



Corso di Laurea in Chimica Industriale

Chimica Fisica II

Prologo

Il mondo delle particelle elementari

A.A. 2022-2023

Marco Ruzzi



Dipartimento di Scienze Chimiche
Università degli Studi di Padova
Via Marzolo 1 35129 Padova
E-mail: marco.ruzzi@unipd.it

Prologo: il mondo delle particelle elementari [1]

“If quantum mechanics hasn’t profoundly shocked you, you haven’t understood it yet.”

Niels Bohr (1885- 1962)

“I think I can safely say that nobody understands quantum mechanics.”

Richard Phillips *Feynman* (1918 - 1988)

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} |\text{cat}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}} |\text{dog}\rangle$$

Il mondo delle particelle elementari e delle interazioni fondamentali è descritto nella fisica moderna attraverso il formalismo della meccanica quantistica...

...un mondo dove è la logica e non il senso comune ad essere la sola luce guida sicura!

Prologo: il mondo delle particelle elementari [3]

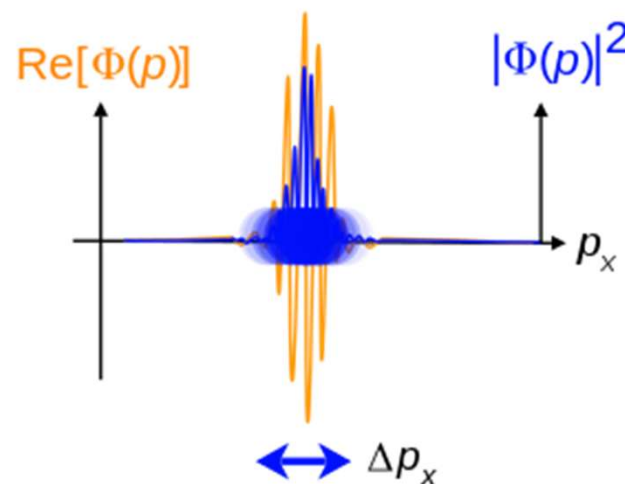
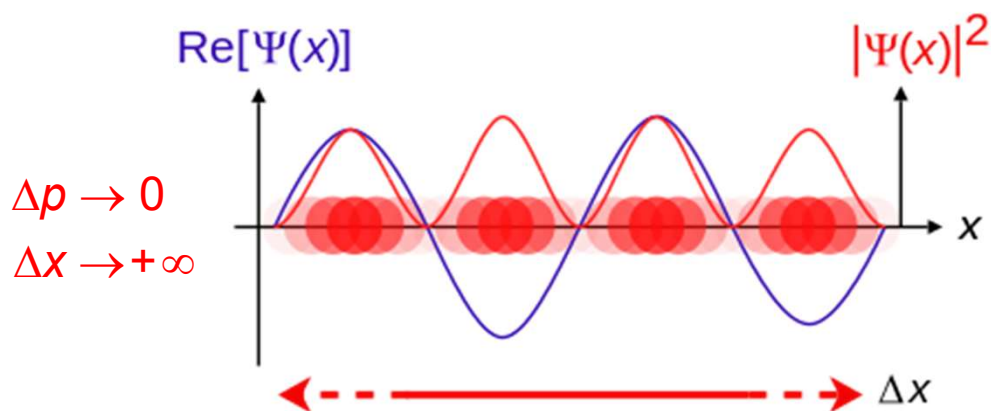
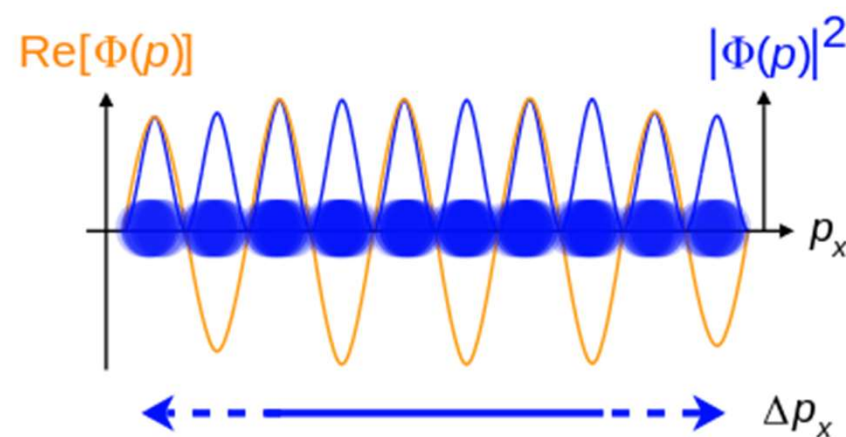
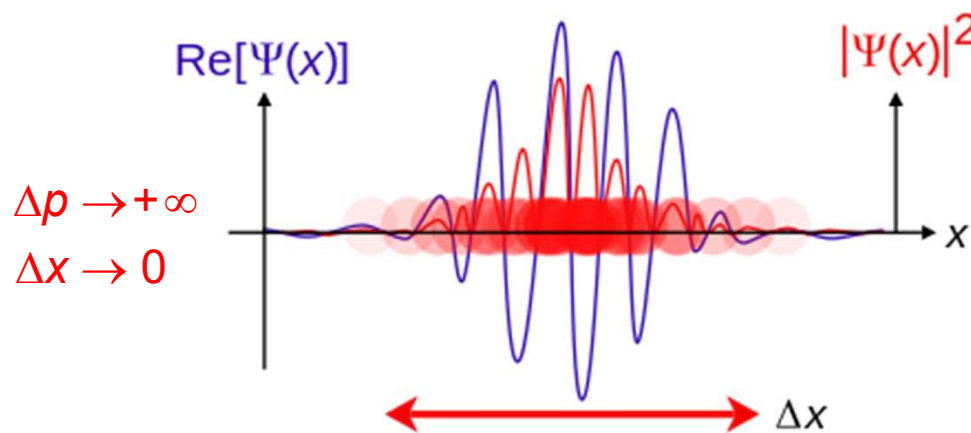
Un mondo dove vale il dualismo onda corpuscolo...

Onde elettromagnetiche (luce)
descrivibili in termini di fotoni...

$$E = h\nu$$

Particelle elementari (elettroni)
descrivibili in termini di pacchetti d'onda...

$$p = h / \lambda$$



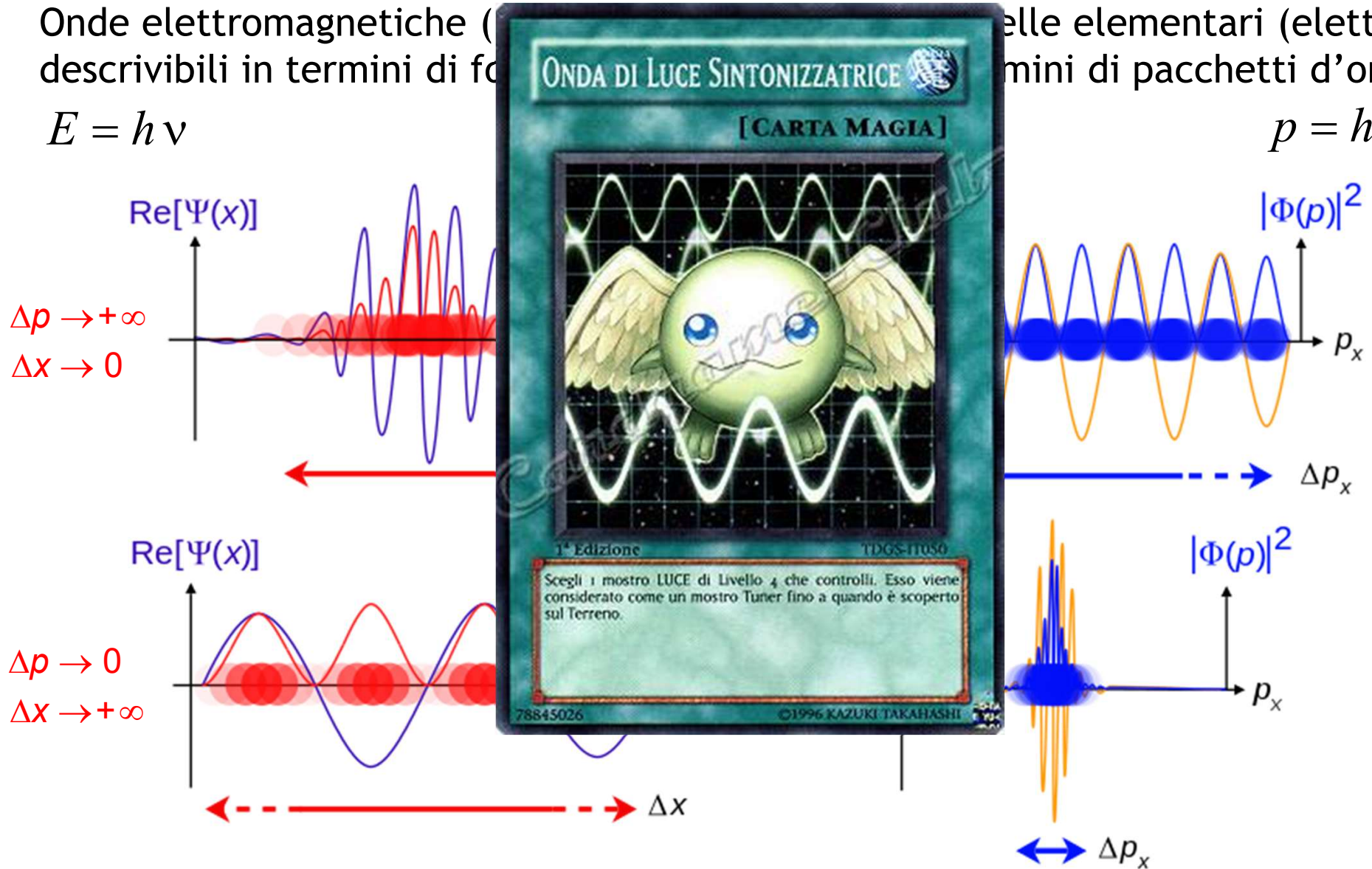
Prologo: il mondo delle particelle elementari [3]

Un mondo dove vale il dualismo onda corpuscolo...

Onde elettromagnetiche (fotoni) e particelle elementari (elettroni) descrivibili in termini di pacchetti d'onda...

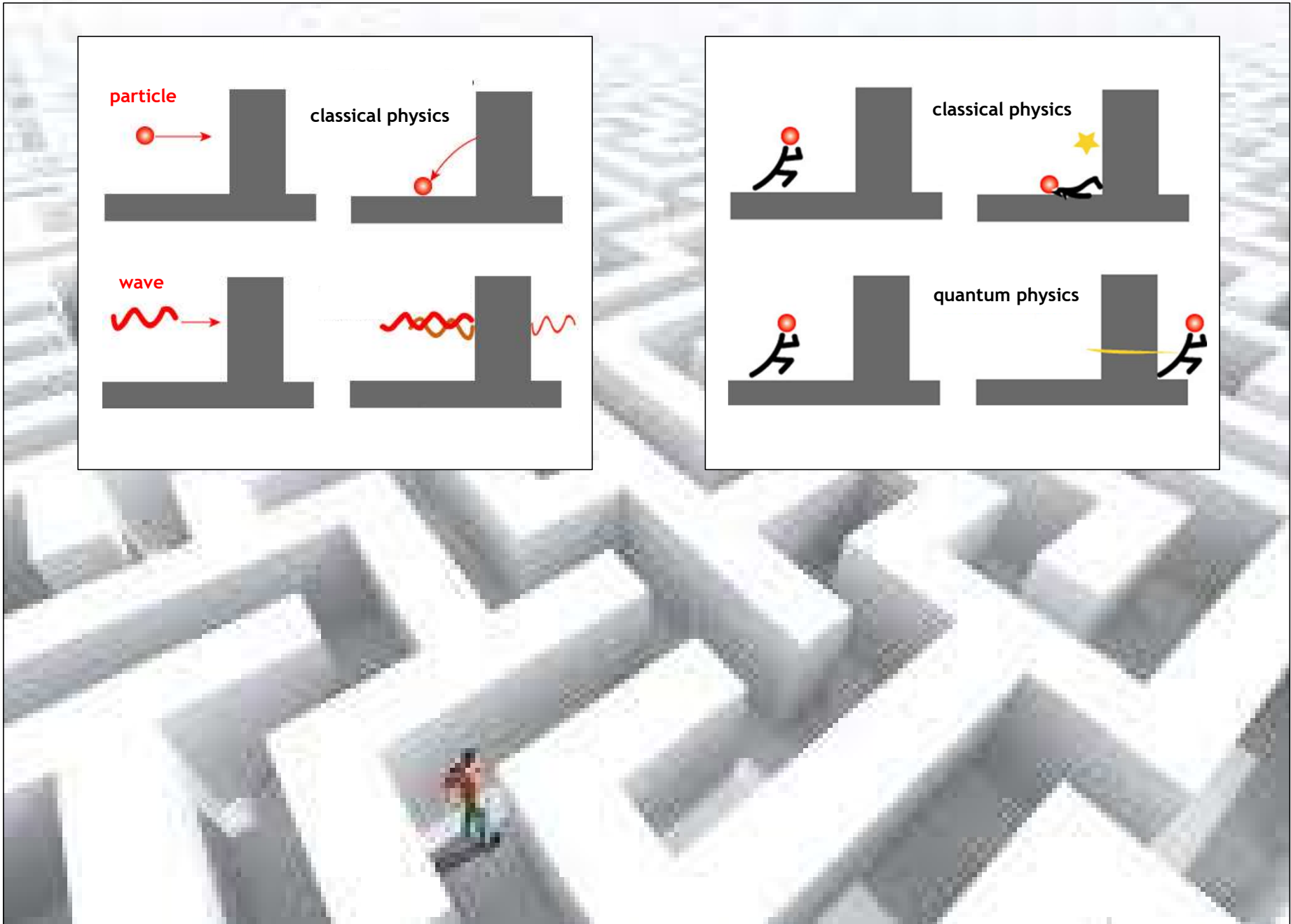
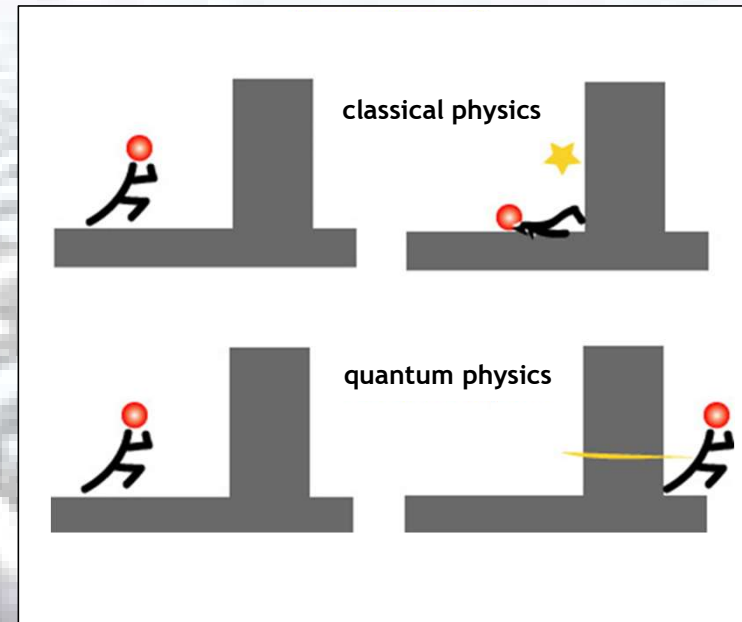
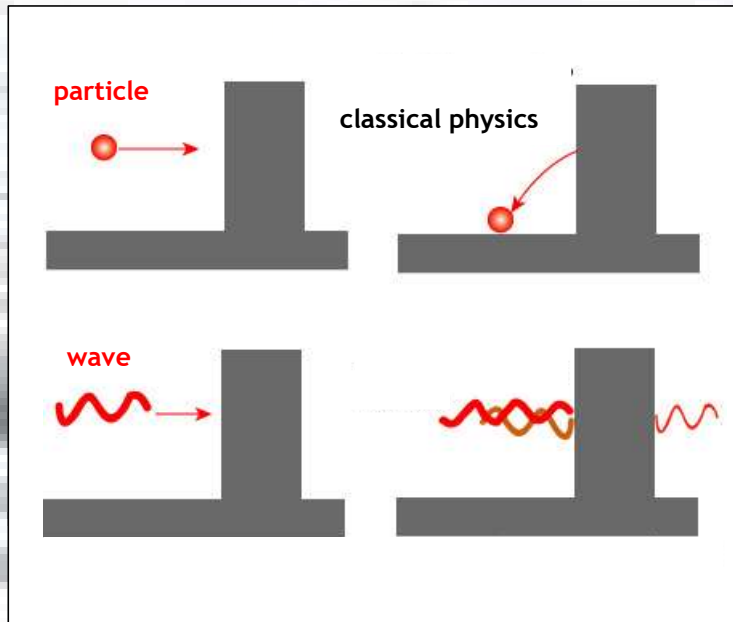
$$E = h \nu$$

$$p = h / \lambda$$



Prologo: il mondo delle particelle elementari [4]

Un mondo dove nulla è confinabile...



Prologo: il mondo delle particelle elementari [5]

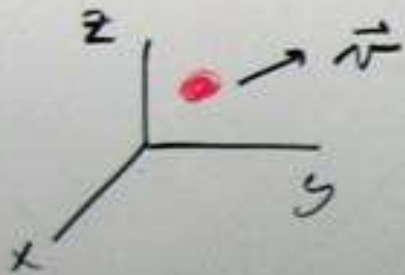
Un mondo dove nulla è conoscibile in senso deterministico...

Heisenberg Uncertainty Principle (H.U.P.)

Rectilinear Motion:

Momentum
Position

complementary observables



$$\begin{cases} \vec{p} = m\vec{v} \\ \vec{v} = \frac{d\vec{q}}{dt} \end{cases}$$

$$p = \langle p \rangle \quad \text{"average"}$$

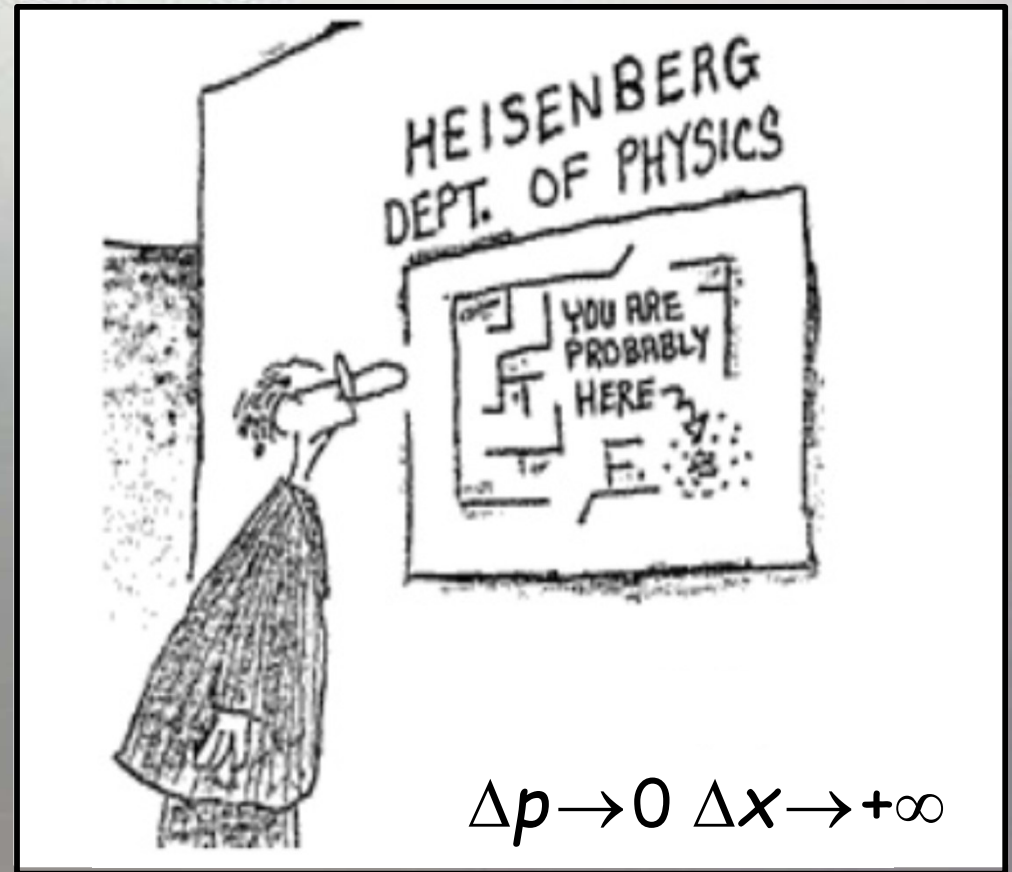
"mean"

$$q = \langle q \rangle$$

$$\text{H.U.P.: } \Delta p \Delta q \geq \frac{1}{2} \hbar$$

$$\hbar \equiv h/2\pi$$

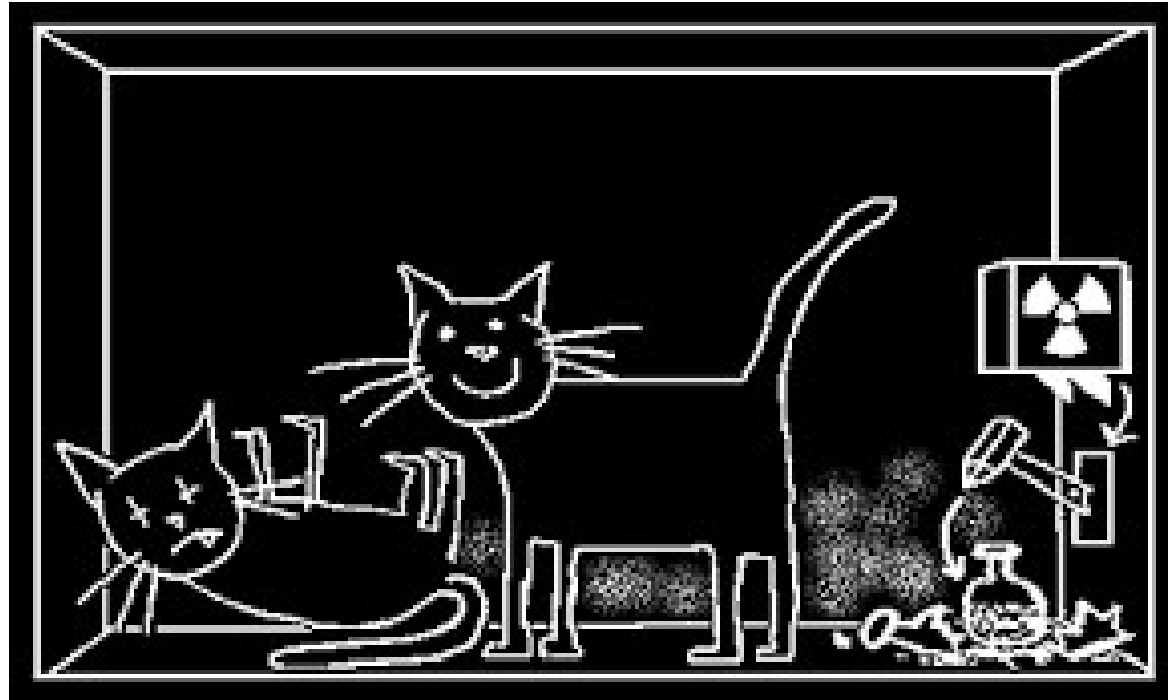
$$\Rightarrow \Delta p \geq \frac{\pi/2}{\Delta q} \Rightarrow \Delta q \downarrow \Delta p \uparrow$$



$$\Delta p \rightarrow 0 \quad \Delta x \rightarrow +\infty$$

Prologo: il mondo delle particelle elementari [6]

Un mondo dove una nuova logica della scienza si impone...



Paradosso del gatto di Schroedinger

**SCHRÖDINGER'S CAT IS
A | L E A V I E**

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\text{cat}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\text{dead}\rangle$$

Prologo: il mondo delle particelle elementari [6]

Un mondo dove una nuova logica della scienza si impone...



Paradosso del gatto di Schroedinger

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|\text{cat sitting}\rangle + \frac{1}{\sqrt{2}}|\text{cat running}\rangle$$

Prologo: il mondo delle particelle elementari [7]

... una logica basata sul fatto che in natura quello che si realizza nel corso di un esperimento che coinvolge particelle di natura quantistica è l'insieme simultaneo di tutti i possibili risultati ma quello che si misura è solo uno dei tanti risultati possibili!

Quello che si realizza...



“About your cat, Mr. Schrödinger—I have good news and bad news.”

Prologo: il mondo delle particelle elementari [7]

... una logica basata sul fatto che in natura quello che si realizza nel corso di un esperimento che coinvolge particelle di natura quantistica è l'insieme simultaneo di tutti i possibili risultati ma quello che si misura è solo uno dei tanti risultati possibili!

Quello che si rileva sperimentalmente in modo mutuamente esclusivo...



“About your cat, Mr. Schrödinger—I have good news ~~and bad news.~~”

Prologo: il mondo delle particelle elementari [7]

... una logica basata sul fatto che in natura quello che si realizza nel corso di un esperimento che coinvolge particelle di natura quantistica è l'insieme simultaneo di tutti i possibili risultati ma quello che si misura è solo uno dei tanti risultati possibili!

Quello che si rileva sperimentalmente in modo mutuamente esclusivo...

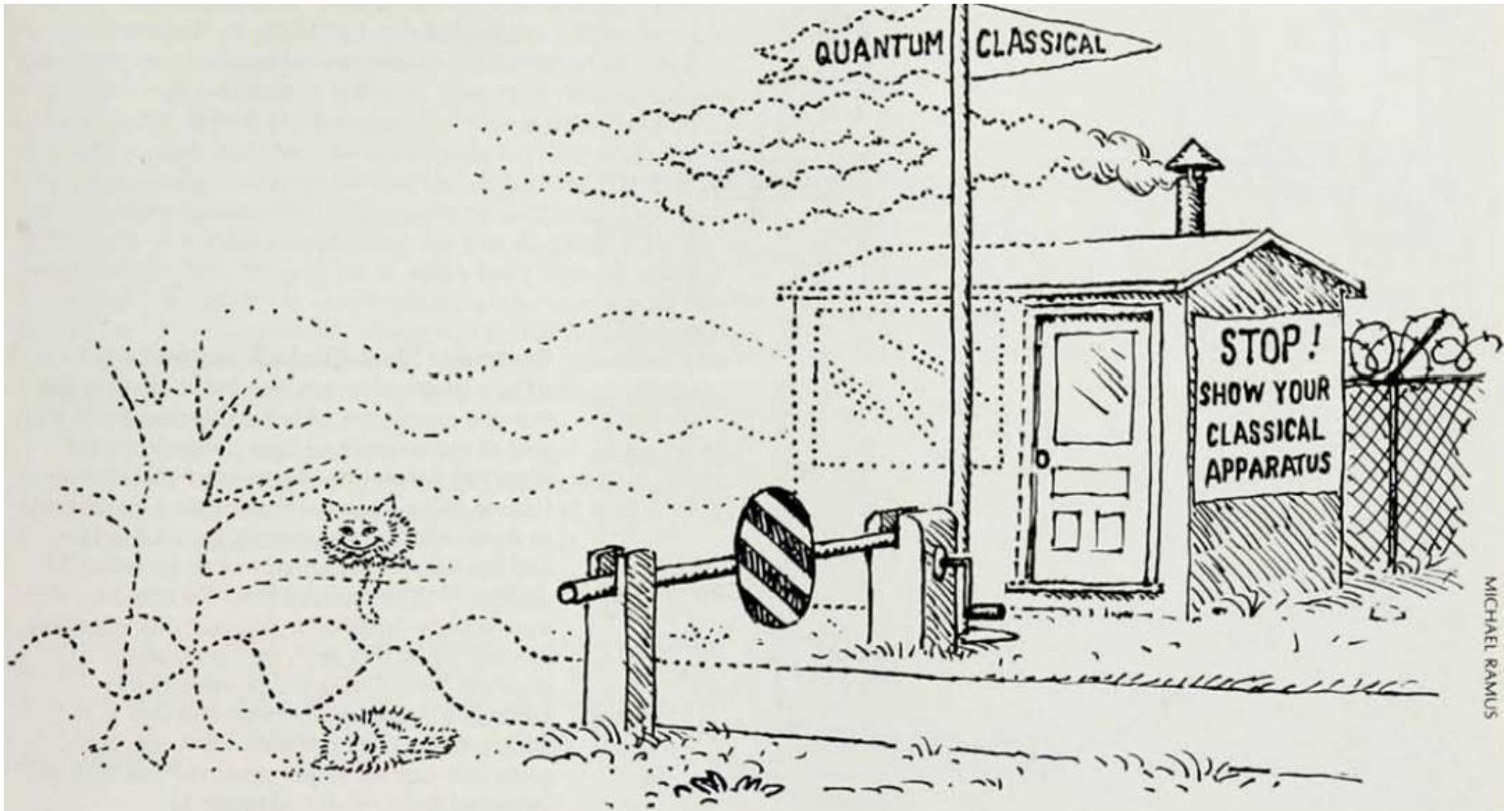


*“About your cat, Mr. Schrödinger—I have
~~good news and bad news.~~”*

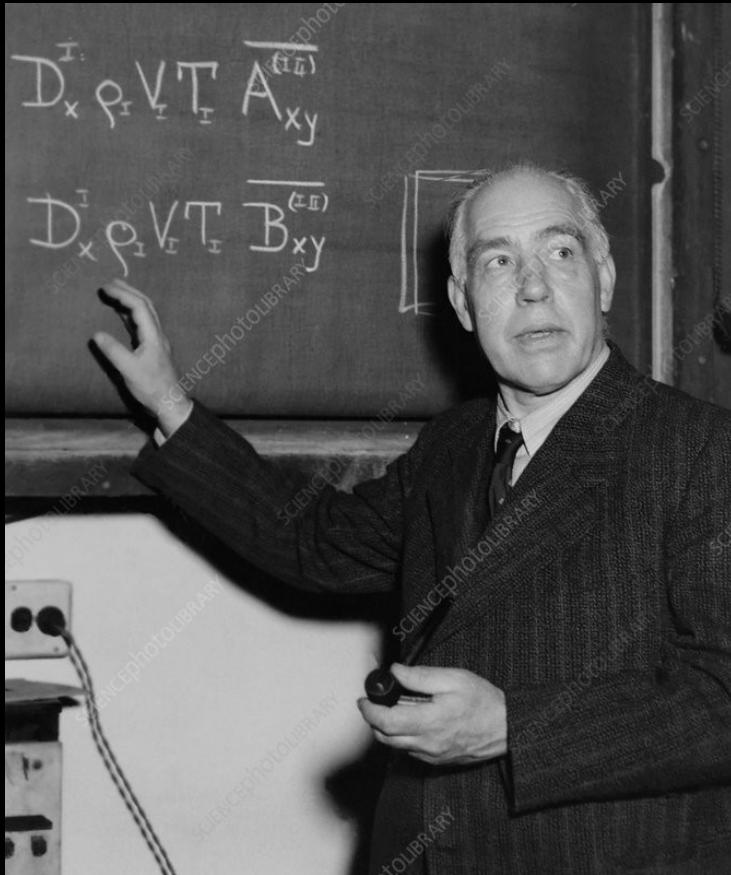
Prologo: il mondo delle particelle elementari [8]

Le leggi della fisica quantistica, rimaste inalterate fino ad oggi e mai contraddette, rimangono tuttavia concettualmente enigmatiche...

citando A. Einstein: ... *basate su concetti qualche volta analoghi al sorriso di un gatto che non c'è.*



Prologo: sui paradossi della meccanica quantistica [1]



“Chiunque non resti sbalordito dalla teoria quantistica, sicuramente non l’ha capita.”

Niels Bohr
Premio Nobel nel 1922

NIELS BOHR

The structure of the atom

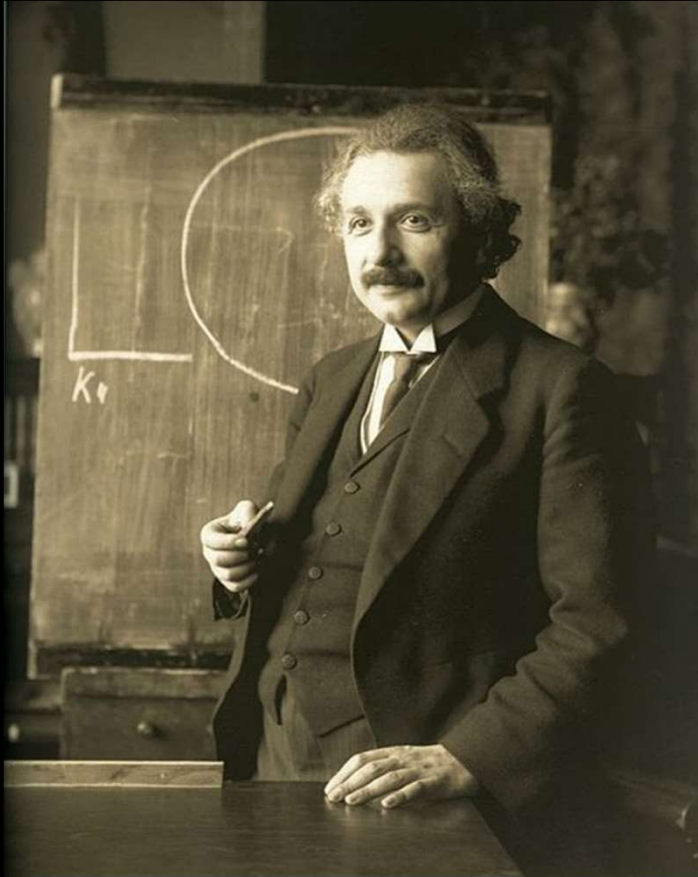
Nobel Lecture, December 11, 1922

Ladies and Gentlemen. Today, as a consequence of the great honour the Swedish Academy of Sciences has done me in awarding me this year's Nobel Prize for Physics for my work on the structure of the atom, it is my duty to give an account of the results of this work and I think that I shall be acting in accordance with the traditions of the Nobel Foundation if I give this report in the form of a survey of the development which has taken place in the last few years within the field of physics to which this work belongs.

The general picture of the atom

The present state of atomic theory is characterized by the fact that we not only believe the existence of atoms to be proved beyond a doubt, but also we even believe that we have an intimate knowledge of the constituents of the individual atoms. I cannot on this occasion give a survey of the scientific developments that have led to this result; I will only recall the discovery of the electron towards the close of the last century, which furnished the direct verification and led to a conclusive formulation of the conception of the atomic nature of electricity which had evolved since the discovery by Faraday of the fundamental laws of electrolysis and Berzelius's electrochemical theory, and had its greatest triumph in the electrolytic dissociation theory of Arrhenius. This discovery of the electron and elucidation of its properties was the result of the work of a large number of investigators, among whom Lenard and J. J. Thomson may be particularly mentioned. The latter especially has made very important contributions to our subject by his ingenious attempts to develop ideas about atomic constitution on the basis of the electron theory. The present state of our knowledge of the elements of atomic structure was reached, however, by the discovery of the atomic nucleus, which we owe to Rutherford, whose work on the radioactive substances discovered towards the close of the last century has much enriched physical and chemical science.

Prologo: sui paradossi della meccanica quantistica [2]



*“Quanto più la teoria dei quanti
incontra rilevanti successi,
tanto più mi appare folle”.*

Albert Einstein
Premio Nobel nel 1921

ALBERT EINSTEIN

Fundamental ideas and problems of the theory of relativity

*Lecture delivered to the Nordic Assembly of Naturalists at Gothenburg
July 11, 1923*

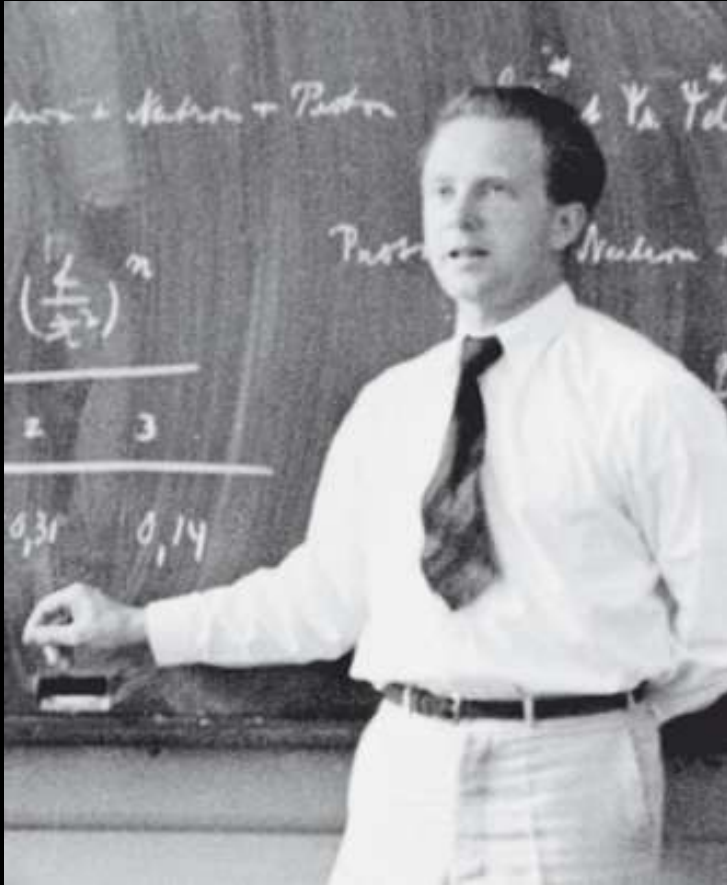
If we consider that part of the theory of relativity which may nowadays in a sense be regarded as bona fide scientific knowledge, we note two aspects which have a major bearing on this theory. The whole development of the theory turns on the question of whether there are physically preferred states of motion in Nature (physical relativity problem). Also, concepts and distinctions are only admissible to the extent that observable facts can be assigned to them without ambiguity (stipulation that concepts and distinctions should have meaning). This postulate, pertaining to epistemology, proves to be of fundamental importance.

These two aspects become clear when applied to a special case, e.g. to classical mechanics. Firstly we see that at any point filled with matter there exists a preferred state of motion, namely that of the substance at the point considered. Our problem starts however with the question whether physically preferred states of motion exist in reference to *extensive* regions. From the viewpoint of classical mechanics the answer is in the affirmative; the physically preferred states of motion from the viewpoint of mechanics are those of the inertial frames.

This assertion, in common with the basis of the whole of mechanics as it generally used to be described before the relativity theory, far from meets the above "stipulation of meaning". Motion can only be conceived as the relative motion of bodies. In mechanics, motion relative to the system of coordinates is implied when merely motion is referred to. Nevertheless this interpretation does not comply with the "stipulation of meaning" if the coordinate system is considered as something purely imaginary. If we turn our attention to experimental physics we see that there the coordinate system is invariably represented by a "practically rigid" body. Furthermore it is assumed that such rigid bodies can be positioned in rest relative to one another

* The Lecture was not delivered on the occasion of the Nobel Prize award, and did not, therefore, concern the discovery of the photoelectric effect.

Prologo: sui paradossi della meccanica quantistica [3]



“Non solo l'universo è più strano di quanto pensiamo, è persino più strano di quanto possiamo pensare.”

Werner Heisenberg
Premio Nobel nel 1932

WERNER HEISENBERG

The development of quantum mechanics

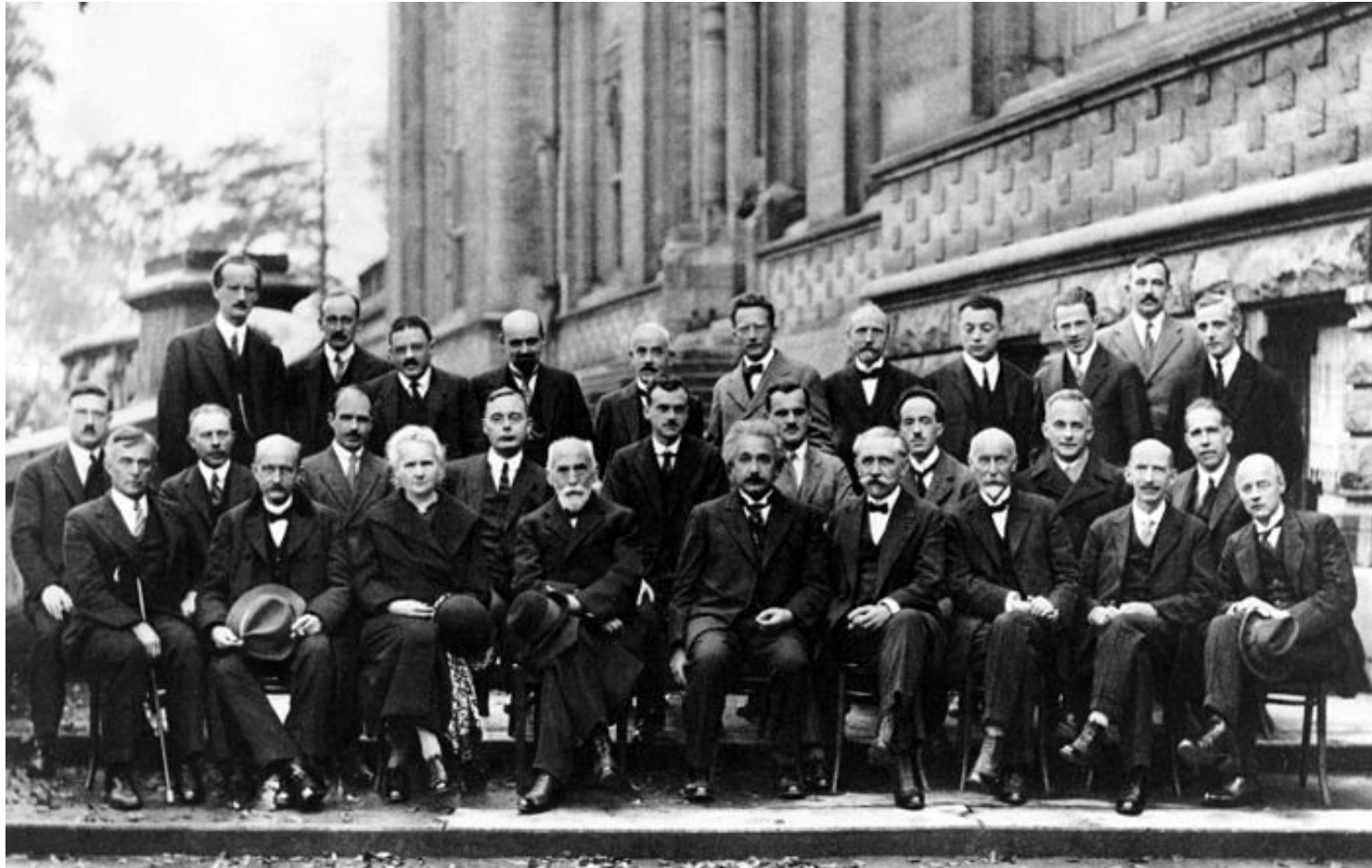
Nobel Lecture, December 11, 1933

Quantum mechanics, on which I am to speak here, arose, in its formal content, from the endeavour to expand Bohr's principle of correspondence to a complete mathematical scheme by refining his assertions. The physically new viewpoints that distinguish quantum mechanics from classical physics were prepared by the researches of various investigators engaged in analysing the difficulties posed in Bohr's theory of atomic structure and in the radiation theory of light.

In 1900, through studying the law of black-body radiation which he had discovered, Planck had detected in optical phenomena a discontinuous phenomenon totally unknown to classical physics which, a few years later, was most precisely expressed in Einstein's hypothesis of light quanta. The impossibility of harmonizing the Maxwellian theory with the pronouncedly visual concepts expressed in the hypothesis of light quanta subsequently compelled research workers to the conclusion that radiation phenomena can only be understood by largely renouncing their immediate visualization. The fact, already found by Planck and used by Einstein, Debye, and others, that the element of discontinuity detected in radiation phenomena also plays an important part in material processes, was expressed systematically in Bohr's basic postulates of the quantum theory which, together with the Bohr-Sommerfeld quantum conditions of atomic structure, led to a qualitative interpretation of the chemical and optical properties of atoms. The acceptance of these basic postulates of the quantum theory contrasted uncompromisingly with the application of classical mechanics to atomic systems, which, however, at least in its qualitative affirmations, appeared indispensable for understanding the properties of atoms. This circumstance was a fresh argument in support of the assumption that the natural phenomena in which Planck's constant plays an important part can be understood only by largely foregoing a visual description of them. Classical physics seemed the limiting case of visualization of a fundamentally unvisualizable microphysics, the more accurately realizable the more Planck's constant vanishes relative to the parameters of the system. This view of classical mechanics as a limiting case

Prologo: i successi della meccanica quantistica [1]

... e tuttavia la meccanica quantistica è senza dubbio la teoria fisica di maggior successo mai sviluppata dall'umanità. Le sue leggi sono il risultato dell'elaborazione teorica dei più grandi fisici di tutti i tempi.

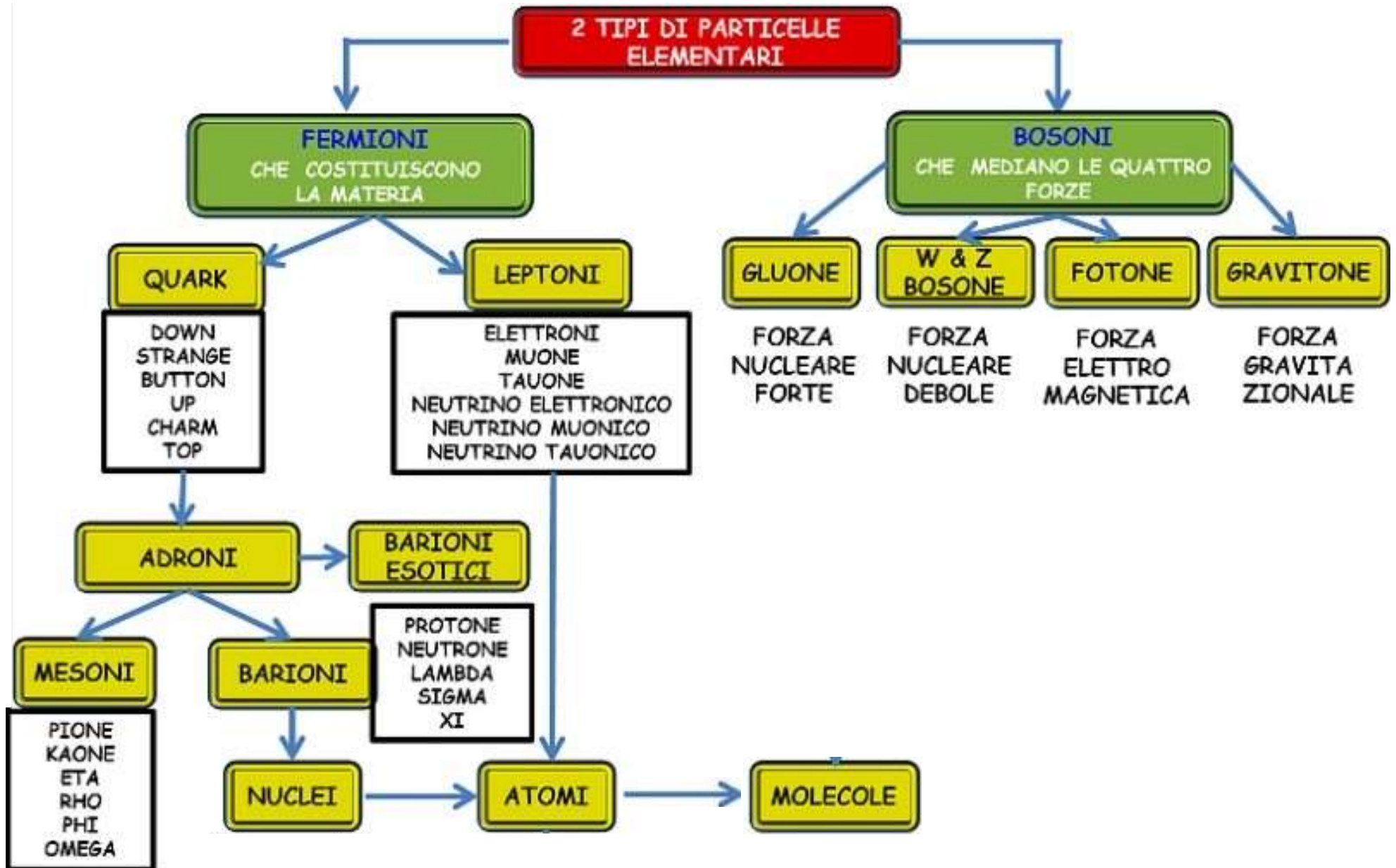


A. Piccard, E. Henriot, P. Ehrenfest, E. Herzen, Th. de Donder, **E. Schrödinger**, J.E. Verschaffelt, **W. Pauli**, **W. Heisenberg**, R.H. Fowler, L. Brillouin; P. Debye, M. Knudsen, W.L. Bragg, H.A. Kramers, **P.A.M. Dirac**, A.H. Compton, **L. de Broglie**, **M. Born**, **N. Bohr**, I. Langmuir, **M. Planck**, M. Skłodowska-Curie, H.A. Lorentz, **A. Einstein**, P. Langevin, Ch.-E. Guye, C.T.R. Wilson, O.W. Richardson.

Fifth conference participants, 1927. Bruxelles, Institut International de Physique Solvay in Leopold Park.

Prologo: i successi della meccanica quantistica [2]

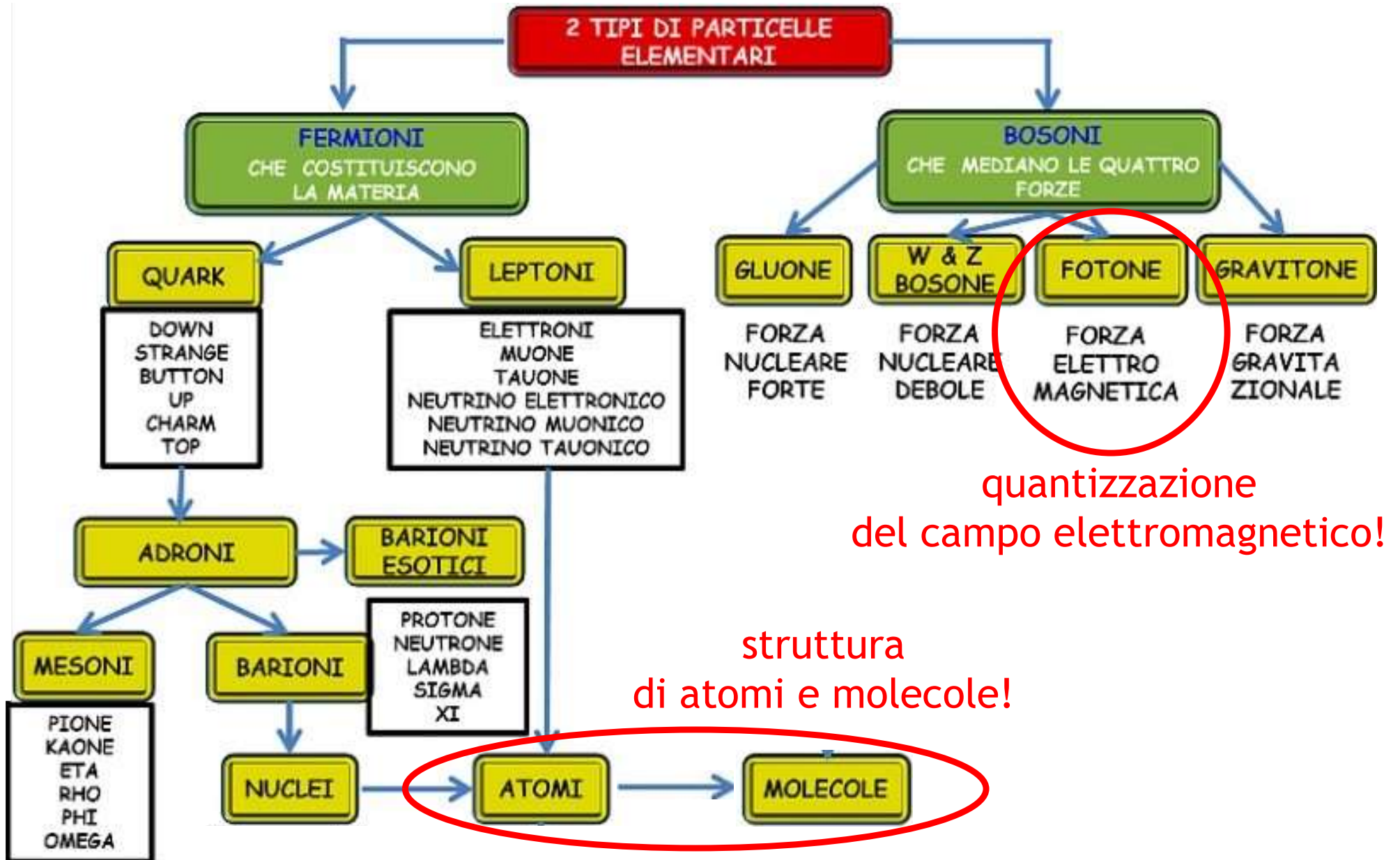
La meccanica quantistica costituisce la base teorica del Modello Standard...



Dall'atomo alla galassia, l'intera architettura fisica dell'universo è spiegabile sulla base dell'esistenza di quattro forze e due famiglie di particelle...

Prologo: i successi della meccanica quantistica [2]

La meccanica quantistica costituisce la base teorica del Modello Standard...



Dall'atomo alla galassia, l'intera architettura fisica dell'universo è spiegabile sulla base dell'esistenza di quattro forze e due famiglie di particelle...

Prologo: i successi della meccanica quantistica [3]

... e trova conferma nei risultati sperimentali con sconvolgente precisione!

Ad esempio nell'ambito dell'elettrodinamica quantistica (QED) l'anomalia del muone è stata prevista con un errore di tre parti sul miliardo...

momento di dipolo magnetico muonico

$$\vec{\mu}_\mu = -g_\mu \frac{|e|}{2m_\mu} \vec{s}$$

anomalia del momento di dipolo magnetico

$$a_\mu = (g_\mu - 2)/2$$

$$a_\mu^{(\text{exp})} = 116592080(63) \times 10^{-11} \quad (0.54 \text{ ppm})$$

$$a_\mu^{(\text{stand mod})} = a_\mu^{(\text{QED})} + a_\mu^{(\text{WEAK})} = 116591785(61) \times 10^{-11} \quad (0.52 \text{ ppm})$$

$$|\delta a_\mu| = (2.94 \pm 0.89) \times 10^{-9}$$

Prologo: i successi della meccanica quantistica [3]

... e trov

isione!

Ad esem
del muo

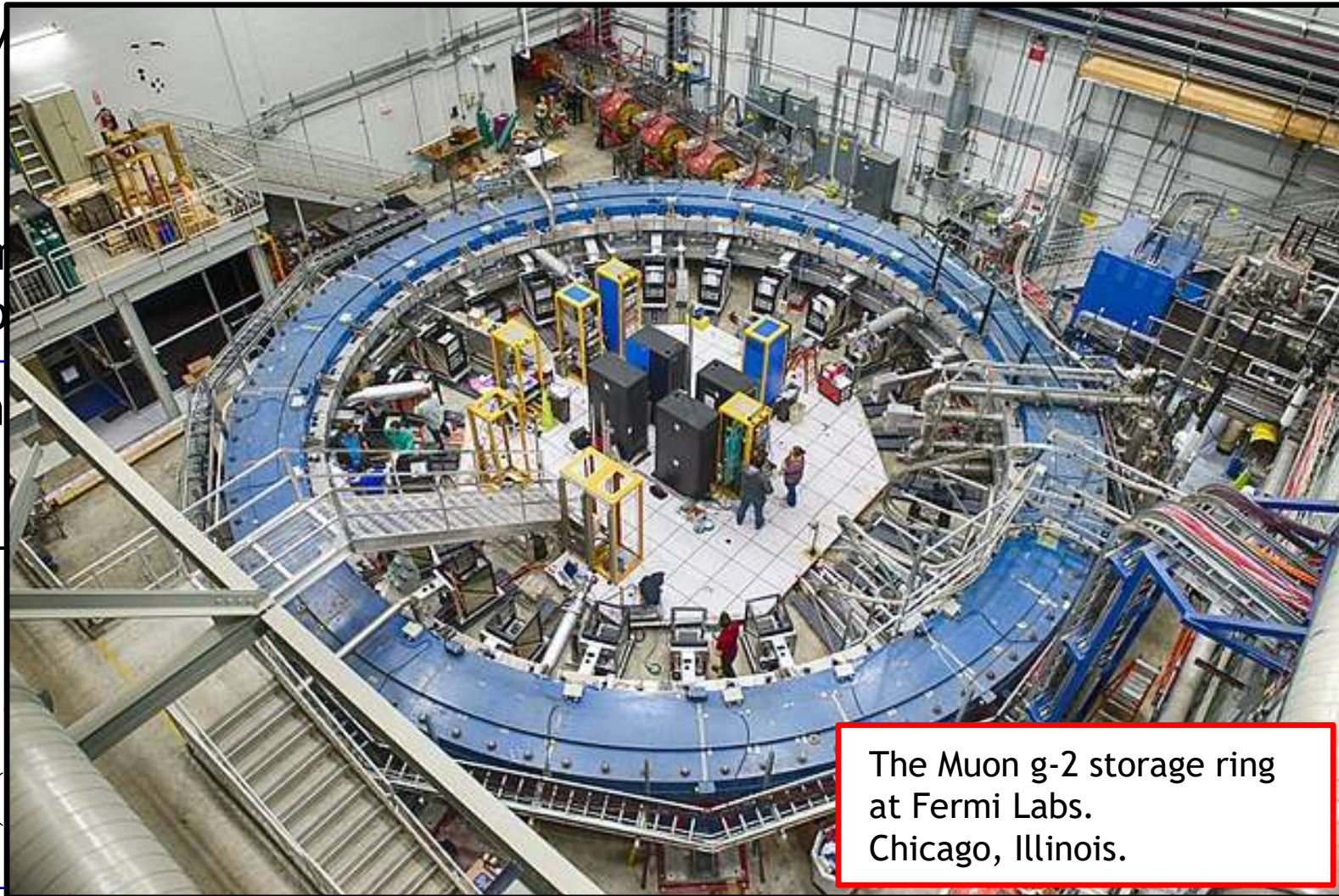
nomalia

momen

$$\vec{\mu}_\mu = -$$

anomal

$$a_\mu = ($$



The Muon g-2 storage ring
at Fermi Labs.
Chicago, Illinois.

$$a_\mu^{(\text{exp})} = 116592080(63) \times 10^{-11} \quad (0.54 \text{ ppm})$$

$$a_\mu^{(\text{stand mod})} = a_\mu^{(\text{QED})} + a_\mu^{(\text{WEAK})} = 116591785(61) \times 10^{-11} \quad (0.52 \text{ ppm})$$

$$|\delta a_\mu| = (2.94 \pm 0.89) \times 10^{-9}$$

(2016) Brookhaven Nat. Labs, NY)

Prologo: i successi della meccanica quantistica [4]

... e trov

isione!

Ad esem
del muo

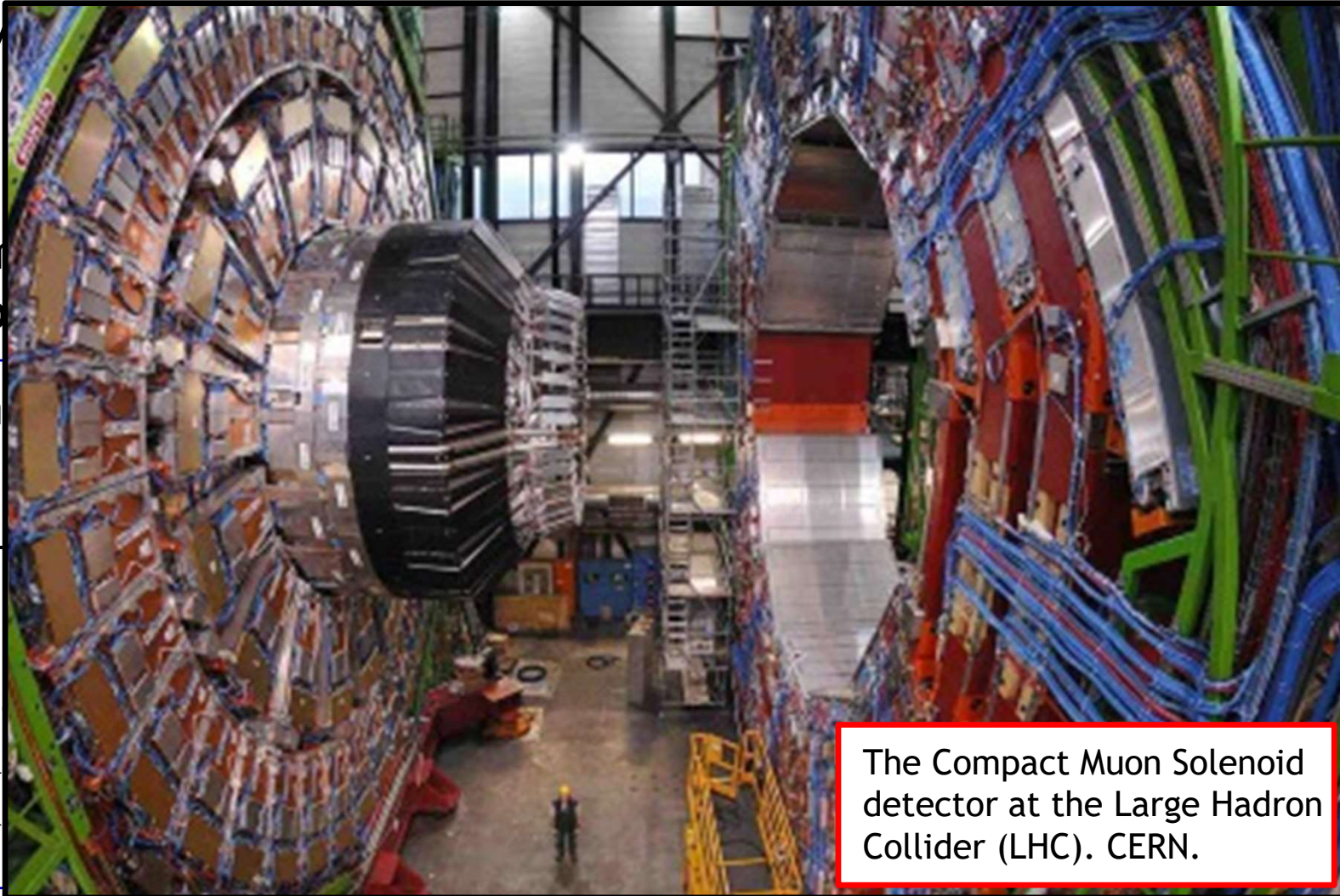
nomalia

moment

$$\vec{\mu}_\mu = -$$

anomali

$$a_\mu = ($$



The Compact Muon Solenoid detector at the Large Hadron Collider (LHC). CERN.

$$a_\mu^{(\text{exp})} = 116592080... \times 10^{-11}$$

$$a_\mu^{(\text{stand mod})} = a_\mu^{(\text{QED})} + a_\mu^{(\text{WEAK})} + a_\mu^{(\text{HADR})} = 116591785... \times 10^{-11}$$

$$|\delta a_\mu| < 2.94 \times 10^{-9}$$

Prologo: i successi della meccanica quantistica [4]

... e trov

LHC

isione!

Ad esem
del muo

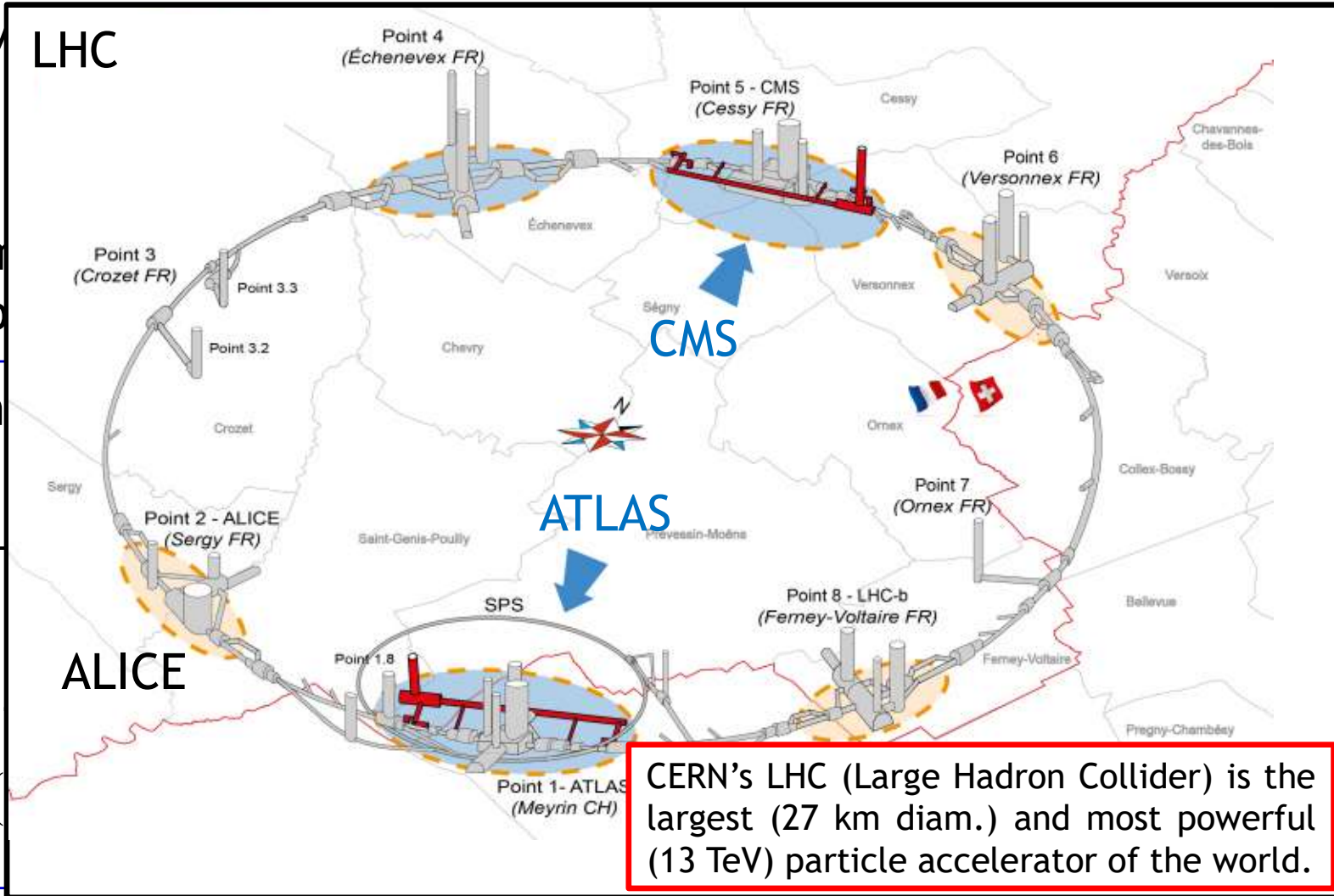
nomalia

moment

$$\vec{\mu}_\mu =$$

anomali

$$a_\mu =$$



CERN's LHC (Large Hadron Collider) is the largest (27 km diam.) and most powerful (13 TeV) particle accelerator of the world.

$$a_\mu^{(\text{exp})} = 116592080... \times 10^{-11}$$

$$a_\mu^{(\text{stand mod})} = a_\mu^{(\text{QED})} + a_\mu^{(\text{WEAK})} + a_\mu^{(\text{HADR})} = 116591785... \times 10^{-11}$$

$$|\delta a_\mu| < 2.94 \times 10^{-9}$$

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [1]

Il formalismo della meccanica quantistica è senza dubbio il linguaggio matematico più evoluto mai concepito nell'ambito di una teoria fisica.

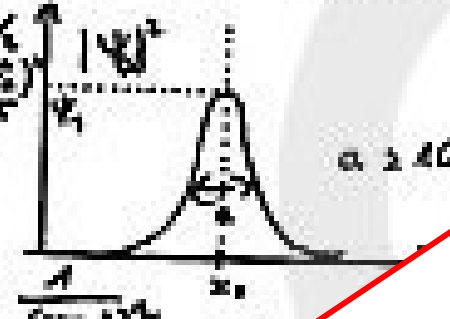
hard math!

$$\langle \phi_n | \phi_n \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx |\phi_n(x)|^2 = \int_{-L/2}^{L/2} dx \frac{1}{L} = 1$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \langle \phi_n | \int dx |x\rangle \langle x | \phi_m \rangle \Rightarrow (\frac{E_n + E_m}{2}) \frac{L}{2} = \frac{E_n - E_m}{2} (2L - 1), L \rightarrow \infty$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \int_{-L/2}^{L/2} dx \phi_n^*(x) \phi_m(x) \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left[\frac{n\pi}{L}(x + L/2)\right]; \psi_m(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left[\frac{m\pi}{L}(x + L/2)\right]$$

$$\langle \phi_n | \phi_m \rangle = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dx e^{-ikx} e^{ik'x} = 0; k \neq k'$$



$$|Y_0\rangle = |Y_0\rangle e^{-\frac{(x-x_0)^2}{2a^2}}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\frac{x^2}{2a^2}} = \sqrt{2\pi} a$$

$$A = \frac{1}{2\pi a^2} \Rightarrow |\psi_0\rangle = \frac{1}{(\pi a^2)^{1/4}}$$

$$[\hat{p}, \hat{x}] = \frac{\hbar}{i}; \hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} / \hbar$$

$$a \cdot \hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger \cdot a = (a + b) \hat{a}^\dagger + (a + b) \hat{a} = 2a + 2b \hat{a}^\dagger$$

$$= a^2 \hat{p}^2 + i b a \hat{p} + \hat{p}^2 + i b \hat{p} a = 2a^2 \hat{p}^2 + 2i b a \hat{p}$$

$$\hat{H} = (a \hat{p} + i b \hat{x})^2 = \hat{H}_0 + i \hbar \omega \hat{c}^\dagger \hat{c} + \frac{1}{2} \hbar \omega$$

$$D\psi = \hat{c}^\dagger \frac{\partial}{\partial x} \psi$$

$$\begin{pmatrix} \omega & \frac{\hbar}{2m} \\ -\frac{\hbar}{2m} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \psi' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \psi \\ \frac{\hbar}{2m} \psi' \end{pmatrix}$$

$$\psi = \begin{pmatrix} \cos \\ \sin \end{pmatrix} \quad \hat{G}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{G}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{G}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$S = \frac{1}{2} \sigma_i \text{ie} \text{ie} \text{ie}$$

$$\int dx |\psi\rangle \langle \psi| = 1$$

$$= \int dx \psi_n^*(x) \psi_n(x) = \int dx |\psi_n(x)|^2$$

$$= \int dx \psi_n^*(x) \psi_n(x) = \int dx |\psi_n(x)|^2$$

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [2]

Atomi e molecole sono descritti sulla base di un'equazione fondamentale che descrive lo stato degli elettroni quando sottoposti al campo di forza di uno o più nuclei.

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi + U\psi = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

equazione di Schrödinger...



Analisi
Matematica



$$\psi(x, y, z, t)$$

funzione d'onda...

La funzione d'onda contiene in sé tutte le informazioni sulla struttura e sulla dinamica del sistema atomico e/o molecolare.

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [3]

Nel caso dell'atomo di idrogeno la risoluzione dell'equazione (differenziale alle derivate parziali) di Schroedinger richiede alcune pagine di calcoli quanto-meccanici...

3

3d - problems - General Potentials, with spherical symmetry.

Let $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = H\Psi$ where $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$, $\vec{p} = -i\hbar \vec{\nabla}$

Laplacian in 3d: $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

problems with spherical symmetry
 \rightarrow use spherical coordinates.

separated soln. $\Psi(r, \theta, \phi) = Y(\theta, \phi) e^{-iEt/\hbar}$
 $\Psi(r) = R(r) Y(\theta, \phi)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) Y + \frac{R}{r^2 \sin\theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} \right] + V R Y = E R Y$$

Divide by RY , see that it separates:

angular: $\frac{1}{\sin\theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = -l(l+1) Y$

radial: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} R + V(r) R = E R$

or $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = E R$

The angular eqn. is the same for all potentials.
 The radial eqn. gets modified according to the angular quantum # l .

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [3]

Nel caso dell'atomo di idrogeno la risoluzione dell'equazione (differenziale alle derivate parziali) di Schroedinger richiede alcune pagine di calcoli quanto-meccanici...

3d - problems - General Potentials, with spherical symmetry.

where $H = \frac{p^2}{2m} + V(r)$, $\hat{p} = -i\hbar \nabla$

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

Laplacian in 3d: $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$

problems with spherical symmetry \rightarrow use spherical coordinates.

separated soln. $\Psi(r, \theta, \phi) = Y(\theta, \phi) R(r) e^{-iEt/\hbar}$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) Y + \frac{R}{r^2 \sin\theta} \left\{ \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right\} \right] + V(r) R Y = E R Y$$

divide by RY , see that it separates:

angular: $\frac{1}{\sin\theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial Y}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial^2 Y}{\partial \phi^2} \right] = -l(l+1) Y$

radial: $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} R + V(r) R = E R$

or $-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = E R$

The angular eqn. is the same for all potentials.

The radial eqn. gets modified accordingly.

Angular eqn. $Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + l(l+1) \sin^2\theta \Theta + \frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = 0$$

choose $\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \phi^2} = -m^2 \Phi \rightarrow \Phi(\phi) = e^{im\phi}$$

$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

solve by "associated Legendre functions"

$$\sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin\theta \frac{\partial \Theta}{\partial \theta} \right) + \left[l(l+1) \sin^2\theta - m^2 \right] \Theta = 0$$

$$P_l^m(x) = (-1)^m \left(\frac{d}{dx} \right)^m P_l(x)$$

where $P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \left(\frac{d}{dx} \right)^l (x^2-1)^l$ are Legendre polynomials. $x = \cos\theta$.

Total soln. $Y(\theta, \phi) \rightarrow Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos\theta)$

and $Y_l^{-m}(\theta, \phi) = (-1)^m Y_l^m(\theta, \phi)^*$

"constant" chosen so that $\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_l^m(\theta, \phi) Y_{l'}^{m'}(\theta, \phi) \sin\theta d\theta d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$

"spherical harmonics"

with $l=0, 1, 2, \dots$ and $m = -l, -(l-1), \dots, 0, 1, 2, \dots, l-1, l$ (all possible values).

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [3]

Nel caso dell'atomo di idrogeno la risoluzione dell'equazione (differenziale alle derivate parziali) di Schroedinger richiede alcune pagine di calcoli quanto-meccanici...

3d-probl
ik $\frac{\partial \Psi}{\partial t} =$
Laplacian
problems will
→ use
separated
 $-\frac{\hbar^2}{2m}$
divide
angular
radial
or
The
The

Radial Equation. — depends on the potential.
let $u = rR$ or $R = \frac{u}{r}$
then $\frac{dR}{dr} = (r \frac{du}{dr} - u)/r^2$ $r^2 \frac{dR}{dr} = r \frac{du}{dr} - u$
 $\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) = r \frac{d^2u}{dr^2}$ and radial equation is simplified:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2u}{dr^2} + \left[V(r) + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u = Eu$$

effective potential includes a "centrifugal term".

Hydrogen atom: $V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$ (SI units), $E < 0$. let $k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$, $\rho = kr$.

Then get $\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 E \rho} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mE \rho^2} \right] u = u$

$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left[\frac{-e^2 k}{4\pi\epsilon_0 E \rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u = u$ let $\frac{-e^2 k}{4\pi\epsilon_0 E} = \rho_0$
or $\rho_0 = \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 k}$

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} = \left[1 - \frac{\rho_0}{\rho} + \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] u$$

analyze its asymptotic behavior

as $\rho \rightarrow \infty$: $\frac{d^2u}{d\rho^2} = u$, $u \sim Ae^{\rho} + Be^{-\rho} \rightarrow Ae^{-\rho}$
as $\rho \rightarrow 0$: $\frac{d^2u}{d\rho^2} = \frac{l(l+1)}{\rho^2} u$, $u \sim C\rho^{l+1} + D\rho^{-l} \rightarrow C\rho^{l+1}$

5.
4.

$Y(\theta, \phi) = \Theta(\theta) \Phi(\phi)$

$\Theta(\theta) + l(l+1) \sin^2 \theta \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{d\Phi}{d\theta} \right\} = 0$
choose $\frac{d\Phi}{d\theta} = -m^2$

$\Phi(\theta) = e^{im\phi}$
 $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Legendre Functions
 $\frac{d}{dx} \left((1-x^2) \frac{dP_l^m}{dx} \right) + [l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}] P_l^m = 0$
 $x = \cos \theta$
are Legendre polynomials.

$Y_l^m(\theta, \phi) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!}} e^{im\phi} P_l^m(\cos \theta)$
"spherical harmonics"

$Y_l^m(\theta, \phi) = \int_{-\pi}^{\pi} \int_0^{\pi} \dots$
 $l = 0, 1, 2, \dots$
 $m = -l, \dots, 0, \dots, l$
possible values

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [3]

Nel caso dell'atomo di idrogeno la risoluzione dell'equazione (differenziale alle derivate parziali) di Schroedinger richiede alcune pagine di calcoli quanto-meccanici...

3d-probl
ik $\frac{\partial \psi}{\partial t} =$
Laplacian
problems will
→ use
separated

Radial Equation. — depends on the poten
let $u = rR$ or $R = \frac{u}{r}$
then $\frac{dR}{dr} = (r \frac{du}{dr} - u)/r^2$ and $r^2 \frac{dR}{dr} = r \frac{du}{dr} - u$
 $\frac{d}{dr}(r^2 \frac{dR}{dr}) = r \frac{d^2u}{dr^2}$

Hydrogen atom: $V(r) = \frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r}$
Look at the bound states, $E < 0$.
Then get
 $\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{-e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} - E \right] u = 0$
 $\frac{d^2u}{dr^2} + \left[\frac{-e^2 \hbar^2}{4\pi\epsilon_0 m r} - \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m r^2} - E \right] u = 0$

as $p \rightarrow \infty$: $\frac{d^2u}{dr^2} = u$
as $p \rightarrow 0$: $\frac{d^2u}{dr^2} = \frac{l(l+1)}{r^2} u$

3d-
Laplacian
problems will
→ use
separated
angular:
radial:
or
The a
The

Then re-write $u = p^{l+1} e^{-p} v(p)$ and try to find $v(p)$.
 $\frac{du}{dp} = (l+1)p^l e^{-p} v - p^{l+1} e^{-p} v' + p^{l+1} e^{-p} \frac{dv}{dp} = p^l e^{-p} [(l+1)v + p \frac{dv}{dp}]$
 $\frac{d^2u}{dp^2} = \dots = p^{l-1} e^{-p} \left\{ [-2l-2+p + \frac{l(l+1)}{p}] v + 2(l+1-p) \frac{dv}{dp} + p \frac{d^2v}{dp^2} \right\}$
should equal $= \left[1 - \frac{p_0}{p} + \frac{l(l+1)}{p^2} \right] p^l e^{-p} v$.

Then
 $p \frac{d^2v}{dp^2} + 2(l+1-p) \frac{dv}{dp} + [p_0 - 2(l+1)] v = 0$

... and somehow $v(p)$ should be nicely behaved at $p \rightarrow 0, p \rightarrow \infty$.
Try power series solution:
 $v(p) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j p^j$
 $\frac{dv}{dp} = \sum_{j=0}^{\infty} j a_j p^{j-1} \rightarrow \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) a_{j+1} p^j$
 $\frac{d^2v}{dp^2} = \sum_{j=0}^{\infty} j(j-1) a_j p^{j-2} \rightarrow \sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} p^{j-1}$ (then mult. it by p)

Get:
 $\sum_{j=0}^{\infty} j(j+1) a_{j+1} p^j + 2(l+1) \sum_{j=0}^{\infty} (j+1) a_{j+1} p^j - 2 \sum_{j=0}^{\infty} j a_j p^j + [p_0 - 2(l+1)] \sum_{j=0}^{\infty} a_j p^j = 0$
 $\sum_{j=0}^{\infty} \left\{ [j(j+1) + 2(l+1)(j+1)] a_{j+1} + [-2j + p_0 - 2(l+1)] a_j \right\} p^j = 0$

$\Rightarrow a_{j+1} = \frac{2(j+l+1) - p_0}{(j+1)(j+2l+2)} a_j$ recursion relation.

series needs to terminate, which requires $2(j+l+1) = p_0$ for some $j = j_{max}$.
which is good because this determines the energy!
letting $j_{max} + l + 1 = n$, $p_0 = 2n = \frac{2me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 k}$ which determines the energy!
 $\Rightarrow \hbar k = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar^2 n} \rightarrow E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{1}{2n^2} \left(\frac{me^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar} \right)^2$

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [3]

Nel caso dell'atomo di idrogeno la risoluzione dell'equazione (differenziale alle derivate parziali) di Schroedinger richiede alcune pagine di calcoli quanto-meccanici...

3d- problem
 let $\psi = R(r)Y(\theta, \phi)$
 Laplace's problems will be separated

Radial Equation. -- depends on the potential $V(r)$
 let $u = rR$
 then $\frac{d^2 u}{dr^2} + [k^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r)] u = 0$

Hydrogen...
 $E_n = -\frac{E_1}{n^2}$
 $E_1 = \frac{me^2}{4\pi\epsilon_0\hbar^2} \frac{1}{2m} = 13.6 \text{ eV}$
 length scale: $\frac{1}{k} = n \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = na_0 = n \times \text{Bohr radius}$
 $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2} = 0.529 \text{ \AA}$
 Ground state: $n=1, l=m=0$
 $\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}$ using $Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$

Hydrogen atom:
 Look at the first excited states $n=2$ and $l=0, m=0$ or $l=1, m=0, \pm 1$.
 $R_{20}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a_0} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-r/2a_0}$ ($l=0$) is nonzero at origin.
 $R_{21}(r) = \frac{1}{\sqrt{2}a_0} \left(\frac{r}{a_0}\right) e^{-r/2a_0}$ ($l=1$) is zero at origin.
 can multiply either Y_0^0 or $Y_1^{\pm 1}$ for different angular momentum states (l, m).

Spectrum: lines determined by spacing between the energy levels.
 At this level of approximation, only principle quantum number n matters.
 $\Delta E = h\nu = E_f - E_i = \frac{-13.6 \text{ eV}}{n_f^2} - \frac{-13.6 \text{ eV}}{n_i^2} = 13.6 \text{ eV} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right)$
 corresponds to either absorption ($\Delta E > 0$) or emission ($\Delta E < 0$) of photon.
 wavelength $\lambda = \frac{c}{\nu}$, $\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{\Delta E/h}{c} = \frac{13.6 \text{ eV}}{hc} \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2}\right)$
 $R = \text{Rydberg constant} = 1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$
 Hydrogenic atoms: $Z > 1$
 here, potential $\propto \frac{-Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$
 change $e^2 \rightarrow Ze^2$ in all formulas, i.e. $E_n = \frac{-E_1^*}{n^2}$, $E_1^* = Z^2 E_1$

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [4]

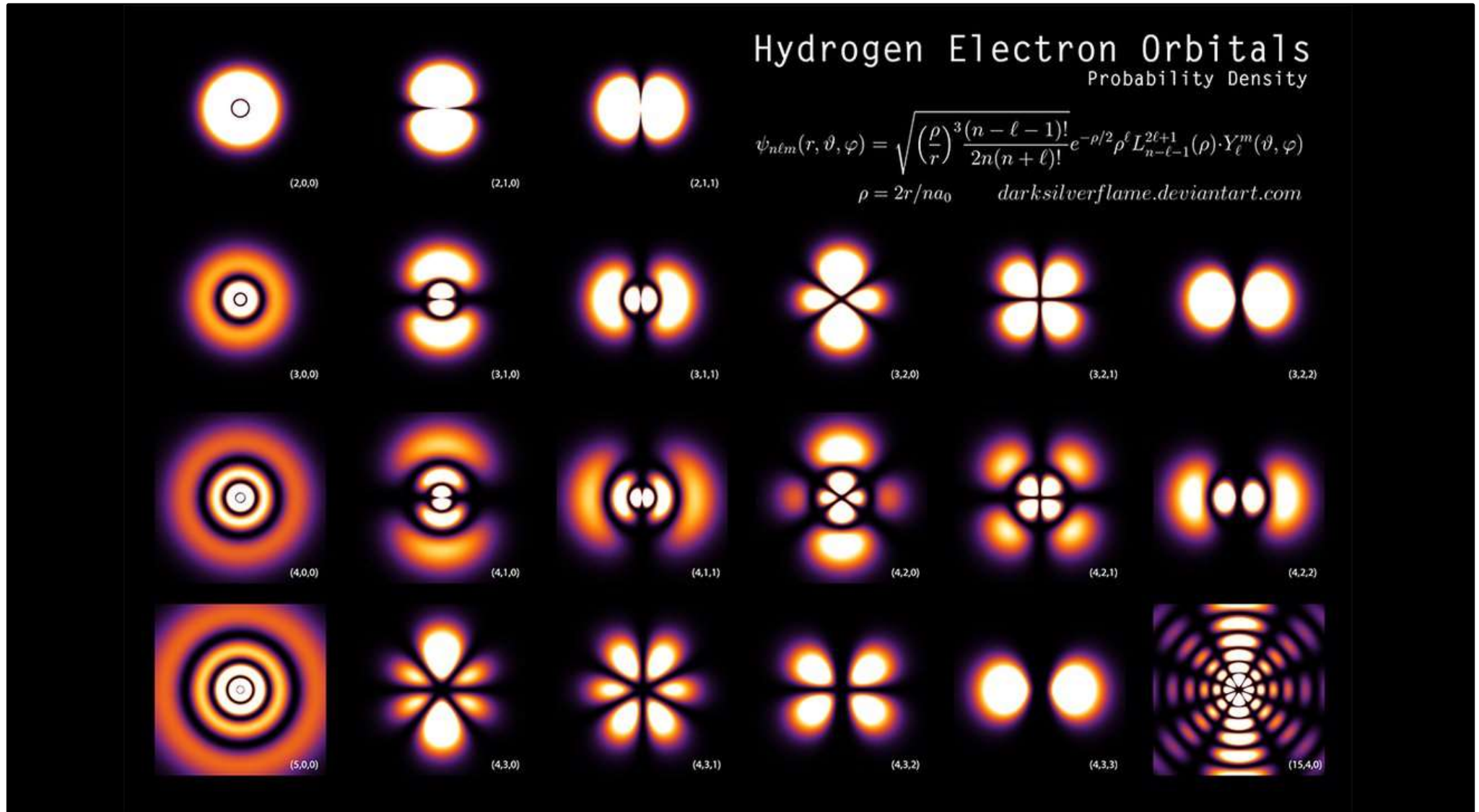
Le funzioni d'onda $\psi(r, \theta, \varphi)$ sono esprimibili analiticamente...

$n = 1,$	$l = 0,$	$m = 0$	$\psi_{100} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} e^{-\sigma}$
$n = 2,$	$l = 0,$	$m = 0$	$\psi_{200} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (2 - \sigma)e^{-\sigma/2}$
	$l = 1,$	$m = 0$	$\psi_{210} = \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \cos \theta$
	$l = 1,$	$m = \pm 1$	$\psi_{21\pm 1} = \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma e^{-\sigma/2} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
$n = 3,$	$l = 0,$	$m = 0$	$\psi_{300} = \frac{1}{81\sqrt{3\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (27 - 18\sigma + 2\sigma^2)e^{-\sigma/3}$
	$l = 1,$	$m = 0$	$\psi_{310} = \frac{1}{81} \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6\sigma - \sigma^2)e^{-\sigma/3} \cos \theta$
	$l = 1,$	$m = \pm 1$	$\psi_{31\pm 1} = \frac{1}{81\sqrt{\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} (6\sigma - \sigma^2)e^{-\sigma/3} \sin \theta e^{\pm i\phi}$
	$l = 2,$	$m = 0$	$\psi_{320} = \frac{1}{81\sqrt{6\pi}} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{3/2} \sigma^2 e^{-\sigma/3} (3 \cos^2 \theta - 1)$

Le funzioni d'onda contengono l'informazione sulla probabilità di trovare l'elettrone in un determinato volume infinitesimo di spazio all'interno del campo di forza del nucleo. E non solo...

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [5]

Gli orbitali atomici sono la rappresentazione grafica nello spazio 3D delle funzioni d'onda...



... la meccanica quantistica ha permesso di comprendere la struttura fondamentale della materia!

Prologo: l'importanza del linguaggio matematico [6]

... e non solo!



Prologo: sul concetto di funzione d'onda [1]


La funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ caratterizza lo stato di una particella quantistica (eventualmente sottoposta all'azione di un campo elettrico) in termini di possibili energie e posizioni...

Le possibili energie assunte dalla particella (quando si trova nello stato $\Psi(\mathbf{r}, t)$) sono ottenibili dalla risoluzione dell'equazione di Schroedinger...

$$\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + U \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

equazione di Schrödinger...

Le possibili posizioni della particella (quando si trova nello stato $\Psi(\mathbf{r}, t)$) sono ottenibili in termini di densità di probabilità (interpretazione di Born)...


$$\Psi(x, y, z, t)$$

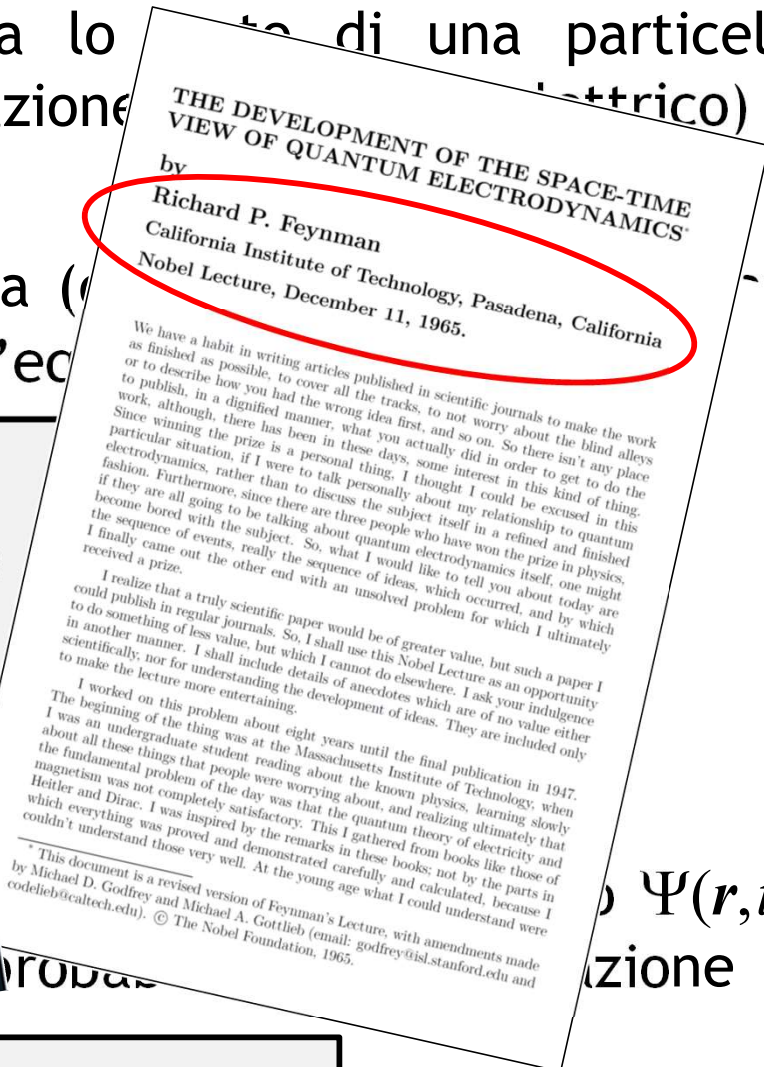
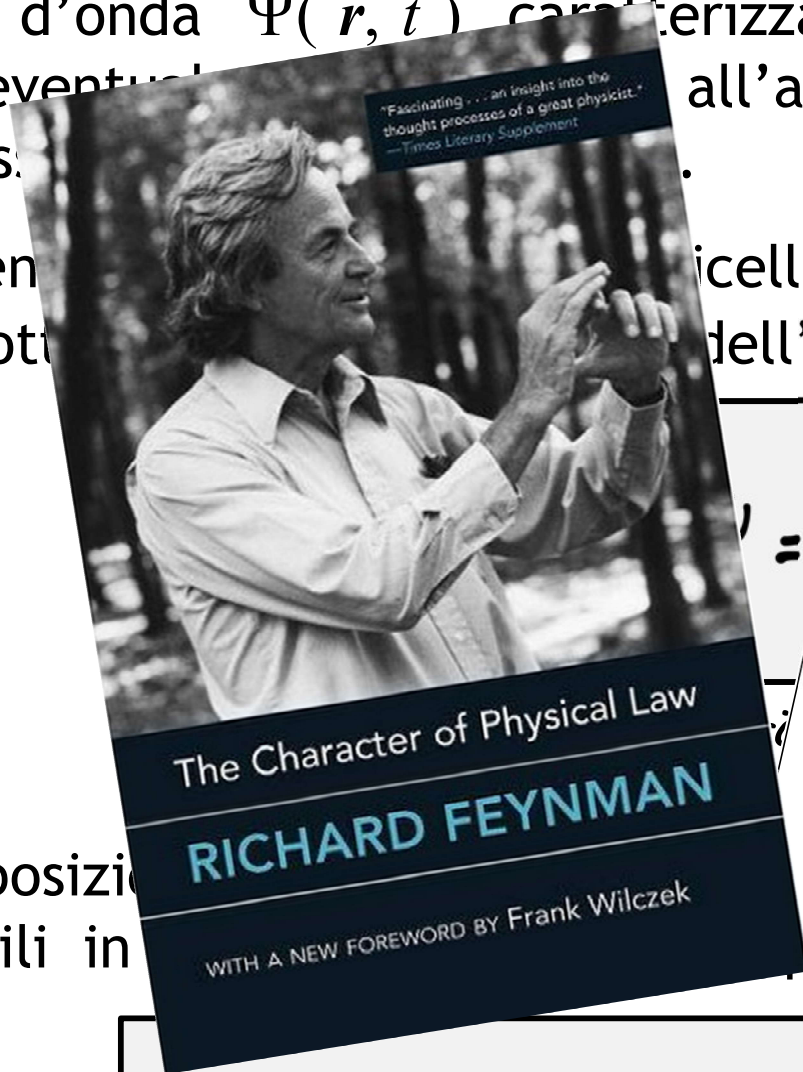
funzione d'onda...

Prologo: sul concetto di funzione d'onda [1]

La funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ caratterizza lo stato di una particella quantistica (eventualmente all'azione elettromagnetica) in termini di posizione e momento.

Le possibili energie e momenti di una particella (e della sua funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$) sono ottenibili dalla soluzione dell'equazione di Schrödinger.

Le possibili posizioni e momenti di una particella (e della sua funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$) sono ottenibili in termini di probabilità (Born)...



$$\Psi(x, y, z, t)$$

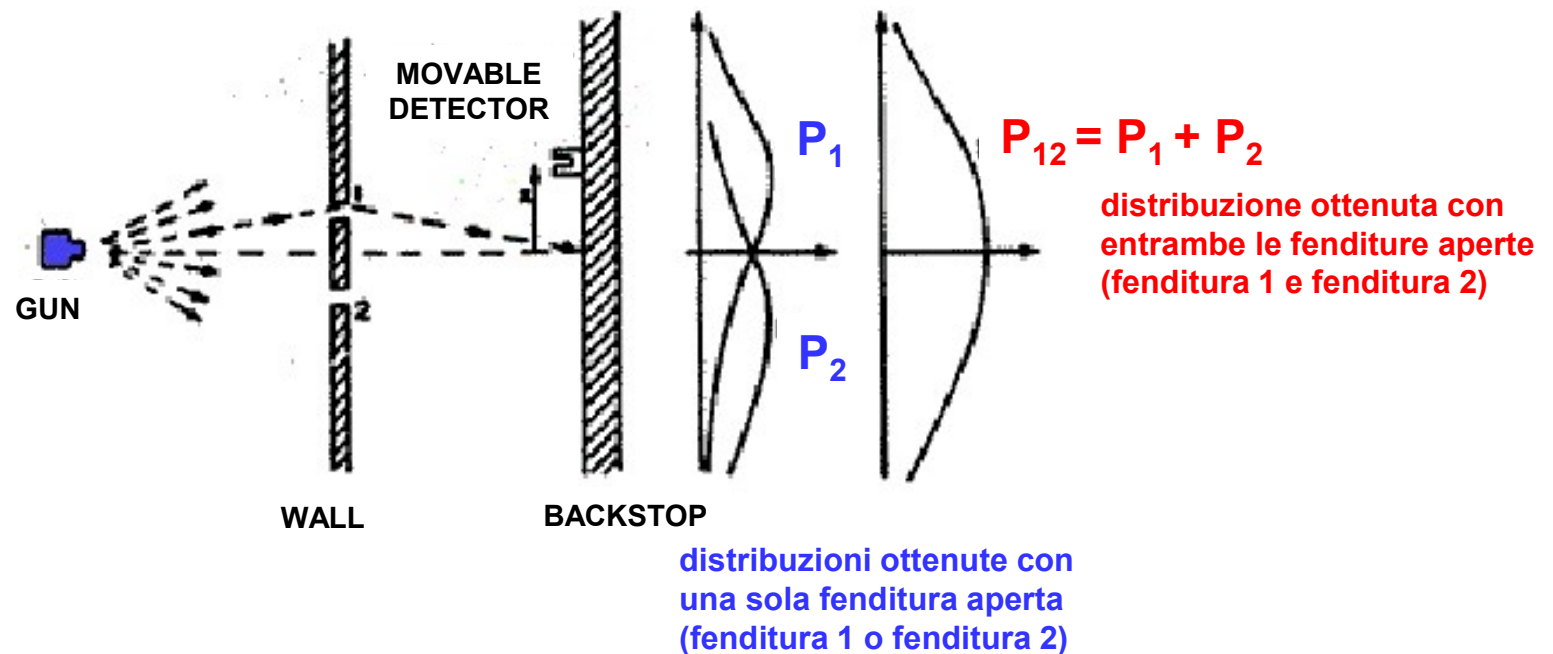
funzione d'onda...

Prologo: sul concetto di funzione d'onda [2]

Particelle macroscopiche classiche attraverso due fenditure:

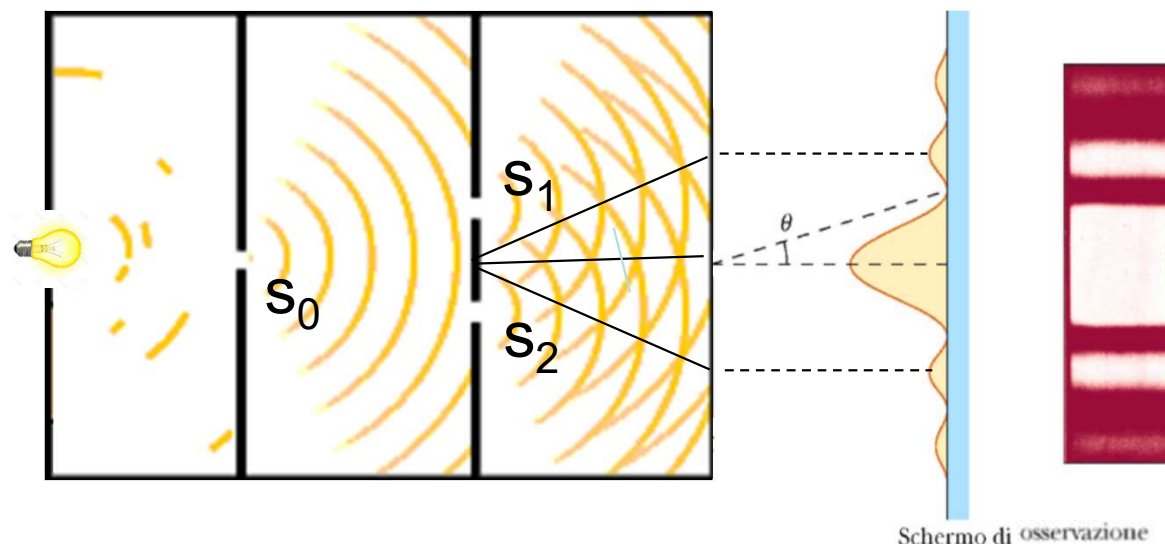


La probabilità di passaggio attraverso due fenditure è eguale alla somma delle probabilità di passaggio attraverso ciascuna delle due.

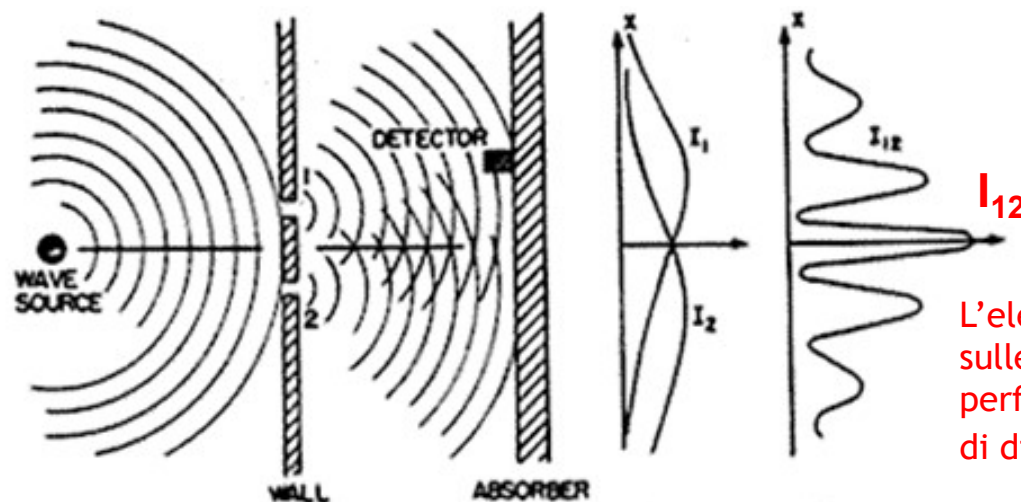


Prologo: sul concetto di funzione d'onda [3]

Onde classiche attraverso due fenditure:

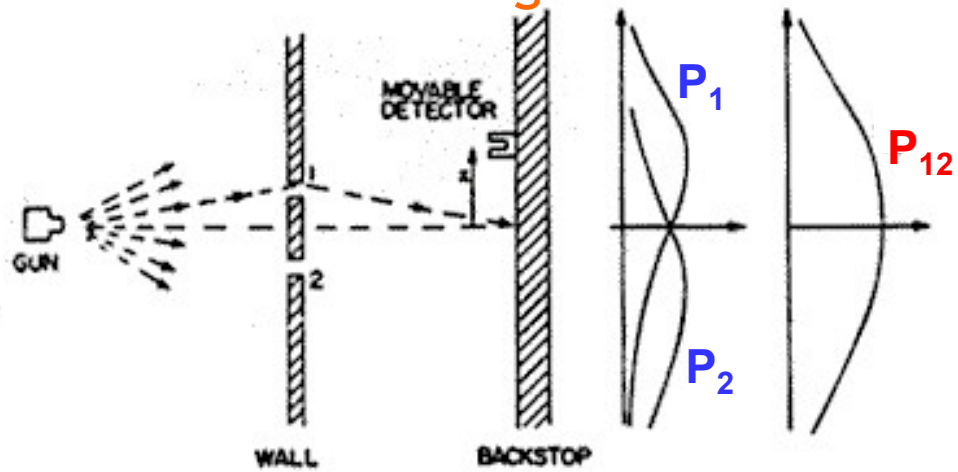


Fronti d'onda generati da sorgenti coerenti che si sovrappongono in un punto dello spazio generano il fenomeno dell'interferenza. Se le fenditure sono sufficientemente strette ($d \sim \lambda$) la figura di interferenza generata è modulata dalla figura di diffrazione.

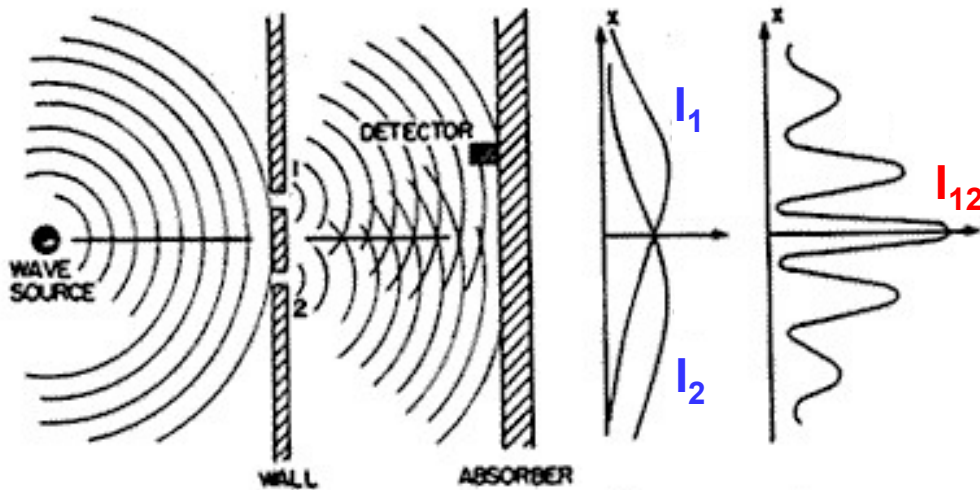


L'elettrodinamica classica basata sulle equazioni di Maxwell rende perfettamente conto della figura di diffrazione $I_{12}(\theta)$ osservata...

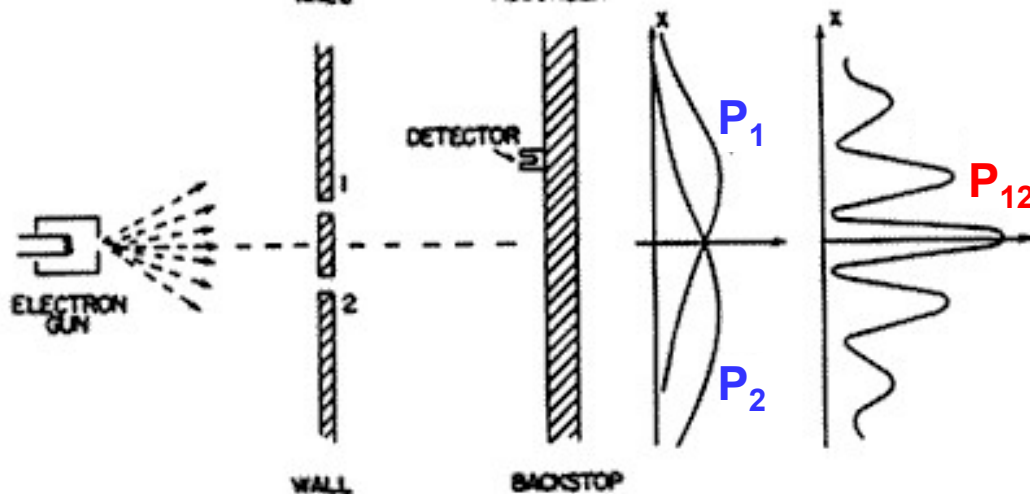
Prologo: sul concetto di funzione d'onda [4]



Particelle macroscopiche
attraverso due fenditure
particelle *classiche* (proiettili):
distribuzione macroscopica

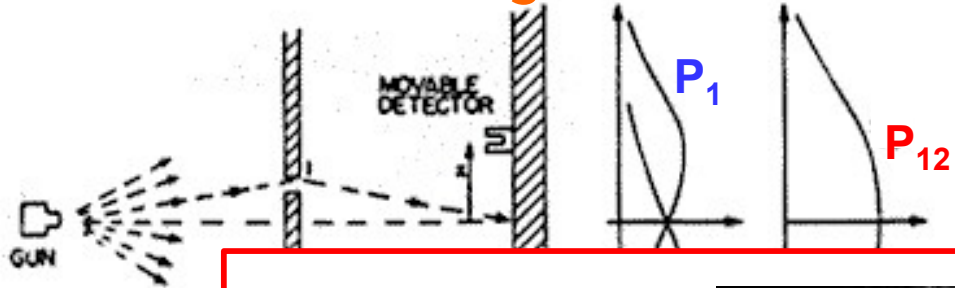


Esperimento di Young (classico)
onde (luce):
figura di diffrazione classica



Esperimento di Young (quantistico)
particelle quantistiche
(elettroni):
figura di diffrazione classica
(in analogia con la luce!)

Prologo: sul concetto di funzione d'onda [4]



Particelle macroscopiche
attraverso due fenditure

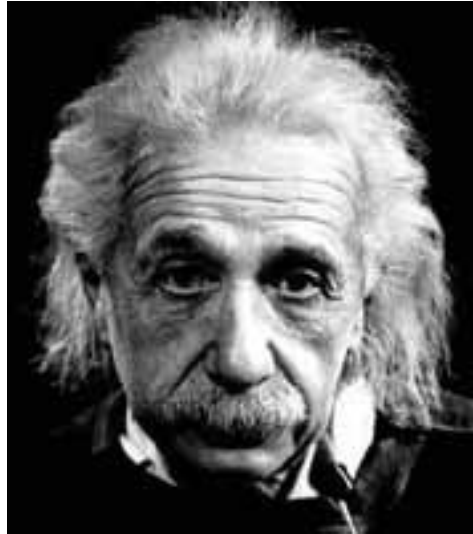
particelle classiche (proiettili):

ica

classico)

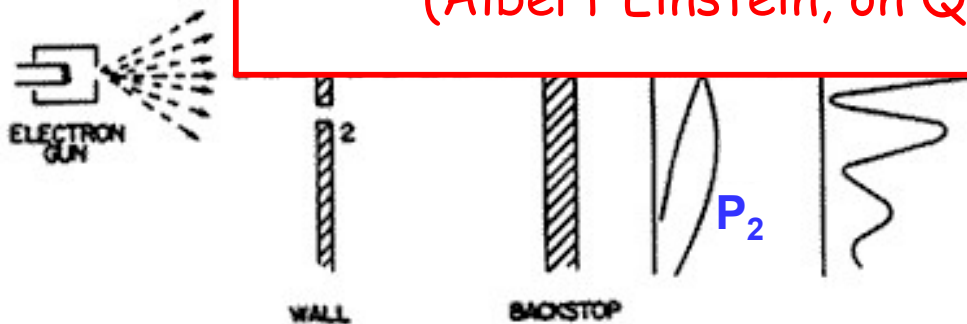
sica

quantistico)



Gli esperimenti di interferenza fatti con fasci di
elettroni hanno provato brillantemente che le particelle
si comportano come onde

(Albert Einstein, on Quantum Theory, 1954)

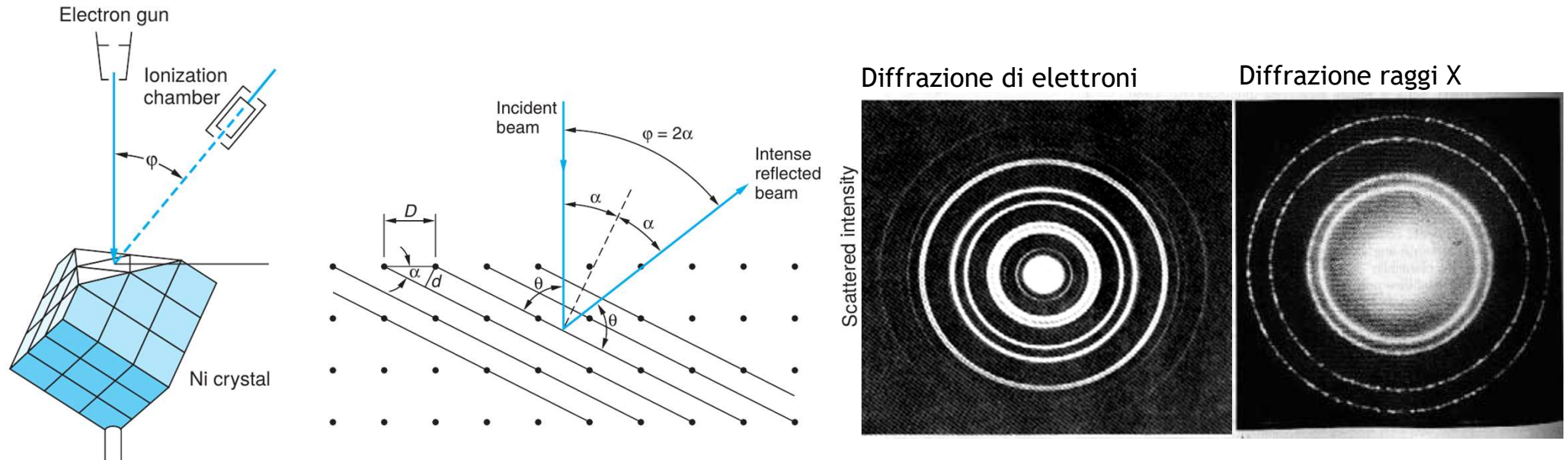


(elettroni):

figura di diffrazione classica
(in analogia con la luce!)

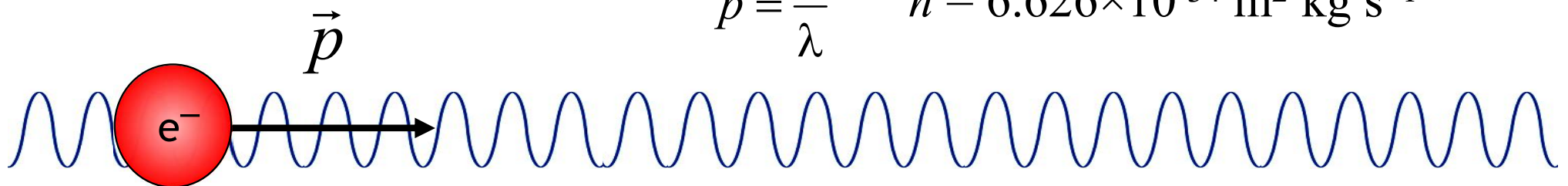
Prologo: sul concetto di funzione d'onda [5]

Nel 1927, l'esperimento di *Davisson e Germer* verifica sperimentalmente l'ipotesi di De Broglie: inviando su un cristallo un fascio di raggi X ed un fascio di elettroni con lunghezze d'onda dello stesso ordine di grandezza, si hanno figure di diffrazione molto simili.



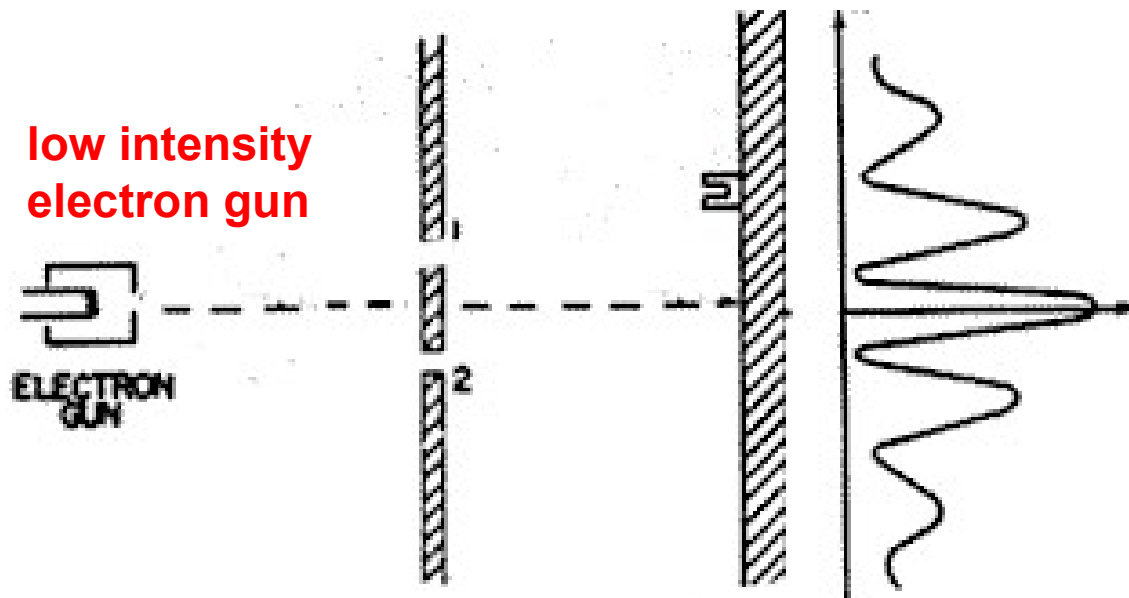
L'interpretazione della figura di diffrazione osservata con gli elettroni viene eseguita sulla base della relazione di De Broglie:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad h = 6.626 \times 10^{-34} \text{ m}^2 \text{ kg s}^{-1}$$



Prologo: sul concetto di funzione d'onda [6]

Nell'esperimento di Young quantistico dunque un fascio di elettroni può dare origine ad una figura di diffrazione... ma il risultato più sorprendente è che la figura di diffrazione può essere ottenuta anche con un esperimento a singolo elettrone...!

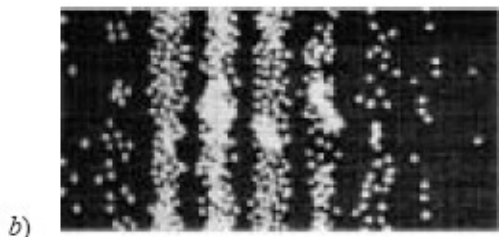
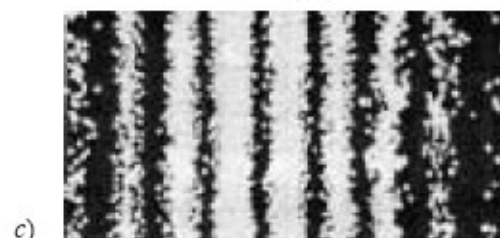


Un singolo elettrone inviato su due fenditure è rivelato con maggiore probabilità la dove la teoria della diffrazione prevede la presenza di frange di massima intensità.

La collezione dei singoli eventi porta ad una distribuzione di posizioni interpretabile in termini di figura di diffrazione.

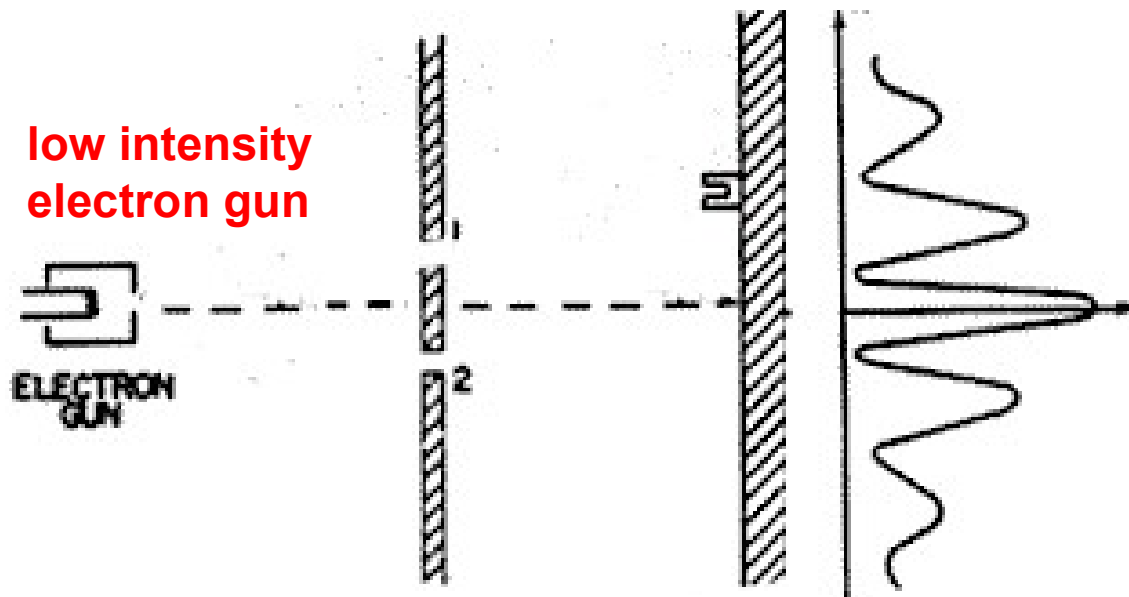
Nelle figure a,b,c, gli elettroni riempiono progressivamente, man mano che vengono rivelati, gli spazi corrispondenti alla massima probabilità prevista dalla teoria ondulatoria della diffrazione.

NOTA: Gli spot puntuali registrati per i singoli eventi sono la conferma che la figura di diffrazione è il risultato di un processo che coinvolge singoli elettroni.



Prologo: sul concetto di funzione d'onda [7]

Nell'esperimento di Young quantistico dunque un fascio di elettroni può dare origine ad una figura di diffrazione... ma il risultato più sorprendente è che la figura di diffrazione può essere ottenuta anche con un esperimento a singolo elettrone...!



Un singolo elettrone inviato su due fenditure è rivelato con maggiore probabilità la dove la teoria della diffrazione prevede la presenza di frange di massima intensità.

La collezione dei singoli eventi porta ad una distribuzione di posizioni interpretabile in termini di figura di diffrazione.

Il risultato induce a ritenere che al *singolo* elettrone deve essere associata una funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ che caratterizzi completamente la probabilità di trovare l'elettrone stesso in una certa posizione dello spazio \mathbf{r} all'istante t . Quella osservata è la figura di diffrazione della funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$.

Si noti che, attraverso l'equazione di Schroedinger, la stessa funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ caratterizza lo stato di un sistema anche in termini di energia.

Prologo: sul concetto di funzione d'onda [8]

L'ipotesi di De Broglie che associa proprietà ondulatorie alle particelle quantistiche (vi ricordo che la relazione di de Broglie prevede che l'impulso di una particella quantistica vale $p=h/\lambda$ con h costante di Plank e λ lunghezza d'onda dell'onda associata alla particella stessa) suggerisce l'idea che esse possano essere descritte attraverso l'introduzione di una funzione d'onda o funzione di stato Ψ .

Questa idea può considerarsi come il concetto fondamentale che sta alla base della formulazione di Schroedinger della meccanica quantistica. L'ampiezza di tale funzione d'onda utilizzata per descrivere una particella (o più in generale un sistema) di tipo quantistico è funzione della posizione della particella stessa (vettore \mathbf{r}) e del tempo t . Questa funzione è comparsa per la prima volta nella letteratura scientifica in un articolo di Schroedinger del 1926 relativo alla quantizzazione dei livelli energetici dell'atomo di idrogeno..

Ammessa come possibile la descrizione di un sistema quantistico attraverso una funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ un modo semplice per arrivare al significato intuitivo di tale funzione è quello di pensare ad un esperimento di diffrazione di elettroni. Come noto, eseguendo in modo opportuno un esperimento di diffrazione di Young con un fascio a molti elettroni si può osservare la tipica figura di diffrazione che si può vedere anche eseguendo analoghi esperimenti di diffrazione con le onde (luce visibile o X). Quello che però è fondamentale capire è che lavorando con gli elettroni è possibile ottenere fasci di elettroni a bassa intensità in modo tale da poter concepire esperimenti di diffrazione a singolo elettrone ... e che tali esperimenti a singolo elettrone evidenziano ancora figure di diffrazione.

Mi spiego meglio... è stato dimostrato sperimentalmente che le tipiche figure di diffrazione sono osservabili anche in esperimenti a molti elettroni in cui però gli elettroni, tutti nelle medesime condizioni iniziali, vengono inviati separatamente sul reticolo diffrangente (fenditure di Young) e raccolti uno alla volta dallo schermo rivelatore. Questo risultato costringe a ritenere che un singolo elettrone, in un esperimento di Young quantistico, debba necessariamente interferire con se stesso generando diffrazione. Il che ovviamente implica il dover necessariamente associare al singolo elettrone la sua funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$. In particolare è la figura di diffrazione della funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ associata al singolo elettrone che porta il singolo elettrone stesso ad essere rivelato nello schermo con maggiore probabilità la dove la teoria dell'interferenza prevede dei massimi di intensità (frange).

Se questo è vero la funzione d'onda deve caratterizzare, in termini di probabilità, la posizione della particella stessa. In particolare secondo l'interpretazione di Max Born il modulo quadrato della funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ è la densità di probabilità di trovare la particella singola in una determinata posizione \mathbf{r} dello spazio, nell'istante t . Ricordando poi che la stessa funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ permette, tramite l'equazione di Schroedinger, di caratterizzare lo stato della particella anche in termini di energia, si evince come nella funzione d'onda $\Psi(\mathbf{r}, t)$ debbano essere contenute tutte le informazioni, in termini di posizione e di energia, per caratterizzare in modo completo lo stato di un a particella quantistica.

Per entrare nei termini della questione vi propongo alcune slides introduttive molto qualitative. Il percorso concettuale è quello proposto da Feynmann nel suo libro "La legge fisica"...