Quantum Mechanics

1 ottobre 2022

Indice

Lezione 1

mar 27 set 2022 13:30

La meccanica quantistica non ha evidenze nella vita di tutti i giorni. Essa è descritta da equazioni differenziali complesse.

1 La crisi della fisica classica

I principi della meccanica quantistica sono contrari all'intuizione comune. Si osserva da cosa è nata la meccanica quantistica. Tra la fine del XIX secolo e l'inizio del XX si osservano concetti incompatibili con la fisica classica:

- meccanica newtoniana
- termodinamica e fisica statistica classica
- elettromagnetismo
- relatività ristretta

La crisi della fisica classica è il fallimento non spiegabile all'interno della relatività né della fisica classica.

Corpo nero. La prima osservazione è la radiazione di corpo nero. Su basi termodinamiche, Kirchhoff dimostra l'universalità della radiazione di corpo nero. Ogni corpo che si comporta come un corpo nero ha lo stesso spettro di emissione. Il problema è spiegare l'universalità da principi primi. Nel 1900, Planck fitta il grafico della radiazione con una funzione (errata):

$$\rho(\nu, T) = \frac{8\pi h}{c^3} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

Dove $h \approx 6.6 \times 10^{-34}\,\mathrm{J\,s}$ è un parametro del fit. Esso è la costante di Planck.

Effetto fotoelettrico. Nel 1905, Einstein propone che l'energia di una radiazione a frequenza ν sia un multiplo intero di $h\nu$. Questo spiega l'effetto fotoelettrico. In un grafico, ν vs $E_{\min}$ si ha una retta di pendenza $\frac{h}{e}$ con e carica elementare. Millikan misura esattamente tale pendenza. L'energia viene portata da quanti di radiazione.

Effetto Compton, 1922-23. L'elettromagnetismo si comporta in modo continuo, ma si pensa ancora che solamente nell'interazione con la materia, l'energia viene scambiata in modo discreto. Lo scetticismo riguardo la realtà fisica dei quanti scompare con l'effetto Compton.
Dei raggi X sono inviati ad un materiale. Essi hanno un'energia molto maggiore di quella di legame degli elettroni, i quali si comportano come fossero liberi. Infatti, dal quadri-momento si ha

$$E^2 - p^2c^2 = m^2c^4$$

Per una velocità $v = c$ si ha $m = 0$ e $E = pc = h\nu$. Il momento trasportato da un fotone è

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

Una radiazione incide contro un elettrone statico. L'elettrone si muove ad un angolo e si misura una deviazione del fotone uscente dall'urto. Si ottiene una lunghezza d'onda in uscita

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

con angolo θ rispetto la direzione di incidenza. La formula è ottenuta trattando il fotone come una particella. Diventa fisico il fatto che la radiazione elettromagnetica si possa trattare come una particella, come un fotone. Nel 1926, Lews dà il nome di fotone a tali quanti di energia. La lunghezza d'onda di Compton per l'elettrone è la quantità

$$\frac{h}{m_e c} = 2.4 \times 10^{-12}\,\mathrm{m}$$

Spettri atomici. Si osserva lo spettro solare e si notano delle lunghezze d'onda particolari. La luce prodotta dal Sole, passa attraverso la fotosfera che assorbe e diffonde nuovamente la luce, diminuendone l'intensità, da cui le righe nello spettro. L'elio venne scoperto in tal modo.
Nel 1897 si scopre l'elettrone. Seguono i modelli atomici. I primi modelli non riescono a spiegare gli spettri atomici. Bohr ipotizza che l'energia sia quantizzata e dunque la frequenza emessa dipende dal salto energetico di un elettrone. La costante di Planck non solo ha dimensioni di energia per tempo, ma anche di momento angolare. Bohr suppone che il momento angolare dell'elettrone è

$$m_e vr = n\hbar$$

In origine, $\hbar$ è un numero dell'ordine di h. Modernamente è diventato

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}$$

Bohr non spiega, ma descrive. Tramite Schrödinger si ha una spiegazione ed una predizione, sebbene la sua equazione non è in sé dimostrabile.

2 Interferenza e diffrazione delle onde elettromagnetiche

2.1 Doppia fenditura

La luce è descritta da un fenomeno ondulatorio nell'interferenza e nella diffrazione. Nell'esperimento della doppia fenditura, sullo schermo si osserva un'intensità con un picco centrale e altri picchi minori ai lati. Esso non corrisponde a ciò che si riscontra da un comportamento corpuscolare. L'elettromagnetismo spiega tale discrepanza. L'intensità dell'onda è

$$I = |\vec{E}_1 + \vec{E}_2|^2$$

Essa è diversa dalla somma dei moduli (cioè come accadrebbe nel comportamento corpuscolare, oppure come considerando una fenditura alla volta e sommare a posteriori le due intensità).
Infatti, si considerino due fenditure e due raggi che incidono su uno stesso punto sullo schermo. I raggi sono (quasi) paralleli con un angolo θ rispetto la perpendicolare allo schermo a distanza molto maggiore della lunghezza d'onda. La differenza di fase dei due fasci è

$$d \sin\theta$$

dove d è la distanza tra le due fenditure. Si ha interferenza distruttiva per

$$d \sin\theta = n\frac{\lambda}{2}$$

con n numero intero dispari. Il primo luogo buio si ha per

$$\theta \approx \frac{1}{2} n \frac{\lambda}{d}$$

Esempio. Si consideri una lampadina da 100 W che emette una radiazione monocromatica a 580 nm. Il numero di fotoni in un secondo ha ordine di grandezza 10^{20}.

La doppia fenditura è ben descritta tramite le equazioni di Maxwell, cioè tramite una descrizione ondulatoria. D'altra parte, si può fare l'esperimento un fotone alla volta. Nel 1981, tramite strumenti sviluppati da Hamamatsu Photonics, sovrapponendo i luoghi di impatto, si osserva una figura di interferenza simile alla trattazione tramite le onde. Rifacendo l'esperimento, i luoghi particolari di impatto cambiano, ma la figura finale di sovrapposizione è la stessa. Tuttavia, bisogna capire con cosa interferisce il fotone e da che fenditura passa. La trattazione dei fenomeni deve avvenire in modo probabilistico: non si può prevedere in modo deterministico il comportamento di un sistema.
Chiudendo una fenditura, la figura di interferenza svanisce, sebbene si usi ancora un fotone alla volta. Ogni tentativo di capire da quale fenditura passa il fotone distrugge la figura di interferenza. La misura su di un sistema microscopico lo disturba in modo significativo. Se la figura svanisce cercando di capire da quale fenditura passa l'elettrone, allora significa che il fotone risente di entrambe le fenditure.

Lezione 2

mer 28 set 2022 13:30

Questo non è un esperimento di concetto (gedankenexperiment). Nessuno si sarebbe aspettato il risultato ottenuto:

- il fotone colpisce lo schermo in un punto preciso depositando tutta l'energia $h\nu$;
- con pochi eventi, lo schermo sembra riempito in modo casuale, ma con il passare del tempo emerge una figura di interferenza (come in un laser, 10^{20} fotoni alla volta).

Non si può più dire con certezza il luogo di impatto. Bisogna parlare di probabilità.
Inoltre, chiudendo una fenditura, scompare la figura di interferenza. Ogni tentativo di capire da quale fessura è passato il fotone distrugge la figura di interferenza.
La misura di un sistema microscopico lo disturba in modo significativo.

Per lunghezze d'onda molto minori della distanza tra le fenditure, i fotoni hanno comunque bisogno di entrambe le fenditure per costruire la figura di interferenza. Inoltre, cade l'idea classica del determinismo: date delle condizioni iniziali, non si può più completamente determinare il moto di una particella. Infatti, i fotoni colpiscono lo schermo in luoghi diversi, sebbene abbiano

tutti le stesse condizioni iniziali. Pertanto, si interpreta il risultato: ogni fotone ha una certa probabilità (che corrisponde all'intensità $I(x)$) di colpire una certa zona dello schermo. Questo esperimento evidenzia il dualismo onda-particella: in alcuni casi è più facile usare una trattazione ondulatoria, in altri si usa la trattazione corpuscolare. La "vera" natura è l'elettrodinamica quantistica.
Dunque,

- la radiazione elettromagnetica si comporta come un flusso di particelle;
- le previsioni sul comportamento sono probabilistiche;
- l'informazione di un fotone in un punto $\vec{r}$ dello schermo all'istante t è portata dal campo elettrico $\vec{E}(\vec{r},t)$ soluzione delle equazioni di Maxwell. Quando la sorgente è debole, il campo elettrico va interpretato come un'*ampiezza di probabilità*. Mentre la densità di probabilità corrispondente è $|\vec{E}(\vec{r},t)|^2$.
- Le equazioni di Maxwell sono equazioni lineari nel campo elettrico: questo implica valere il principio di sovrapposizione. Se $\vec{E}_1$ e $\vec{E}_2$ sono soluzioni delle equazioni di Maxwell, allora pure $\vec{E} = \lambda_1\vec{E}_1 + \lambda_2\vec{E}_2$ è soluzione. Tale principio permette di spiegare la figura di interferenza.

Il fisico Paul Dirac disse che ogni fotone interferisce con se stesso.

2.2 Polarizzazione

La luce è polarizzata. Si consideri un sistema di riferimento ed fascio di luce viaggiante in z positivo. Si posiziona un filtro polarizzante nel piano xy con direzione polarizzata denotata dal versore $\vec{\varepsilon}_p$. Oltre il filtro passa un'intensità I_0. Successivamente, si pone un altro filtro parallelo al primo con direzione lungo $\vec{e}_x$. Si ha una intensità finale $I = I_0\cos^2\theta$, dove θ è l'angolo di $\vec{\varepsilon}_p$ con l'asse $\vec{e}_x$.
Si vede l'interpretazione classica. Si consideri un'onda piana

$$\vec{E}(\vec{r},t) = E_0\vec{\varepsilon}_p e^{i(kz-\omega t)}, \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = 2\pi\nu, \quad \lambda\nu = c$$

Essa è la soluzione senza alle equazioni di Maxwell senza cariche. Dunque, $\nabla\cdot\vec{E} = 0$. Questo implica che

$$\vec{k}\cdot\vec{\varepsilon}_p = 0$$

cioè onde trasverse, perpendicolari alla direzione di propagazione. In questo caso, $\vec{k} \parallel \vec{z}$. Quindi, il vettore di polarizzazione appartiene ad un piano perpendicolare alla direzione di propagazione. Inoltre, l'intensità dopo il primo polarizzatore è $I_0 = |E_0|^2$. Il campo elettrico dopo il secondo polarizzatore è

$$\vec{E}'(\vec{r},t) = E_0'\vec{e}_x e^{i(kz-\omega t)}, \quad E_0' = E_0\cos\theta$$

L'intensità corrispondente è

$$I = I_0\cos^2\theta$$

Ora si utilizza una sorgente che emette un fotone alla volta. Le conseguenze sono

- un rivelatore posto oltre il secondo polarizzatore, o misura il fotone oppure non lo misura;
- tutta l'energia del fotone è misurata;
- il fotone arriva al rilevatore in base all'angolo θ; se $\theta = 0$, allora il fotone passa sempre; se $\theta = \frac{\pi}{2}$ allora il fotone non passa mai; se θ è arbitrario, allora la probabilità di rilevare il fotone è $\cos^2\theta$. Il numero di fotoni dopo un certo periodo è $N_{\text{ph}} = N_0\cos^2\theta$. Si può intendere il fotone come una miscela di due stati. Un fotone nel primo stato ψ_x ha probabilità di passare pari all'unità. Un fotone nell'altro stato ψ_y ha probabilità di passare pari a zero.

- Lo stato del fotone dopo il primo polarizzatore è

$$\psi_p = \psi_x \cos\theta + \psi_y \sin\theta$$

  Inoltre, il fotone nello stato ψ_x passa con probabilità $|\cos\theta|^2 = \cos^2\theta$; il fotone nello stato ψ_y non passa con probabilità $|\sin\theta|^2 = \sin^2\theta$. Infatti, la probabilità totale è $\cos^2\theta + \sin^2\theta = 1$. Questo è il *principio di decomposizione spettrale*: si proietta lo stato di un sistema su altri stati di cui è noto il comportamento.

- Il secondo polarizzatore compie una misura perché sceglie fotoni con una certa caratteristica. Infatti, ponendo un altro polarizzatore orientato lungo l'asse delle x, esso non blocca altri fotoni: il secondo polarizzatore ha precipitato lo stato del fotone ad essere solo ψ_x. La misura ha disturbato in maniera irreversibile il sistema: essa ha precipitato lo stato da ψ_p a ψ_x.

2.3 de Broglie

Successivamente a Maxwell, la radiazione elettromagnetica è descritta tramite le onde, ma con Einstein e Compton si evidenzia un comportamento corpuscolare. Nel 1923, nella sua tesi di dottorato, De Broglie si chiede se pure la materia, fin'ora intesa come corpuscoli, si possa descrivere come onde osservando una particella alla volta (in particolare gli elettroni).
L'onda ha comportamento

$$\exp\left(i\vec{k}\cdot\vec{x} - i\omega t\right)$$

ed è invariante per trasformazioni di Lorentz: per cui $\vec{k}$ e ω costituiscono un tetra-vettore perché legati rispettivamente alla quantità di moto ed all'energia. Dunque, per un fotone, vale

$$|\vec{p}| = \frac{E}{c} = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda} = \hbar|\vec{k}| \implies \lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

Pertanto, a qualunque particella è associato un vettore d'onda ed una lunghezza d'onda

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}, \quad \lambda = \frac{h}{|\vec{p}|}$$

Esempio. Si vede la lunghezza d'onda di de Broglie per l'elettrone. Esso ha massa $m_e = 511\,\mathrm{keV}$ (in unità naturali). Si ha $1\,\mathrm{eV} = 1.6\times10^{-19}\,\mathrm{V\,C}$. Si consideri un elettrone non relativistico. Vale

$$E = \frac{p^2}{2m_e} \implies \lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_eE}} = \frac{1}{\sqrt{V}}12.3\,\text{Å}$$

con V in volt. Un elettrone ha lunghezza d'onda confrontabile con $\lambda \approx 1\,\text{Å}$, cioè quella dei raggi X e le distanze tra atomi in un cristallo.

Esempio. Si considerino dei neutroni termici, cioè a basse energie cinetiche. Si ha

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{\sqrt{2m_nE}} = \frac{h}{\sqrt{2m_n\frac{3}{2}k_BT}} = \frac{1}{\sqrt{T}}30\,\text{Å}$$

dove la temperatura T è in kelvin.

Esempio. Si consideri un granello di polvere. La sua massa è circa $10^{-10}\,\mathrm{kg}$ ed ha dimensioni $1\,\mathrm{\mu m}$. Esso si muove a basse velocità, $1\,\mathrm{mm\,s^{-1}}$. La lunghezza d'onda corrispondente è

$$\lambda = 6.6\times10^{-11}\,\text{Å}$$

Non si ha speranza di osservare l'oscillazione per oggetti macroscopici.

L'evidenza sperimentale della lunghezza d'onda di de Broglie è ottenuta tramite l'esperimento di Davisson-Germer (1927). Un fascio di elettroni incide su di un cristallo di nickel. Gli atomi nella struttura cristallina si comportano come delle sorgenti di onde quando sono colpiti. Si ottiene una figura di interferenza.

2.4 Doppia fenditura con elettroni

Negli anni '50, si esegue l'esperimento della doppia fenditura. Lo stesso esperimento, ma con un singolo elettrone, si compie nel 1974 a Bologna da Merli, Missiroli e Pozzi. Si osserva:

- l'elettrone arriva nella sua completezza e la carica non si diffonde sullo schermo;
- il grande numero di elettroni genera la figura di interferenza;
- l'arrivo sullo schermo è casuale per l'elettrone particolare;
- si interpreta la figura di interferenza come la distribuzione di probabilità degli elettroni;
- chiudendo una fenditura, non si ha più interferenza (l'elettrone interagisce con se stesso);
- cade il concetto di traiettoria, il determinismo.

Lezione 3

gio 29 set 2022 13:30

Per ora, si segue un ragionamento qualitativo. Si consideri l'esperimento della doppia fenditura con gli elettroni. [immagine] Un elettrone ha momento lineare iniziale p_x. Osservando lo schermo, si nota che l'elettrone ha deviato di un angolo θ rispetto la direzione iniziale: ha acquisito un momento verticale

$$p_y = p_x \sin\theta \approx p_x\theta = p_x\frac{\lambda}{d} \approx \frac{h}{d}$$

Il primo zero della figura di diffrazione si ha ad un angolo $\frac{\lambda}{d}$. Per de Broglie vale $\lambda = \frac{h}{p_x}$. Il trasferimento di momento è dato dall'interazione con lo schermo. Non si discutono gli esperimenti che cercano di determinare da quale fessura sia passato l'elettrone.

2.5 Principio di indeterminazione

Si ragiona sul concetto di traiettoria, cioè della posizione e della velocità di una particella. Si considera una ben precisa procedura di misura. Per misurare la traiettoria, si pone uno schermo di fronte una sola fenditura. Si osserva ancora una figura di diffrazione su tale schermo. La posizione del primo minimo si ha ad un angolo

$$\theta = \frac{\lambda}{\Delta y}$$

dove Δy è la dimensione della fenditura. La particella ha acquisito una quantità di moto verticale Δp_y. Il momento acquisito ha ordine di grandezza pari a

$$\Delta p_y \approx p\theta = p\frac{\lambda}{\Delta y} = \frac{h}{\Delta y}$$

con p momento lineare iniziale. Da ciò risulta

$$\boxed{\Delta y\, \Delta p_y \approx h}$$

Si è limitati nella precisione della misura. Questa è l'essenza del principio di indeterminazione di Heisenberg. Questa relazione incorpora l'effetto della perturbazione causata dallo strumento di misura (lo schermo). La perturbazione ha un ruolo essenziale in meccanica quantistica perché ha ordine di grandezza dei fenomeni misurati.
In tanti testi, l'indeterminazione è sulla precisione della posizione y e del momento p_y nello

stesso momento. In questo caso, prima si è misurato il momento, poi la posizione, però la distanza temporale è trascurabile. Il principio di indeterminazione che si ottiene dagli operatori della meccanica quantistica non è la stessa cosa: bisogna prestare attenzione.
Ripetendo l'esperimento, con lo stesso momento iniziale, si hanno posizioni finali diverse: non si riesce più a predire la traiettoria perché lo strumento disturba in modo sostanziale la particella.

Osservazione. Si osserva:

- L'ultimo esperimento svolto sulla doppia fenditura è dell'aprile 2003 da Zeilinger ("Quantum interference experiments with large molecules", cfr. pagina Oleari) utilizzando un fullerene C_{60} a forma di icosaedro troncato, una palla da calcio. Si osserva una figura di diffrazione.
- Per i fotoni sono stati introdotti due stati di polarizzazione, sebbene questa sia una visione classica. L'interpretazione corretta è considerare un momento angolare associato al fotone. Similmente, gli elettroni hanno un momento magnetico intrinseco: lo spin, quantizzato in $\pm\frac{\hbar}{2}$ lungo una certa direzione. Tanti libri (Sakurai, Feynman) presentano la meccanica quantistica partendo dalla quantizzazione del momento magnetico intrinseco dell'elettrone.

3 L'equazione di Schrödinger

Essa descrivere fenomeni quantistici, ma non relativistici. Si ricava l'equazione in modo diverso da come ha fatto Schrödinger. Si utilizzano delle ipotesi plausibili. La nuova teoria deve contenere

- il principio di indeterminazione di Heisenberg, l'incapacità operativa di determinare la posizione e la velocità (la traiettoria) di una particella in un certo istante;
- un corretto limite classico, il principio di corrispondenza;
- un'equazione lineare per far valere il principio di sovrapposizione (come per il campo elettrico), si vuole produrre la figura di interferenza tramite un algoritmo, bisogna avere una somma coerente di due oggetti (l'intensità totale non è la somma delle intensità singole); il quadrato del modulo dell'oggetto che si vuole studiare si intende come densità di probabilità;
- parlando di somma coerente, deve comparire una lunghezza d'onda, così da ritrovare? l'ipotesi di de Broglie;
- per il rasoio di Occam, la somma coerente non è di campi vettoriali, ma campi scalari complessi; infatti, vale ancora che il modulo quadro della somma non è la somma dei moduli quadri. Un singolo campo complesso non è sufficiente per considerare anche lo spin, infatti, Dirac utilizza quattro campi complessi per unificare la meccanica quantistica con la relatività speciale.

3.1 Costruzione

Si vede la costruzione in una dimensione. Si consideri un campo scalare complesso $f(x)$. La probabilità infinitesima di trovare la particella tra x e $x + \mathrm{d}x$ è

$$\mathrm{d}P = |f(x)|^2 \,\mathrm{d}x$$

Dunque $|f(x)|^2$ è una densità di probabilità. Si applica il vincolo

$$\int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}P = 1 \implies \int_{\mathbb{R}} |f(x)|^2 \,\mathrm{d}x = 1$$

La funzione $f(x)$ è detta ampiezza di probabilità (poi funzione d'onda, soluzione all'equazione di Schrödinger, funzione di stato, etc). Tale vincolo corrisponde al fatto che una particella, quando cercata su tutto l'asse reale, ha probabilità unitaria di essere presente: questo vale solo nella

trattazione non relativistica, la materia non diventa energia.
Una particella si rappresenta come un pacchetto di onde localizzato cioè una combinazione lineare di più onde piane. La trasformata di Fourier risulta naturale per la trattazione.

Trasformata di Fourier. Non si considerano i coefficienti moltiplicativi. La trasformata è

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}} g(k) e^{ikx} \,\mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}k \, g(k) e^{ikx}$$

Si consideri una gaussiana

$$g(k) = e^{-\alpha(k-k_0)^2}$$

La larghezza ha ordine di grandezza di $\alpha^{-\frac{1}{2}}$. La trasformata è

$$f(x) = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}}, \quad |f(x)|^2 = \frac{\pi}{\alpha} e^{-\frac{x^2}{2\alpha}}$$

la cui larghezza è $\sqrt{\alpha}$. Infatti

$$\begin{aligned} f(x) &= \int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha(k-k_0)^2} e^{ikx} \,\mathrm{d}k = \int_{\mathbb{R}} e^{-\alpha t^2} e^{itx} e^{ik_0 x} \,\mathrm{d}t, \quad k - k_0 \equiv t, \quad \mathrm{d}k = \mathrm{d}t \\ &= e^{ik_0 x} \int_{\mathbb{R}} e^{-\left(\sqrt{\alpha}t - \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} ix\right)^2} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \,\mathrm{d}t, \quad \sqrt{\alpha}t - \frac{1}{2\sqrt{\alpha}} ix \equiv \eta, \quad \sqrt{\alpha}\,\mathrm{d}t = \mathrm{d}\eta \\ &= e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \int_{\mathbb{R}} e^{-\eta^2} \frac{\mathrm{d}\eta}{\sqrt{\alpha}} = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} e^{ik_0 x} e^{-\frac{x^2}{4\alpha}} \end{aligned}$$

Inoltre

$$\langle x \rangle = \int_{\mathbb{R}} x f(x) \,\mathrm{d}x, \quad (\Delta x)^2 = \int_{\mathbb{R}} (x - \langle x \rangle)^2 f(x) \,\mathrm{d}x$$

Per la gaussiana si ha

$$\Delta x = \sqrt{\alpha}, \quad \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2\alpha}} \implies \Delta x \, \Delta k = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Il valore particolare non è importante. Tutti i pacchetti gaussiani hanno tale valore. Per qualunque funzione e la sua trasformata vale

$$\boxed{\Delta x \, \Delta k \geq \frac{1}{2}}$$

Caso limite. Si considera la delta di Dirac

$$f(x) = \delta(x - x_0)$$

La sua trasformata è un'onda piana

$$g(k) = e^{ikx_0} \implies |g(k)|^2 = 1 \implies \Delta k \to \infty$$

La relazione tra Δx e Δk suggerisce già un principio di indeterminazione qualora si interpreta k come una quantità di moto. Affinché sia valida l'ipotesi di de Broglie, risulta

$$\hbar k = p \implies \Delta x \, \Delta p \geq \hbar$$

La trasformata di Fourier fornisce informazioni sul momento di una particella.

Tempo. Finora, non si è menzionata un'evoluzione temporale. Si ha una descrizione di una particella libera in un certo istante. Si inserisce il tempo con la condizione che il baricentro del pacchetto di onde soddisfi l'equazione di Newton.
Per un'onda piana

$$e^{i(kx-\omega(k)t)}$$

elettromagnetica nel vuoto vale la relazione di dispersione

$$\omega(k) = 2\pi\nu = 2\pi\frac{c}{\lambda} = kc$$

Dunque, l'onda piana diventa

$$e^{ik(x-ct)}$$

e si muove con una velocità pari a c. Infatti, la soluzione all'equazione di Maxwell nel vuoto è la soluzione all'equazione delle onde

$$f(x,t) = f(x-ct)$$

Il pacchetto di onde diventa

$$\boxed{f(x,t) = \int_{\mathbb{R}} g(k)e^{i(kx-\omega(k)t)}\,\mathrm{d}k}$$

Si consideri la funzione $g(k)$ piccata intorno ad un numero d'onda k_0 centrale. La maggior parte dei valori di $\omega(k)$ che contribuiscono sono intorno a $\omega(k_0)$. Si espande in serie di Taylor

$$\omega(k) = \omega(k_0) + (k-k_0)\,\mathrm{d}_k\omega(k_0) + \frac{1}{2}(k-k_0)^2\,\mathrm{d}_k^2\omega(k_0) + \cdots$$

Posto $k' = k - k_0$, si ha

$$f(x,t) = e^{i[k_0x-\omega(k_0)t]}\int_{\mathbb{R}} g(k')e^{ik'(x-v_gt)}e^{-i\beta t(k')^2+\cdots}\,\mathrm{d}k'$$

dove

$$v_g \equiv \mathrm{d}_k\omega(k_0), \quad \beta \equiv \frac{1}{2}\,\mathrm{d}_k^2\omega(k_0)$$

Il centro del pacchetto si propaga con la velocità di gruppo v_g (che è sempre minore della velocità della luce).
I momenti della particella sono centrati attorno

$$p_0 = \hbar k_0$$

Si impone che il pacchetto si muove secondo l'equazione di Newton. La velocità di gruppo è

$$v_g = \mathrm{d}_k\omega(k_0) = \frac{p_0}{m} = \frac{\hbar k_0}{m} \implies \boxed{\omega = \frac{\hbar}{m}\frac{k^2}{2}}$$

cioè si ha la relazione di dispersione della particella libera. Segue

$$\omega = \frac{1}{2m\hbar}p^2$$

Dunque

$$f(x,t) = \int_{\mathbb{R}} g(k)e^{i\left(kx-\frac{\hbar}{2m}k^2t\right)}\,\mathrm{d}k = \frac{1}{\hbar}\int_{\mathbb{R}} g(p)e^{\frac{i}{\hbar}\left(px-\frac{p^2}{2m}t\right)}\,\mathrm{d}p$$

Si noti che, nell'ultimo termine, il coefficiente del tempo è l'energia cinetica per una particella libera non relativistica. Quindi

$$f(x,t) = \frac{1}{\hbar}\int_{\mathbb{R}} g(p)e^{\frac{i}{\hbar}(px-Et)}\,\mathrm{d}p, \quad E = \frac{p^2}{2m}$$

Da ora si utilizza il nome di funzione d'onda

$$\psi(x,t) = \int_{\mathbb{R}} \phi(p) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \, \mathrm{d}p$$

con la condizione

$$\int_{\mathbb{R}^n} |\psi(\vec{x},t)|^2 \, \mathrm{d}^n x = 1$$

Si cerca l'equazione più semplice soddisfatta dalla funzione d'onda. Si ha

$$\partial_t \psi = \int_{\mathbb{R}} \phi(p) \left(-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \right) e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \, \mathrm{d}p$$

$$\partial_x \psi = \int_{\mathbb{R}} \phi(p) \frac{i}{\hbar} p e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \, \mathrm{d}p, \quad \partial_x^2 \psi = \int_{\mathbb{R}} \phi(p) \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 p^2 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \, \mathrm{d}p$$

Dalla prima equazione si ha

$$i\hbar \, \partial_t \psi = \frac{1}{2m} \int_{\mathbb{R}} \phi(p) p^2 e^{\frac{i}{\hbar}(px - Et)} \, \mathrm{d}p = -\frac{\hbar^2}{2m} \, \partial_x^2 \psi$$

Pertanto, l'equazione di Schrödinger è

$$\boxed{i\hbar \, \partial_t \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \, \partial_x^2 \psi}$$