella localizzata**, che invece deve essere caratterizzata da una funzione non nulla solo in una limitata regione dello spazio (Δx). Per rappresentare una particella localizzata dobbiamo **sovraimporre onde piane con diversa lunghezza d'onda, in modo da ottenere un "pacchetto d'onda"**.

Un pacchetto d'onde è ottenibile sovrapponendo onde piane di vettori d'onda diversi, con valore all'interno dell'intervallo Δk intorno a k . In questo caso le onde saranno fuori fase dopo una distanza dell'ordine di $\pi / \Delta k$ e non torneranno mai in fase in un'altra regione dello spazio.



Velocità dell'elettrone

La velocità dell'elettrone inteso come pacchetto d'onda viene valutata utilizzando il concetto di **velocità di gruppo**.


Velocità di Fase: $v_f = \frac{\omega}{k}$

Velocità di Gruppo: $v_g = \frac{d\omega}{dk}$

$$E = h\nu = \frac{h\omega}{2\pi} = \frac{p^2}{2m} = \left(\frac{hk}{2\pi}\right)^2 \frac{1}{2m}$$

Dove abbiamo usato: $p = \frac{h}{\lambda} = \frac{hk}{2\pi}$

Otteniamo la relazione: $\omega = \frac{hk^2}{4\pi m}$

Velocità di gruppo :  $v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{hk}{2\pi m} = \frac{p}{m} = v$

L'equazione di Schroedinger

Nello stesso 1926 il fisico **Erwin Schrödinger** elabora una descrizione matematica atta a produrre un **equivalente quantistico dell'equazione delle onde**, in modo da descrivere gli stati dinamici delle funzioni d'onda associate alle particelle, **l'equazione di Schrödinger**.

Per introdurre l'equazione di Schrödinger possiamo considerare la funzione di un'onda piana mediante formula di Eulero (per semplicità la trattiamo in una dimensione):

$$\psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)} \quad (1)$$



Erwin Schrödinger

Consideriamone le derivate temporali e spaziali:

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -i\omega A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial \psi(x, t)}{\partial x} = ik A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 A e^{i(kx - \omega t)}$$

Ricordiamo che l'energia dell'elettrone **libero**, si scrive, usando l'ipotesi di de Broglie:

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$


Poiché inoltre vale:

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

Ricaviamo la seguente equazione per l'energia:

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

Per ricavare dall'equazione dell'energia (2) una formulazione utile sulla funzione d'onda della particella libera moltiplichiamo ora entrambi i membri per la funzione d'onda stessa data dalla (1):



$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} A e^{i(kx - \omega t)} = \hbar \omega A e^{i(kx - \omega t)}$$

Osservando che :

$$\frac{\partial^2 \psi(x, t)}{\partial x^2} = -k^2 A e^{i(kx - \omega t)}; \quad \frac{\partial \psi(x, t)}{\partial t} = -i \omega A e^{i(kx - \omega t)}$$

si perviene quindi all'equazione differenziale:

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

che è proprio la **formulazione dell'equazione di Schroedinger** per i fenomeni dipendenti dal tempo (in una dimensione), nel caso di assenza di un campo di forze esterno (elettrone libero).

In presenza di un' energia potenziale $U(x,t)$, l'equazione viene estesa alla forma:

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

dove la funzione d'onda $\psi(x,t)$, soluzione dell'equazione differenziale, non ha più la forma data dalla (1) ma **deve essere determinata risolvendo l'equazione stessa**.

Si verifica che, se **U è indipendente dal tempo** ma dipende solo dalle coordinate spaziali: $U(\underline{r},t) = U(\underline{r}) = U(x,y,z)$, è sempre possibile separare la dipendenza temporale della funzione d'onda da quella spaziale:

dove $\phi(\underline{r})$ dipende solo dalle coordinate spaziali.
$$\psi(\underline{r},t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \phi(\underline{r})$$

Sostituendo, nel caso unidimensionale, otteniamo l'equazione:

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