Eq. di Scrödinger & Hamiltoniana

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

eq. diff. lineare

Cerchiamo soluz. particolari del tipo

$$\Psi(\bar{x},t) = \psi(\bar{x})\,\varphi(t)$$

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

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

Sia LHS che RHS non dip. da $\bar{x}$ e t
cioè sono uguali a una costante
che chiamiamo E

Abbiamo così separato le variabili

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

Eq. agli autovalori per l'operatore $\hat{H}$
→ le soluzioni sono AUTOFUNZIONI
dell'operatore $\hat{H}$.

Risolvere l'eq. di Schöringer si riduce a trovare autovalori e autovett. di $\hat{H}$.

Soluzione generale dell'eq. di Sch. è combinaz. lin. delle soluz. particolari

$$\Psi(\bar{x},t) = \sum_{E \in \text{Spettro di } \hat{H}} a_E \, \psi_E(\bar{x}) \, e^{-iEt/\hbar}$$

dove $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$

"spettro di $\hat{A}$" = insieme degli autovalori di $\hat{A}$

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

$\hat{H}$ è a.a. $\rightarrow$ $\exists$ base di autovett. per $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^3)$ $\{\psi_E(\bar{x})\}_{E \in \text{spettro } \hat{H}}$

Preso lo stato al tempo $t=0$ $\Psi(\bar{x},0)$, esso è un vett. in $\mathcal{H}$ e quindi possiamo espanderlo nella base $\psi_E(\bar{x})$

$$\Psi(\bar{x},0) = \sum_E a_E \overbrace{\psi_E(\bar{x})}^{= \psi_E(\bar{x})e^{-iE\cdot 0/\hbar}}$$

Dato questo stato iniziale, qual è la soluz. al tempo t?

$$\Psi(\bar{x},t) = \sum_E a_E \, \psi_E(\bar{x}) \, e^{-iEt/\hbar}$$

Cosa succede se al tempo $t=0$

$$\Psi(\bar{x},0) = \psi_E(\bar{x}) \quad \text{per un qualche } E \,?$$

$$\Rightarrow \quad \Psi(\bar{x},t) = \psi_E(\bar{x})\, e^{-iEt/\hbar}$$

$\rightsquigarrow$ stesso stato che a $t=0$

Eq. di Sch. per sistemi unidimensionali

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

separiamo le variabili

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

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

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

Eq. diff. lin. del 2° ord.

$\Downarrow$

soluzioni si scrivono come comb. lin. di due soluz. part. indip.

eq. a coeff. reali

$\Downarrow$

se ψ è sol. anche ψ^* è sol.

1) ψ_1, ψ_2 reali

2) ψ, ψ^*

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

allora $\langle H \rangle_\psi = \langle \frac{P^2}{2m} \rangle_\psi + \langle V(x) \rangle_\psi =$

$\forall \psi$ (normalizzato)

$$= \frac{1}{2m}(\psi, \hat{P}^2\psi) + (\psi, V(\hat{X})\psi) =$$

$H = \frac{P^2}{2m} + V(x)$

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

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

$$> V_0$$

In particolare, se $\psi = \psi_E$ (autofunz. di $\hat{H}$ relativa ad autoval. E)
allora $\langle H \rangle_{\psi_E} = (\psi_E, \hat{H}\psi_E) = (\psi_E, E\psi_E) = E\,\|\psi_E\|^2 = E$

$$\Rightarrow \quad E > V_0 \qquad \forall E \text{ nello spettro di } \hat{H}$$

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

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

$\rightarrow$ usiamo il fatto che le autofunz. di $\hat{p}$ sono anche autofunz. di $\hat{p}^2$

$(\hat{p}\psi_p = p\psi_p \Rightarrow \hat{p}^2\psi_p = \hat{p}\,p\psi_p = p^2\psi_p)$

Le autofunzioni dell'op. $\hat{p}$ sono le ONDE PIANE

$$\hat{p}\, e^{ipx/\hbar} = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{ipx/\hbar} = -i\hbar\left(\frac{ip}{\hbar}\right) e^{ipx/\hbar} = p\, e^{ipx/\hbar}$$

(ogni funzione $\in L^2(\mathbb{R}) = \mathcal{H}$ può essere scritta come comb. lineare di onde piane (coeff. sono trasf. Fourier)
$\rightarrow$ autofunz. di $\hat{p}$ costituiscono una base (generalizzata) in $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R})$)

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

Dato un autovalore E, ho due p che lo realizzano

$p = \pm\sqrt{2mE}$ $\rightsquigarrow$ 2 autofunz. indip. relative a E:

$$e^{\pm i\sqrt{2mE}\, x/\hbar} \sim \psi_E(x)$$

[Qste autofunzioni non sono funzioni $L^2(\mathbb{R})$, e ciò è tipo delle osservabili a spettro continuo.]

→ Soluz. generale $\qquad E = p^2/2m$

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

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

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

$E \geq 0$ $\rightsquigarrow$ eq. diff dell'oscill. arm. →

→ soluz. $\quad \psi_E(x) = c_+ e^{ipx/\hbar} + c_- e^{-ipx/\hbar}$

$p = \sqrt{2mE} \qquad c_\pm \in \mathbb{C}$

è una DISTRIBUZIONE TEMPERATA

→ funz. di L^2 possono essere scritte come comb. lin. di tali distrib.

$E < 0$ $\rightsquigarrow$ eq. diff. del repulsore armonico

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

NON è una soluz. ACCETTABILE

(in particolare diverge a $x \to \pm\infty$ più velocemente di ogni polinomio $\Leftrightarrow$ non è polinomialm. limitata all'infinito)

$\hookrightarrow$ loro combinaz. lin. non sono L^2.

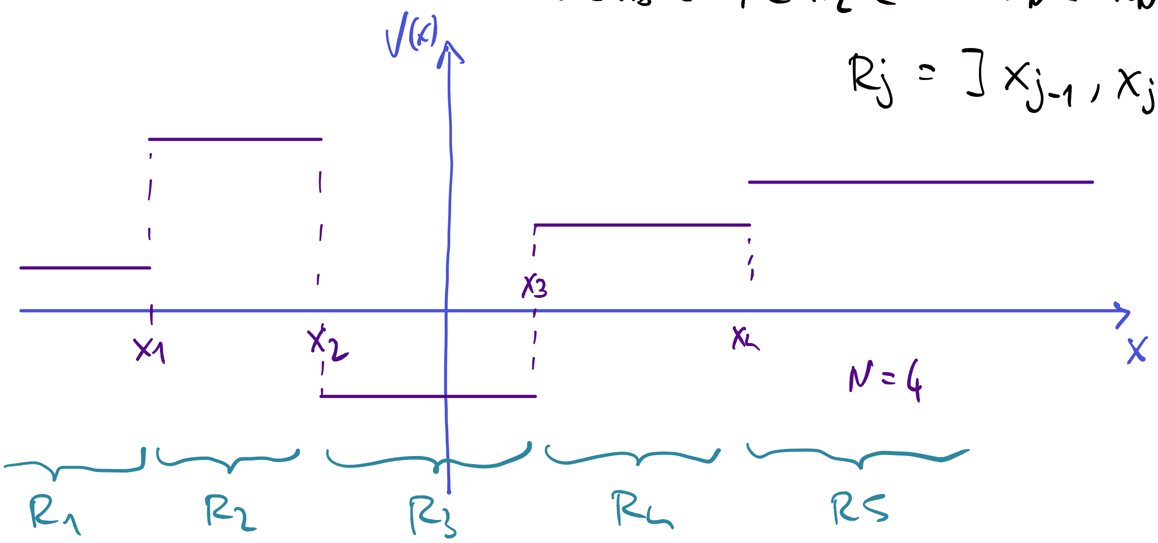
$\rightarrow$ Spettro dell'en. è $E \in [0, +\infty[$

POTENZIALI A GRADINO

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

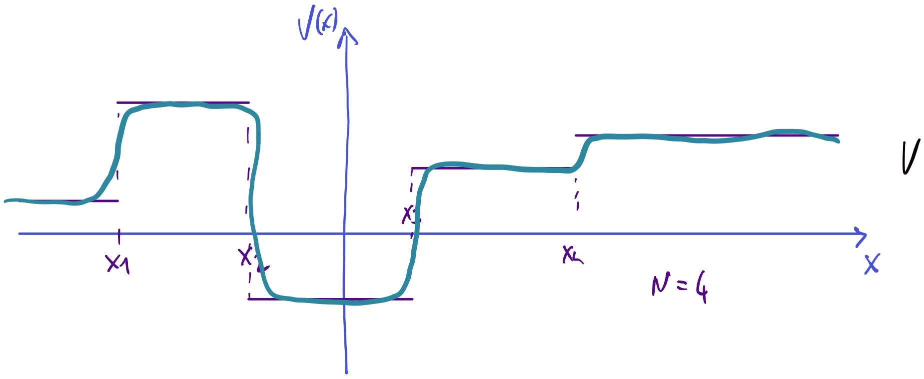
$$-\infty \equiv x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_{N+1} \equiv +\infty$$

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



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

Un tale $V(x)$ è un caso limite di potenziali "regolari" def. da funz. continue, con variazioni molto rapide in intervalli molto piccoli e approx. cost. altrove.



Prop. La soluzione del problema agli autovalori per $\hat{H}$ di una particella 1dim in un pot. a gradini, si possono trovare (tutte) tra le soluzioni (complesse) dell'eq. associata che siano CONTINUE e DERIVABILI con derivata continua su tutto l'asse reale, e POLINOMIALM. LIMITATE

Per il potenziale a gradini l'eq. diff. da risolvere è

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

Nella regione R_j, ptc si riduce a

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

→ Risolviamo eq. in ogni R_j separatamente

$(*)$ → solut. $\quad \psi_E^{(j)}(x) = c_j^+ e^{ip_j x/\hbar} + c_j^- e^{-ip_j x/\hbar}$

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

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

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

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

t.c.

1) sia di classe C^1 anche nei pti x_j $j = 1, \dots, N$
$\Rightarrow$ ψ_E e ψ_E' siano continue in x_j
↳ $2N$ condizioni

(soluz. generale dell'eq. diff. del 2° ord. $\hat{H}\psi_E = E\psi_E$
dip. da $2(N+1) - 2N = 2$ parametri arbitrari)

2) sia polinomialm. lim. all'infinito $(x \to \pm\infty)$
↳ potenzialm. mi da 2 condizioni extra

Condiz. di RACCORDO

$$\begin{cases} \psi_E^{(j)}(x_j) = \psi_E^{(j+1)}(x_j) & \leftarrow \psi \text{ continua} \\ \psi_E'^{(j)}(x_j) = \psi_E'^{(j+1)}(x_j) & \leftarrow \psi' \text{ continua} \end{cases} \qquad j = 1, \dots, N$$

$$\begin{cases} c_j^+ e^{i p_j x_j/\hbar} + c_j^- e^{-i p_j x_j/\hbar} = c_{j+1}^+ e^{i p_{j+1} x_j/\hbar} + c_{j+1}^- e^{-i p_{j+1} x_j/\hbar} \\ \frac{i}{\hbar} p_j \left(c_j^+ e^{i p_j x_j/\hbar} - c_j^- e^{-i p_j x_j/\hbar} \right) = \frac{i}{\hbar} p_{j+1} \left(c_{j+1}^+ e^{i p_{j+1} x_j/\hbar} - c_{j+1}^- e^{-i p_{j+1} x_j/\hbar} \right) \end{cases}$$

Sistema lineare di $2N$ equazioni
nelle $2N+2$ incognite c_j^+, c_j^- $j = 1, \dots, N+1$

$\longrightarrow$ questo fornisce solut. generale dell'eq. diff. lin del 2° ord. dipendente da due parametri.

Non è detto che tutte le soluzioni trovate siano ACCETTABILI (cioè siano tali da generare funzioni L^2 tramite combinazioni lineari); teniamo solo p.le polinomialm. lim. all' ∞; questa condizione però impone delle condiz. sui 2 parametri della soluzione generale.