Eq. di Sch. e Hamiltoniana

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

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

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

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

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

Abbiamo così separato le variabili

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

⇝ Equazione agli autovalori per l'operatore H

⇓

Le solut. 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. :

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

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

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

a_E sono determinate da condizioni iniziali:

→ Dato lo stato $\Psi(\bar{x},0)$ a $t=0$, esso può essere espanso nella base $\{\psi_E\}_{E\in \text{spettro di } H}$:

$$\Psi(\bar{x},0) = \sum_E a_E\, \psi_E(\bar{x})$$

a tempo t generico $\psi_E(\bar{x}) \longrightarrow \psi_E(\bar{x})\, e^{-iEt/\hbar}$, da cui $(*)$

Le soluz. particolari $\psi_E(\bar{x})\, e^{-iEt/\hbar}$ (sono autofunz. di $\hat{H}$) sono t.c. $|\cdot|$ cancella la dip. dal tempo ⇝ 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.

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

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 <u>due</u> 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 normalizzata)

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

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

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

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

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

$= (\psi_E, E\psi_E) =$

$= E$

Questo vale strettamente, quando l'En. ha uno spettro discreto e quindi $\psi_E \in \mathcal{H}$

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 $\hat{P} = -i\hbar\frac{d}{dx}$

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

$$\hat{H}\, e^{ipx/\hbar} = \underbrace{\frac{p^2}{2m}}_{\equiv E} e^{ipx/\hbar} \rightsquigarrow \text{spettro di } \hat{H} \text{ è } [0, +\infty[$$

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

[Queste autofunzioni <u>non</u> sono funz. $L^2(\mathbb{R})$, e questo è tipico di osservabili a SPETTRO CONTINUO (vedi corso Metodi).]

Soluz. generale

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

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

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

$E > 0 \rightarrow$ eq. diff. "dell'osc. armonico"

$\rightsquigarrow$ soluz.
$$\psi_E(x) = C_+ e^{ipx/\hbar} + C_- e^{-ipx/\hbar} \qquad C_\pm \in \mathbb{C}$$
$$p = \sqrt{2mE}$$

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

$E = 0 \rightarrow \psi'' = 0 \rightarrow \psi(x) = a + bx \quad a, b \in \mathbb{C}$

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

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

$\downarrow$ 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 $E \in [0, +\infty[$

per $E = 0$ $\exists$ distrib. temperata che risolve $\hat{H}\chi = 0$

Però $\langle H \rangle_\psi > 0$ (strettam. positivo) per $\psi \in \mathcal{H} = L^2$

infatti ψ sarà comb. lin. di ψ_E (che ora sono distr. temp.)
$$\psi(x) = \int_0^\infty dE\, f(E)\, \psi_E(x)$$
$$\langle \psi, \hat{H}\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE'\, f(E) f^*(E')\, \psi^*_{E'}(x)\, \hat{H}\psi_E(x) =$$
$$= \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE'\, E\, f(E) f^*(E') \int_{-\infty}^{+\infty} dx\, \psi^*_{E'}(x) \psi_E(x)$$
$$= \int_0^\infty dE \int_0^\infty dE'\, E\, \delta(E' - E)\, f(E) f^*(E') =$$
$$= \int_0^\infty dE\, E\, |f(E)|^2 > 0$$

Qto si ricava direttam. sapendo che densità di prob. di E in ψ è data da $|f(E)|^2$.

Integriamo l'eq. di SCHRÖDINGER 1dim $\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) = \frac{2m}{\hbar}(V(x)-E)\,\psi(x)$

$$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} dx \, \frac{d^2\psi}{dx^2} = \frac{2m}{\hbar}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x)\,\psi(x)\,dx - \frac{2mE}{\hbar}\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}\psi(x)\,dx$$

integriamo attorno a pto generico x_0

- Se $V(x)$ è una funzione con al più discontinuità finite

Integrale di ψ in un intervallo (non infinitesimo) è finito

$\Rightarrow$ $\epsilon \to 0$ fa sì che $\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon}\psi(x)\,dx \to 0$.

$\left|\int_I \psi(x)\,dx\right|^2 < \int_I |\psi(x)|^2 dx$ FINITO

Se $V(x)$ ha al più discontinuità finite, la consideraz. per ψ vale anche per $V(x)\psi(x)$.

$\Rightarrow$ $\psi'(x_0+\epsilon) - \psi'(x_0-\epsilon) \longrightarrow 0$ per $\epsilon \to 0$ $\Rightarrow$ anche $\psi(x)$ continua

$\Rightarrow$ soluz. Sch. è CONTINUA e DERIVABILE

- Se $V(x)$ è una funzione con discontinuità infinite

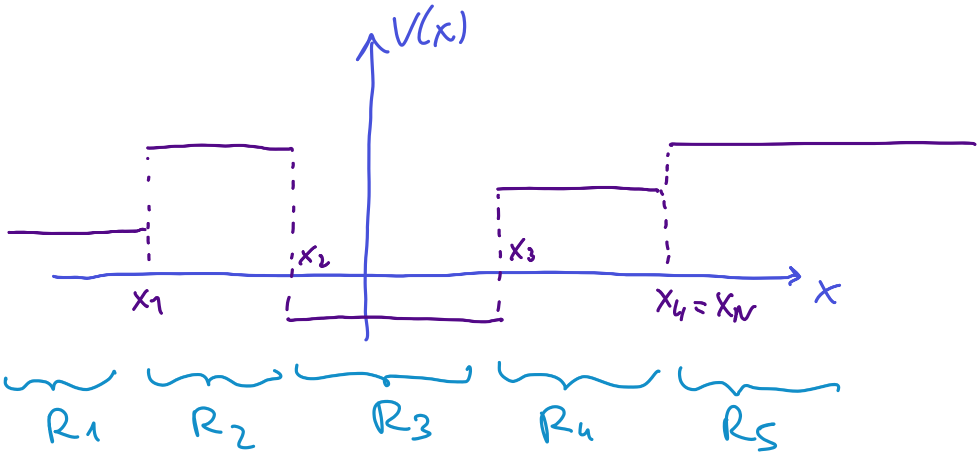
$\int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} V(x)\,\psi(x)\,dx$ non tende necessariamente a zero per $\epsilon \to 0$

$\Rightarrow$ $\psi'(x)$ non è necessariamente continua

Potenziali a gradino

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

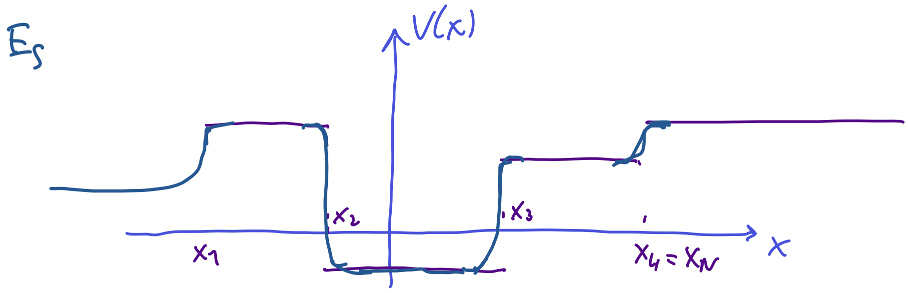
$$-\infty \equiv x_0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < x_{N+1} \equiv +\infty$$



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

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

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> Le 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 ~ distribuz. temperate

Come visto sopra se gradino fosse infinito questa condiz. decadrebbe

"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.

$(*) \to$ 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 $p_j \in \mathbb{R}$ $\quad (E \geq V_j)$

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

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

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

tale che

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

(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.

Condizioni di RACCORDO :

$$\begin{cases} \psi_E^{(j)}(x_j) = \psi_E^{(j+1)}(x_j) & \leftarrow \psi \text{ continua} \\ \psi_E^{(j)\prime}(x_j) = \psi_E^{(j+1)\prime}(x_j) & \leftarrow \psi \text{ derivata continua} \end{cases}$$

$j = 1,\dots,N$ $\rightsquigarrow$ $2N$ condizioni (su $2N+2$ parametri)

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

Sistema LINEARE nelle $2N+2$ incognite c_j^+, c_j^- $\quad j=1,\dots,N+1$

- A $\pm\infty$ i vincoli sull'andamento di ψ_E possono dare ulteriori condizioni .