Università degli Studi di Perugia - Corso di Laurea Triennale in Fisica

Corso di

MECCANICA QUANTISTICA

Analogia tra la meccanica ondulatoria di Schrödinger e l'ottica ondulatoria

1 L'ottica geometrica dedotta dall'ottica ondulatoria

L'equazione delle onde in un mezzo dispersivo è data da

$$\left(\Delta - \frac{1}{v^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) f(\vec{r},t) = 0 \ , \qquad \left(v = \frac{c}{n}\right) \ , \tag{1}$$

dove f è una qualunque componente del campo elettrico o magnetico della radiazione ed n l'indice di rifrazione del mezzo. Per radiazione monocromatica: $f(\vec{r},t) = u(\vec{r})e^{-i\omega t}$ e per $u(\vec{r})$ si ha l' equazione

$$\left(\Delta + k_0^2 n^2\right) u(\vec{r}) = 0 \ , \tag{2}$$

dove

$$k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda_0}$$

è il numero d' onda nel moto. La (1) e la (2) valgono, a stretto rigore, quando n è indipendente da $\vec{r}$, oltre che da t, però descrivono con buona approssimazione i fenomeni di interferenza e diffrazione anche quando n è una funzione lentamente variabile di $\vec{r}$. Se n è indipendente da $\vec{r}$, una soluzione corrispondente ad onde piane perpendicolari all' asse x è data da $u = Ae^{ik_0 nx}$ con A costante. Se n dipende da $\vec{r}$ possiamo porre

$$u(\vec{r}) = A(\vec{r})e^{ik_0\varphi(\vec{r})}$$

con A e φ funzioni reali. Sostituendo nella (2) ed eguagliando a zero parte reale e parte immaginaria

$$\Delta A - k_0^2 A\left[\left(\vec{\nabla}\varphi\right)^2 - n^2\right] = 0 \ , \tag{3}$$

$$2\vec{\nabla}A \cdot \vec{\nabla}\varphi + A\Delta\varphi = 0 \ . \tag{4}$$

La (4), moltiplicata per A, si può scrivere nella forma

$$\vec{\nabla} \cdot (A^2\vec{\nabla}\varphi) = 0 \ , \tag{5}$$

cioè il campo vettoriale $A^2\vec{\nabla}\varphi$ è solenoidale.

Indichiamo con s l'ascissa curvilinea contata lungo una linea di flusso del vettore $\vec{\nabla}\varphi$ e chiamiamo una tale linea, brevemente, una linea s. Consideriamo un fascio di luce, al di fuori di esso sarà $A = 0$. Per la solenoidalità di $A^2\vec{\nabla}\varphi$, nessuna linea s può passare dal fascio allo spazio buio e viceversa, quindi la superficie laterale che delimita il fascio è una superficie tubolare costituita da linee s. Se ora il fascio è abbastanza sottile da poterlo considerare una linea, esso deve identificarsi con una linea s e poiché in tal caso il fascio prende il nome di "raggio", ne segue che le linee s sono i raggi luminosi. In ogni punto, dunque, la direzione del raggio luminoso è definita da $\vec{\nabla}\varphi$ ed è quindi normale alle superfici d'onda (superfici φ =cost, cioè superfici di uguale fase della $f(\vec{r},t)$).

La (4) non dipende dalla lunghezza d' onda (non contiene k_0) ed ha una validità generale. Nella (3), viceversa, compare k_0. Nel limite $k_0 \to \infty$, si ha l'ottica geometrica, e questa equazione diventa

$$(\vec{\nabla}\varphi)^2 = n^2 \ , \qquad \text{(equazione dell' iconale)} \tag{6}$$

la funzione φ si chiama "iconale" da cui il nome dell'equazione (6). Per vedere rapidamente come l'equazione dell' iconale contenga le leggi dell' ottica geometrica, deduciamo da essa il principio variazionale di Fermat. Consideriamo due punti A e B su di una stessa linea s ($s_B > s_A$) e sia s' un' altra generica linea che congiunge A e B, ma che non sia una linea s. Per i tempi impiegati dalla luce per percorrere le due linee si trova la disuguaglianza

$$\begin{aligned} \int_A^B \frac{ds}{v} &= \frac{1}{c}\int_A^B n\, ds = \frac{1}{c}\int_A^B \left|\vec{\nabla}\varphi\right| ds = \frac{1}{c}\int_A^B \vec{\nabla}\varphi\cdot\vec{ds} \\ &= \frac{1}{c}\int_A^B \vec{\nabla}\varphi\cdot\vec{ds'} < \frac{1}{c}\int_A^B \left|\vec{\nabla}\varphi\right| ds' = \frac{1}{c}\int_A^B n\, ds' \end{aligned}$$

quindi si ha il principio di Fermat

$$\frac{1}{c}\int_A^B n\, ds < \frac{1}{c}\int_A^B n\, ds'$$

(Per ulteriori particolari si veda E. Persico, "Fisica Matematica", §151, Zanichelli).

2 Analogia tra ottica geometrica e meccanica classica

È nota l' analogia tra il principio di Fermat e il principio di Maupertuis, scritto, per semplicità, per una sola particella,

$$\delta\int_A^B \sqrt{2m(E - V(\vec{r}))}\, ds = 0 \ . \tag{7}$$

Per cui la traiettoria di una particella in un potenziale $V(\vec{r})$, è identica a quella di un raggio di luce in un mezzo con indice di rifrazione n dato da

$$n(\vec{r}) = \text{cost}\sqrt{2m(E - V(\vec{r}))} \ .$$

La costante si trova imponendo che nel "vuoto" (cioè per $V(\vec{r}) = 0$) si deve avere $n = 1$. Quindi

$$n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{E - V(\vec{r})}{E}} \ . \tag{8}$$

All' equazione dell' iconale corrisponde dunque, in meccanica classica, l' equazione

$$\left(\vec{\nabla}\varphi\right)^2 = n^2 = \frac{E - V}{E} \ .$$

Moltiplicando per E e ponendo $W(\vec{r}) = \sqrt{2mE}\varphi(\vec{r})$, abbiamo

$$\frac{1}{2m}\left(\vec{\nabla}W\right)^2 + V(\vec{r}) = E \ , \qquad \left(\vec{p} = \vec{\nabla}W\right) \tag{9}$$

cioè l' equazione di Hamilton-Jacobi per la funzione caratteristica di Hamilton, W, essendo

$$W = \int \vec{p} \cdot d\vec{r} \qquad (\text{infatti } dW = \vec{\nabla} W \cdot d\vec{r}) \ .$$

Perciò l' analogia tra ottica geometrica e meccanica classica consiste, a livello di principi variazionali, nell' analogia tra i principi di Fermat e Maupertuis, e, a livello di equazioni differenziali, nell' analogia tra l' equazione dell' iconale e l' equazione di Hamilton-Jacobi per la funzione caratteristica, W.

3 La meccanica ondulatoria e analogie con l' ottica ondulatoria

Così come l' equazione (6) dell' iconale dell' ottica geometrica è il limite per $k_0 \to \infty$ dell' equazione (2) dell'ottica ondulatoria, si può per analogia pensare che l'equazione di Hamilton-Jacobi (9) per la meccanica classica sia il limite di una più generale equazione valida in meccanica ondulatoria. Ci limitiamo ancora, per semplicità, al caso della dinamica di una sola particella in un potenziale $V(\vec{r})$. Per un problema stazionario (energia E assegnata), in meccanica ondulatoria la funzione d' onda $\psi(\vec{r}, t)$ si può scrivere nella forma

$$\psi(\vec{r}, t) = u(\vec{r}) e^{-\frac{i}{\hbar}Et} \tag{10}$$

(per la relazione di Planck-Einstein, $E = h\nu = \hbar\omega$, la (10) corrisponde a $f(\vec{r}, t) = u(\vec{r})e^{-i\omega t}$, valida per radiazione monocromatica in ottica ondulatoria). Si può pensare che anche in questo caso $u(\vec{r})$ soddisfi ad un' equazione di tipo (2) con la sostituzione (si veda l' equazione (8))

$$n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{E-V}{E}} = \frac{k}{k_0} = \sqrt{\frac{2m(E-V)}{\hbar^2}} \Big/ \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \ , \tag{11}$$

dove si è fatto uso anche della relazione di de Broglie $\lambda = h/p$, per definire il numero d'onda nel "vuoto" $k_0 = 2\pi/\lambda_0 = p_0/\hbar = \sqrt{2mE}/\hbar$, e, in presenza di un potenziale, il numero d' onda nel punto $\vec{r}$: $k = nk_0 = \sqrt{2m(E-V)}/\hbar$. Questo porta a scrivere, in meccanica ondulatoria, l'equazione d' onda per un problema stazionario e per una particella

$$\left(\Delta + \frac{2m(E - V(\vec{r}))}{\hbar^2} \right) u(\vec{r}) = 0 \ , \tag{12}$$

o, moltiplicando per $-\hbar^2/2m$,

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right) u(\vec{r}) = Eu(\vec{r}) \ , \tag{13}$$

che è, appunto, l'**equazione di Schrödinger indipendente dal tempo**.

Per problemi non stazionari, la $\psi(\vec{r}, t)$ non ha più la forma (10) e deve siddisfare un' equazione differenziale che contenga anche derivate temporali (**equazione di Schrödinger dipendente dal tempo**), da cui la (13) segue quando ψ è della forma (10) (così come la (2) segue dalla (1)). A questo punto c'è una differenza con l' ottica ondulatoria in quanto la (1) è del secondo ordine nel tempo, mentre l' equazione di Schrödinger dipendente dal tempo è del primo ordine. La necessità di ciò si può vedere già nel caso stazionario, infatti, valendo la (10), si può scrivere la (13), dopo aver moltiplicato per $e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, nella forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}) = i\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} \ .$$

In effetti l'**equazione di Schrödinger dipendente dal tempo**, sempre per una particella, è proprio

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right)\psi \ . \tag{14}$$

Ma che questa equazione debba essere del primo ordine nel tempo si può vedere ancor meglio facendone il limite classico (cioè il limite per $\hbar \to 0$, il che corrisponde, nel caso stazionario, a fare il limite, per $k_0 = \sqrt{2mE}/\hbar \to \infty$), con il che si deve ottenere la corretta equazione di Hamilton-Jacobi per la funzione principale di Hamilton, equazione che è appunto del primo ordine nel tempo. Poniamo, a questo scopo,

$$\psi(\vec{r}, t) = A(\vec{r}, t)e^{-\frac{i}{\hbar}\phi(\vec{r},t)} \tag{15}$$

con A e ϕ funzioni reali. Sostituendo nella (14) e eguagliando parte reale e parte immaginaria, abbiamo

$$\begin{cases} \frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\vec{\nabla}\phi\right)^2 + V(\vec{r}) - \frac{\hbar^2}{2mA}\Delta A = 0 \\ \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{2m}A\Delta\phi + \frac{1}{m}\vec{\nabla}A\cdot\vec{\nabla}\phi = 0 \end{cases} \tag{16}$$

Nel limite $\hbar \to 0$, la prima delle (16), trascurando il termine in $\hbar^2$, diventa

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\vec{\nabla}\phi\right)^2 + V(\vec{r}) = 0$$

che è appunto l' equazione di Hamilton-Jacobi soddisfatta dalla funzione principale di Hamilton, $S(\vec{r}, t)$, con

$$S(\vec{r}, t) = \int L\, dt = \int (\vec{p}\cdot d\vec{r} - H\, dt) \qquad (\text{infatti } dS = \vec{p}\cdot d\vec{r} - H\, dt) \ .$$

Quindi nel limite classico $\phi = S$ (integrale d'azione).

La seconda delle (16) non continene $\hbar$, quindi vale in generale (ad ogni ordine in $\hbar$). Moltiplicando per $2A$, si può scrivere come

$$\frac{\partial A^2}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\left(A^2\frac{\vec{\nabla}\phi}{m}\right) = 0$$

che ha la forma di un' equazione di continuità

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{j} = 0 \ , \tag{17}$$

se si pone

$$\begin{cases} \rho = A^2 = |\psi|^2 = \text{denistà di probabilità} \\ \vec{j} = A^2\frac{\vec{\nabla}\phi}{m} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi - \psi\vec{\nabla}\psi^*\right) = \frac{\hbar}{m}\mathrm{Im}\left(\psi^*\vec{\nabla}\psi\right) = \text{denistà di corrente di probabilità.} \end{cases} \tag{18}$$

L' equazione (17) descrive, quindi, la conservazione della probabilità[1].

[1] Dall' eq. (14) in poi il potenziale V può essere anche funzione del tempo.