EQUAZIONE di SCHRÖDINGER

Consideriamo una particella di massa m che si muove in $\mathbb{R}^3$.
Il suo stato è descritto da una funzione d'onda NORMALIZZATA $\psi(\bar{x},t)$ che soddisfa l'eq. di Schrödinger (in presenza di un campo di forze)

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

Calcoliamo la variazione nel tempo della probabilità di trovare la particella in una regione Σ

$$P_\Sigma(t) = \int_\Sigma d^3x\, |\psi(\bar x,t)|^2$$

$$\frac{d}{dt}P_\Sigma(t) = \frac{d}{dt}\int_\Sigma d^3x\,\psi^*(\bar x,t)\,\psi(\bar x,t) = \int_\Sigma d^3x\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\cdot\psi + \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}\right) =$$

usiamo eq. di Schrödinger →

$$\frac{\partial\psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi$$

V è a valori REALI

$$\frac{\partial\psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi^*$$

$$= \int_\Sigma d^3x\left[-\frac{1}{i\hbar}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + \cancel{V\psi^*}\right)\psi + \frac{1}{i\hbar}\psi^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + \cancel{V\psi}\right)\right]$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_\Sigma d^3x\left\{\underbrace{\nabla^2\psi^*\cdot\psi}_{\nabla\cdot[(\nabla\psi^*)\cdot\psi] - \cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi}} - \underbrace{\psi^*\nabla^2\psi}_{\nabla\cdot[\psi^*\nabla\psi] - \cancel{\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi}}\right\}$$

$$= -\frac{i\hbar}{2m}\int_\Sigma d^3x\,\nabla\cdot\left[(\nabla\psi^*)\psi - \psi^*\nabla\psi\right]$$

$$\hat{\bar p} = \frac{\hbar}{i}\bar\nabla$$

Definisco: $\bar J(\bar x,t) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*\right] = \frac{1}{2m}\left[\psi^*(\hat{\bar p}\psi) + \psi(\hat{\bar p}\psi)^*\right]$

$$\frac{d}{dt} P_\Sigma(t) \overset{!}{=} -\int_\Sigma d^3x \, \overline{\nabla} \cdot \overline{J}(\overline{x},t) = -\int_{\partial\Sigma} d\Sigma \, \overline{n} \cdot \overline{J}$$

flusso del vettore $\overline{J}$ attraverso la superficie $\partial\Sigma$

↘ EQ. di CONTINUITA'

$\overline{J}$ viene interpretato come CORRENTE di PROBABILITA' (*)

L'eq. di continuità dice che la probabilità che esce attraverso la superficie $\partial\Sigma$ è uguale alla diminuzione della probab. di trovare la particella in Σ. ("Probab. si conserva")

(*) Interpretazione $\overline{J}$

$$\int d^3x \, \overline{J}(\overline{x},t) = \frac{1}{2m}\int \left(\psi^*(\hat{\overline{P}}\psi) + \psi(\hat{\overline{P}}\psi)^*\right) =$$

$$\overset{!}{=} \frac{1}{2m}\left[(\psi, \hat{\overline{P}}\psi) + (\hat{\overline{P}}\psi, \psi)\right] =$$

$\hat{\overline{P}}$ è autoaggiunto

$$\overset{!}{=} \frac{1}{m}(\psi, \hat{\overline{P}}\psi) = \left\langle \frac{\overline{P}}{m} \right\rangle = \langle \overline{v} \rangle$$

valor medio della velocità della particella.

Eq. di Sch. e Hamiltoniana

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\overline{x},t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\overline{x})\right)\Psi(\overline{x},t)$$

Cerchiamo soluzioni del tipo $\Psi(\overline{x},t) = \psi(\overline{x})\,\varphi(t)$

$$\rightarrow \quad i\hbar\,\psi(\overline{x})\,\dot{\varphi}(t) = \varphi(t)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi(\overline{x})$$

$$\rightarrow \quad i\hbar \underbrace{\frac{\dot\varphi(t)}{\varphi(t)}}_{\text{Non dipende da } \bar{x}} = \underbrace{\frac{1}{\psi(\bar{x})}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi(\bar{x})}_{\text{Non dipende da } t}$$

$\rightarrow$ se LHS e RHS non dip. da $\bar{x}$ e da t, cioè sono uguali a una cost. E

Abbiamo così separato le variabili

$$\begin{cases} \dot\varphi = -\frac{iE}{\hbar}\varphi & \rightarrow \quad \varphi(t) = e^{-iEt/\hbar} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right)\psi = E\psi & \rightarrow \quad \hat{H}\psi = E\psi \end{cases}$$

$\rightsquigarrow$ Equazione agli autovalori per l'operatore H

$\Downarrow$

Le soluz. sono AUTOFUNZIONI dell'op. $\hat{H}$.

Risolvere l'eq. di Schrödinger si riduce a trovare autovalori e autofunzioni dell'op. $\hat{H}$.

Soluz. generale è comb. lin. di soluz. partic. :

$$\Psi(\bar{x},t) = \sum_E a_E\, \psi_E(\bar{x})\, e^{-iEt/\hbar} \qquad \text{dove } \hat{H}\psi_E = E\psi_E$$

$\uparrow$

È una somma se $\hat{H}$ ha uno spettro discreto, mentre è un integrale se $\hat{H}$ ha uno spettro continuo.

Le soluz. particolari $\psi_E(\bar{x})\, e^{-iEt/\hbar}$ (sono autofunz. di $\hat{H}$) sono t.c. $|\cdot|$ cancella la dip. dal tempo $\rightsquigarrow$ lo stato del sist. rimane invariato con l'avanzare del tempo.

In particolare lo stato rimane autofunz. di $\hat{H}$ con autov. E.

Eq. di Sch. per sistemi unidimensionali.

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

$\downarrow$ separando variabili $\Psi(x,t) = \varphi(t)\,\psi(x)$

$$\varphi(t) = e^{-iEt/\hbar}$$

$\psi(x)$ è soluz. di $\hat{H}\psi = E\psi$ dove $\hat{H} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V\right)$

$$\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar}\left(V(x) - E\right)\psi(x)$$

Eq. diff. lineare del 2° ordine
$\downarrow$
soluzioni si scrivono come comb. lin. (a coeff. complessi) di due soluz. particolari indip.

eq. a coeff. reali
$\Downarrow$
Se ψ è soluz. anche ψ^* è soluz.

1) ψ, ψ^*
2) ψ_1, ψ_2 reali

Osservazione: se $V(x)$ è limitato inferiormente ($V(x) \geq V_0 \ \forall x$)

allora

$$\langle H \rangle_\psi = \left\langle \frac{\hat{P}^2}{2m} \right\rangle + \langle V(\hat{X}) \rangle = \frac{1}{2m}(\psi, \hat{P}^2\psi) + (\psi, V(\hat{X})\psi)$$

(ψ normalizzato)

$$= \frac{1}{2m}(\hat{P}\psi, \hat{P}\psi) + \int dx\, V(x)\,|\psi(x)|^2 =$$

$$= \underbrace{\frac{1}{2m}\|\hat{P}\psi\|^2}_{>0} + \int dx\, \underbrace{(V(x) - V_0)}_{\geq 0}\underbrace{|\psi(x)|^2}_{\geq 0} + V_0 \underbrace{\int dx\, |\psi(x)|^2}_{=1}$$

$> V_0 \implies$ Spettro dell'energia ($\hat{H}$) è contenuto nel semiasse $]V_0, +\infty[$

$\forall \psi$, e in particolare per ψ_E e in questo caso

$\langle H \rangle_{\psi_E} = (\psi_E, \hat{H}\psi_E)$
$= (\psi_E, E\psi_E) =$
$= E$

PARTICELLA LIBERA

$$H = \frac{p^2}{2m} \rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}$$

cerchiamo autofunzioni di $\hat{p}^2$

↳ usiamo il fatto che autofunzioni di $\hat{p}$ sono anche autof. di $\hat{p}^2$

$$\left(\hat{p}\psi_p = p\psi_p \qquad \hat{p}^2\psi_p = \hat{p}(p\psi_p) = p^2\psi_p \right)$$

Le onde piane sono AUTOFUNZ. di $\hat{p} = -i\hbar\frac{d}{dx}$

$$\hat{p}\, e^{ipx/\hbar} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ipx/\hbar} = p\, e^{ipx/\hbar}$$

$$\hat{H}\, e^{ipx/\hbar} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\equiv E} e^{ipx/\hbar}$$

⇝ spettro di $\hat{H}$ è $[0, +\infty[$

Dato un autovalore E, ho due p che me lo realizzano, cioè $p = \pm\sqrt{2mE}$ ⇝ 2 autofunzioni indip. $e^{\pm ipx/\hbar}$

[Queste autofunzioni non sono funz. $L^2(\mathbb{R})$, e questo ci tipo di osservabili a SPETTRO CONTINUO]

Soluz. generale

$$\psi(x,t) = \text{"}\sum_{E\geq 0}\text{"} \left(a_E^{(1)} \underset{p=\sqrt{2mE}}{\psi_E^{(1)}(x)}\, e^{-iEt/\hbar} + a_E^{(2)} \underset{p=-\sqrt{2mE}}{\psi_E^{(2)}(x)}\, e^{-iEt/\hbar} \right)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp\, \tilde{\psi}(p)\, e^{ipx/\hbar}\, e^{-ip^2t/2m\hbar}$$

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} \rightsquigarrow \text{Eq. Sch.} \quad \psi'' = -\frac{2mE}{\hbar^2}\psi$$

$E \geq 0 \longrightarrow$ eq. diff. "dell' osc. armonico"

$\rightsquigarrow$ soluz. $\psi_E(x) = C_+ e^{ipx/\hbar} + C_- e^{-ipx/\hbar}$ $\quad C_\pm \in \mathbb{C}$

$p = \sqrt{2mE}$

è una distrib. temperata, accettabile per ricostruire una funz. L^2 attraverso comb. lineari.

$E < 0 \longrightarrow$ eq. "repulsore armonico"

soluz. $\psi_E(x) = C_+ e^{-\sqrt{2m|E|}\,x/\hbar} + C_- e^{\sqrt{2m|E|}\,x/\hbar}$

NON è una soluz. ACCETTABILE in quanto diverge a $\pm\infty$ più velocemente di ogni polinomio (cioè non è "polinomialm. limitata all'∞)

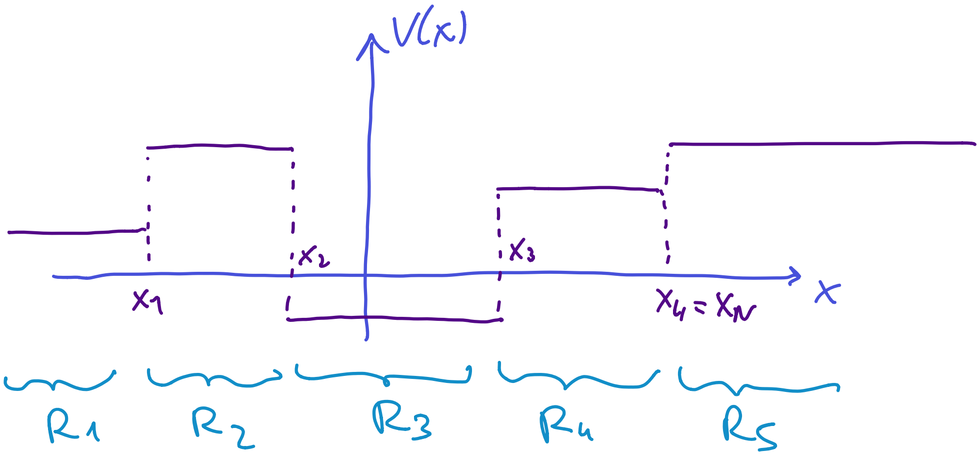
$\Downarrow$

Spettro è $E \in [0, +\infty[$

POTENZIALI A GRADINO

$V(x)$ è una funzione COSTANTE A TRATTI con un numero finito di discontinuità nei pti x_j $j=1,\dots,N$

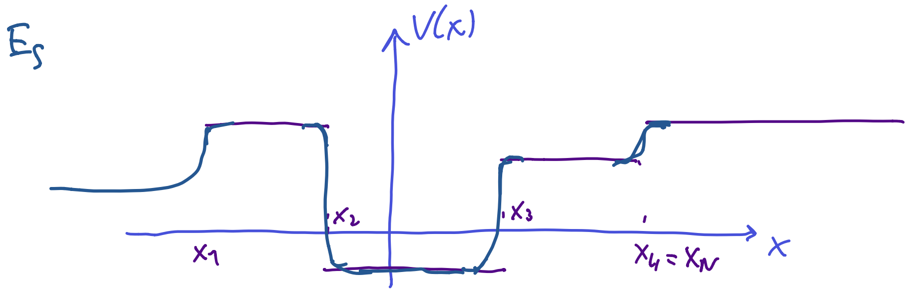
$$-\infty \equiv x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_{N+1} \equiv +\infty$$



$$R_j = \,]x_{j-1}, x_j[$$

$$V(x) = \begin{cases} V_1 & x \in R_1 \\ V_2 & x \in R_2 \\ \vdots & \\ V_{N+1} & x \in R_{N+1} \end{cases}$$

Un tale $V(x)$ è un caso limite di potenziali "realistici" def. da funz. continue, con variazioni molto rapide in intervalli molto piccoli e approx cost. altrove. Quando la lunghezza degli intervallini (in cui V varia) è molto più piccola delle grandezze in gioco nel problema, l'approx è buona.



<u>Prop.</u> La soluz. del probl. agli autovalori di $\hat{H}$ di una particella in un potenziale unidim. a gradini si possono trovare (tutte) tra le soluzioni (complesse) dell'eq. diff. associata, che siano CONTINUE e DERIVABILI con derivata continua su tutto l'asse reale, e POLINOMIALMENTE LIMITATE

"Dim" : una funzione che non sia di classe C^1 non può essere soluz. per due motivi:

1) non lo è nel senso delle funz. perché la sua derivata (2^a) non è def. ovunque

2) non lo è nel senso delle distrib. perché la sua derivata (2^a) conterrebbe termini proporzionali alla delta di Dirac, che non è cancellata da $V(x)$

$$\psi'' \propto (V(x) - E)$$

Per il potenziale a gradini l'eq. da risolvere sarà

$$\psi'' + (E - V(x)) \frac{2m}{\hbar^2} \psi(x) = 0$$

che nelle varie regioni R_j si riduce a

$$\psi'' + \underbrace{\frac{2m}{\hbar}(E - V_j)}_{\text{cost.}} \psi = 0 \qquad x \in R_j \qquad (*)$$

Ci interessano le soluz. nel senso delle distribuzioni temperate (da loro comb. lin. si ottengono delle vere e proprie funz. d'onda, cioè funz. $\in L^2(\mathbb{R})$).

[soluz. saranno rappresentate da funzioni (eq. diff. a coeff. cost.) C^1 su tutto il dominio e polinomialm. lim. all' ∞.]

Risolviamo l'eq. separatamente in ogni regione R_j dove V è cost.

$(*) \rightarrow$ soluz. $\psi_E^{(j)}(x) = c_j^+ e^{i p_j x/\hbar} + c_j^- e^{-i p_j x/\hbar}$

dove $p_j = \sqrt{2m(E - V_j)}$

Andamento oscillante per $p_j \in \mathbb{R}$ $(E \geq V_j)$

" esponenziale " $p_j \in i\mathbb{R}$ $(E < V_j)$

Soluzione generale di $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$ è

$$\psi_E(x) = \begin{cases} \psi_E^{(1)}(x) & x \in R_1 =]-\infty, x_1] & \leftarrow c_1^{\pm} \\ \psi_E^{(2)}(x) & x \in R_2 =]x_1, x_2] & \leftarrow c_2^{\pm} \\ \vdots & \vdots & \vdots \\ \psi_E^{(N+1)}(x) & x \in R_{N+1} & \leftarrow c_{N+1}^{\pm} \end{cases} \quad \Bigg\} \; 2(N+1) \text{ parametri}$$

tale che

1) sia di classe C^1 anche nei pti x_j $j = 1, \dots, N$

(ψ_E continua e ψ_E' continua) $\rightsquigarrow$ $2N$ condizioni

(solut. gen. di eq. diff. al 2° ord. dip. da $2N+2-2N = 2$ parametri)

2) siano polinomialm. limitate all'infinito ($\pm\infty$)

↳ potenzialmente questo da altre due condiz.