

EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER

Consideriamo l'eq. di Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \Psi(\vec{x}, t)$$

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

$$\rightarrow i\hbar \dot{\varphi}(t) \psi(\vec{x}) = \varphi(t) \hat{H} \psi(\vec{x})$$

$$\text{ovvero} \quad i\hbar \frac{\dot{\varphi}(t)}{\varphi(t)} = \frac{1}{\psi(\vec{x})} \hat{H} \psi(\vec{x})$$

non dipende
da \vec{x}

non dipende
da t

\rightarrow LHS e RHS non
dipendono da
 \vec{x} e da t , cioè
sono entrambi uguali
a una cost.
che chiamiamo E .

\rightarrow Abbiamo così "separato le variabili".

Otteniamo due eq.

$$\begin{cases} \dot{\varphi} = -\frac{iE}{\hbar} \varphi \\ \hat{H} \psi = E \psi \end{cases}$$

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

\leftarrow Eq. agli autovalori per
l'operatore \hat{H}



Risolvere l'eq. di Schrödinger si riduce a trovare autovalori (SPETTRO) e autofunzioni (LIVELLI ENERGETICI) dell'operatore hamiltoniano \hat{H} .

Dato un autovalore E , possono esserci più di un autovettore corrispondente; detto meglio, ad ogni autovalore E è associato un autospazio V_E di autovettori indipendenti relativi allo stesso autovalore. La dimensione di V_E è detta **degenerazione dell'autovalore E** .

L'Hamiltoniana \hat{H} è un OPERATORE AUTOAGGIUNTO, come ogni osservabile, e in quanto tale ammette una base o.n. completa di autovettori.

Dato l'insieme $\mathcal{E} = \{E \in \mathbb{R} \mid E \text{ è autovalore di } \hat{H}\}$, con ν_E degenerazione dell'autovalore E , ho la base $\{\psi_{E, i_E}(\bar{x}) \mid E \text{ autoval. di } \hat{H}, i_E = 1, \dots, \nu_E\}$

Data una funzione d'onda $\psi(\bar{x}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$, essa può essere espansa

$$\psi(\bar{x}) = \sum_{E \in \mathcal{E}} \sum_{i_E=1}^{\nu_E} a_{E, i_E} \underbrace{\psi_{E, i_E}(\bar{x})}_{\substack{\text{evolve nel} \\ \text{tempo } t \text{ in}}} \in L^2 \text{ se spettro} \\ \text{discreto}$$

Somma se spettro discreto
integrabile se " continuo

$$\rightarrow \psi(\bar{x}, t) = \sum_{E \in \mathcal{E}} e^{-iEt} \sum_{i_E=1}^{\nu_E} a_{E, i_E} \psi_{E, i_E}(\bar{x})$$

↑
rimane autofun. di \hat{H} per ogni t

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

- Se $V(x) \geq V_0$ (limitato inferiormente), e \hat{H} ha spettro discreto, allora $E \in]V_0, +\infty[$.

Dim. • $\langle \psi_E, \hat{H} \psi_E \rangle = E \|\psi_E\|^2 = E$ (ψ_E normalizzato)

$$\begin{aligned} \bullet \langle \psi_E, \hat{H} \psi_E \rangle &= \langle \psi_E, \frac{\hat{P}^2}{2m} \psi_E \rangle + \langle \psi_E, V(\hat{x}) \psi_E \rangle = \\ &= \frac{1}{2m} \|\hat{P} \psi_E\|^2 + \int d^3x \underset{\geq V_0}{V(\vec{x})} |\psi_E(\vec{x})|^2 > \end{aligned}$$

$$> V_0 \int d^3x |\psi_E(\vec{x})|^2 = V_0. \quad //$$

- Consideriamo problemi unidimensionali: $\psi(x) \quad x \in \mathbb{R}$.

L'equazione $\hat{H} \psi_E(x) = E \psi_E(x)$ è data da

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

che possiamo anche scrivere

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

cioè è un'equazione differenziale lineare del 2° ordine con coeff. a valori reali \Rightarrow soluzione è combinazione lineare di due soluzioni particolari indep.

• A seconda delle proprietà di $V(x)$, le soluzioni hanno determinate proprietà. \curvearrowright

- Se $V(x)$ è continuo a tratti, la soluzione $\psi_E(x)$ (che permettiamo stare nell'insieme delle DISTRIBUZIONI TEMPERATE) è una funzione CONTINUA.

Infatti se $\psi_E(x)$ fosse discontinua, $V(x)$ dovrebbe contenere delle derivate della $\delta(x)$ di Dirac (localm. attorno a pto disc. $\psi_E(x)$ sarebbe come Θ Heaviside).

Cosa possiamo dire su $\psi_E'(x)$?

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

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

integriamo attorno a pto generico x_0

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

l'integrale di ψ in un intervallo (non infinito) è finito

$$\Rightarrow \epsilon \rightarrow 0 \text{ fa n. de } \int_{x_0-\epsilon}^{x_0+\epsilon} \psi(x) dx \rightarrow 0. \quad \left| \int_I \psi(x) dx \right|^2 < \int_I |\psi(x)|^2 dx$$

↑ FINITO

Se $V(x)$ ha al più discontinuità finite, la cons. di ψ vale anche in $V(x)\psi(x)$.

$$\Rightarrow \psi'(x_0+\epsilon) - \psi'(x_0-\epsilon) \rightarrow 0 \text{ in } \epsilon \rightarrow 0 \Rightarrow \text{anche } \psi(x) \text{ continua}$$

\Rightarrow soluz. Sch. è CONTINUA e DERIVABILE

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

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

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

ESEMPIO di HAMILTONIANA A SPETTRO CONTINUO:

PARTICELLA LIBERA 1dim.

- l'Hamiltoniana della particella libera (che si muove in \mathbb{R})

$$\tilde{H}(p, q) = \frac{p^2}{2m}$$

- In MQ $H \rightarrow \hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m}$

- Problema agli autovalori: $\hat{H} \psi_E = E \psi_E$ diventa

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \psi_E''(x) = E \psi_E(x)$$

$$\psi_E''(x) = -\frac{2mE}{\hbar^2} \psi_E(x) \quad (*)$$

\leadsto Eq. diff. dell'osc. arm. per $E > 0$, del rep. arm. per $E < 0$

- Consideriamo $E > 0$ (En. di part. lib. è def. positiva)

allora la soluzione generale dell'eq. (*) può essere scritta

$$\psi_E(x) = c_+ e^{ikx} + c_- e^{-ikx} \quad (*) \quad \text{con } k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$$

Detto in maniera diversa: per ogni $E \in \mathbb{R}_+$ ci sono 2 autofunzioni indipendenti dell'op \hat{H} relative all'autovalore E , cioè e^{ikx} e e^{-ikx} .

\rightarrow degenerazione di $E = 2$.

- Nota che le soluzioni (*) NON sono funz. $L^2(\mathbb{R})$,
 cioè non possono descrivere uno stato del sistema. (Sono DISTRIBUZIONI TEMPERATE)

Però posso fare combinazioni lineari che siano L^2 :

$$\psi(x) = \int_0^{\infty} dE (\phi_+(E) e^{ikx} + \phi_-(E) e^{-ikx}) \quad k \equiv \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}} \geq 0$$

cambio variab. integr. = $\int_{-\infty}^{+\infty} dp \tilde{\phi}(p) e^{ipx/\hbar}$ (o) ← se $\tilde{\phi}(p) \in L^2(\mathbb{R})$, allora $\psi(x)$ è un buon stato.

$p \equiv \hbar \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$

L'evoluzione temporale è ora data da

$$\psi(x,t) = \int_0^{\infty} dE e^{-iEt/\hbar} (\phi_+(E) e^{ikx} + \phi_-(E) e^{-ikx})$$

Essendo comb. lin. di soluzioni di eq. di Sch. $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \hat{H}\psi$, esse risolve l'eq. di Sch.

- Consideriamo $E < 0 \rightsquigarrow$ eq. rep. arm. con sol.

$$\psi_E = c_+ e^{-\sqrt{2m|E|}x/\hbar} + c_- e^{\sqrt{2m|E|}x/\hbar}$$

NON c'è una solut. ACCETTABILE in quanto

diverge a $\pm\infty$ più velocemente di ogni polinomio
 (cioè non è polinomialm. limitata all' ∞)

↳ Qto non ci permette di usarle per fare comb. lin. che siano L^2 .

⇒ Spettro è $E \in [0, +\infty[$

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

Però $\langle \hat{H} \rangle_{\psi} > 0$ (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 rinvoca d'interm. separab che densità di prob. di E in ψ è data da $|f(E)|^2$.

Pacchetto d'onda Gaussiano

Torniamo a (0). Vogliamo ora scrivere una funzione d'onda $\psi(x,t)$ che descriva l'evoluzione di uno stato per la particella libera.

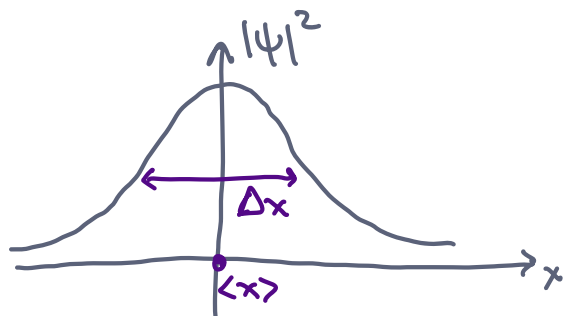
- Prendiamo (0) con $\tilde{\phi}(p) = e^{-a^2(p-p_0)^2/4\hbar^2}$
 cioè $\tilde{\phi}(p)$ è una GAUSSIANA centrata in p_0
 e con larghezza $\Delta p = \hbar/a$.

- La funzione $\psi(x)$ può essere calcolata usando (0)

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \int dp e^{-a^2(p-p_0)^2/4\hbar^2} e^{ipx/\hbar} = \\ &= \int dp e^{-a^2(p-p_0)^2/4\hbar^2} e^{i(p-p_0)x/\hbar} e^{ip_0x/\hbar} = \\ &= e^{ip_0x/\hbar} \int d\tilde{p} e^{-a^2\tilde{p}^2/4\hbar^2} e^{i\tilde{p}x/\hbar} \quad \tilde{p} = p - p_0 \\ &= e^{ip_0x/\hbar} \int d\tilde{p} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(\tilde{p}^2 - i4\frac{\hbar}{a^2}x\tilde{p} - \frac{4\hbar^2x^2}{a^4} + \frac{4\hbar^2x^2}{a^4})} \\ &= e^{ip_0x/\hbar} e^{-x^2/a^2} \int d\tilde{p} e^{-\frac{a^2}{4\hbar^2}(\tilde{p} - \frac{2i\hbar x}{a^2})^2} = \\ &= \frac{2\hbar\pi^{1/2}}{a} e^{ip_0x/\hbar} e^{-x^2/a^2} \quad \leftarrow \text{Ancora una GAUSSIANA} \end{aligned}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tilde{s} e^{-\alpha^2(\tilde{s}+\beta)^2} = \frac{\pi^{1/2}}{\alpha}$$

qto fattore importante per lo stato del sistema: p_0 diversi mi danno diverse distribuz. dei momenti e quindi stati diversi



~> Abbiamo pacchetto d'onda

Se voglio funz. d'onda normalizzata, prendo

$$\psi(x) = \gamma e^{i p_0 x / \hbar} e^{-x^2/2a^2}$$

e determino γ t.c. $\|\psi\|^2 = 1$

$$\|\psi\|^2 = \int dx \psi^*(x) \psi(x) = |\gamma|^2 \int dx e^{-2x^2/a^2} = |\gamma|^2 \left(\frac{\pi a^2}{2}\right)^{1/2}$$

\leadsto a meno di una fase $\gamma = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4}$

$$\psi(x) = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/4} e^{i p_0 x / \hbar} e^{-x^2/2a^2} \quad \leftarrow \text{funz. d'onda normalizzata}$$

Ora che abbiamo normalizzato la funz. d'onda, possiamo calcolare il valore medio di un'osservabile A come

$$\langle A \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \hat{A} \psi(x) dx$$

$$\langle x \rangle_\psi = \int_{-\infty}^{+\infty} x |\psi(x)|^2 dx = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x e^{-2x^2/a^2} dx = 0$$

densità di probabilità per la variabile x

integrale di una funz. dispari

$$\int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-\beta x^2} dx = -\frac{d}{d\beta} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta x^2} dx = \frac{\pi^{1/2}}{2} \frac{1}{\beta^{3/2}}$$

Vediamo la varianza

$$\Delta x_\psi^2 = \langle x^2 \rangle_\psi - \langle x \rangle_\psi^2 = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-2x^2/a^2} dx = \left(\frac{2}{\pi a^2}\right)^{1/2} \frac{\pi^{1/2}}{2} \left(\frac{a^2}{2}\right)^{3/2} = \frac{a^2}{4} \rightarrow \Delta x = a/2$$

$$\langle P \rangle_{\psi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^*(x) \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \right) dx = \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{-2x^2/a^2} \frac{\hbar}{i} \left(i \frac{p_0}{\hbar} - \frac{2x}{a^2} \right)$$

$$= p_0 \|\psi\|^2 = p_0$$

$$\Delta p_{\psi}^2 = \langle p^2 \rangle_{\psi} - \langle p \rangle_{\psi}^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \left(\frac{\hbar}{i} \frac{d}{dx} \psi(x) \right) dx - p_0^2 =$$

$$= \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} \int dx e^{-2x^2/a^2} \left[\left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left(i \frac{p_0}{\hbar} - \frac{2x}{a^2} \right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i} \right)^2 \left(-\frac{2}{a^2} \right) \right] - p_0^2 =$$

$$= \left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} \int dx e^{-2x^2/a^2} \left(\cancel{p_0^2} + \frac{4i p_0 \hbar x}{a^2} - \frac{4\hbar^2 x^2}{a^4} + \frac{2\hbar^2}{a^2} \right) - \cancel{p_0^2}$$

$$= \left[\left(\frac{2}{\pi a^2} \right)^{1/2} \left(-\frac{4\hbar^2}{a^4} \right) \int dx x^2 e^{-2x^2/a^2} \right] + \frac{2\hbar^2}{a^2} = \frac{\hbar^2}{a^2}$$

$= \langle x^2 \rangle_{\psi} = a^2/4$

$$\rightarrow \Delta p = \hbar/a$$

$$\rightsquigarrow \Delta x \cdot \Delta p = \hbar/2$$

Questo è il minimo valore che $\Delta x_{\psi} \Delta p_{\psi}$ può assumere per generico ψ

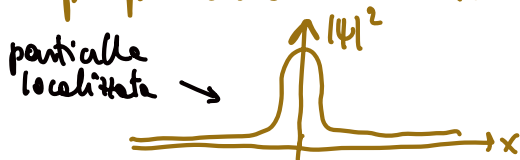
Principio di indeterminazione di

Heisenberg:

$$\Delta x_{\psi} \cdot \Delta p_{\psi} \geq \hbar/2 \quad \forall \psi \in \mathcal{H}$$

Qto vale per ogni coppia di variabili canoniche coniugate

Se prepariamo ψ t.c. Δx molto piccolo, allora Δp è molto grande:



Evolutione temporale:

PARTICELLA LIBERA:

$$E_p = p^2/2m$$

$$\Psi(x,t) = \int dp e^{-a^2(p-p_0)^2/4\hbar^2} e^{ipx/\hbar} e^{-iE_p t/\hbar}$$

Facciamo l'integrale Gaussiano

$$\begin{aligned} -\frac{a^2(p-p_0)^2}{4\hbar^2} + ipx/\hbar - \frac{i p^2 t}{2m\hbar} &= -\frac{a^2}{4\hbar^2}(p-p_0)^2 - \frac{i(p-p_0)^2 t}{2m\hbar} + ipx/\hbar - \frac{i p_0 p t}{m\hbar} + \frac{i p_0^2 t}{2m\hbar} \\ &= -\left(\frac{a^2}{4\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)(p-p_0)^2 + \frac{i(p-p_0)(x - \frac{p_0 t}{m})}{\hbar} + \frac{i p_0 x}{\hbar} - \frac{i p_0^2 t}{2m\hbar} \\ &= -\left(\frac{a^2}{4\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right) \left[\tilde{p}^2 + \frac{i}{\hbar} \tilde{p} \left(x - \frac{p_0 t}{m}\right) \right] \frac{1}{\left(\frac{a^2}{4\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)} - \left(\frac{x - \frac{p_0 t}{m}}{\hbar}\right)^2 \frac{1}{4\hbar^2 \left(\frac{a^2}{4\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)^2} \\ &\quad - \frac{\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)^2}{\left(a^2 + \frac{2it\hbar}{m}\right)} + \frac{i p_0 x}{\hbar} - \frac{i p_0^2 t}{2m\hbar} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi(x,t) &= e^{i p_0 x/\hbar} e^{-\frac{i p_0^2 t}{2m\hbar}} e^{-\frac{\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)^2}{\left(a^2 + \frac{2it\hbar}{m}\right)}} \int d\tilde{p} e^{-\left(\frac{a^2}{4\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right) \tilde{p}^2} \\ &= \frac{\pi^{1/2}}{\left(\frac{a^2}{4\hbar^2} + \frac{it}{2m\hbar}\right)^{1/2}} e^{i p_0 \left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)/\hbar} e^{-\frac{\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)^2}{\left(a^2 + \frac{2it\hbar}{m}\right)}} \end{aligned}$$

il picco della funzione d'onda si abbassa

$$\frac{1}{a^2 + \frac{2it\hbar}{m}} + \frac{1}{a^2 - \frac{2it\hbar}{m}} = \frac{2a^2}{a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}}$$

$$|\Psi(x,t)|^2 = \frac{\pi}{\left(\frac{a^4}{16\hbar^4} + \frac{t^2}{4m^2\hbar^2}\right)^{1/2}} e^{-\frac{2a^2\left(x - \frac{p_0 t}{m}\right)^2}{\left(a^4 + \frac{4\hbar^2 t^2}{m^2}\right)}}$$

$$\langle x \rangle_{\Psi_t} = \frac{p_0 t}{m}$$

$$\Delta x_{\Psi_t} = \frac{a}{2} \sqrt{1 + \frac{4\hbar^2 t^2}{a^2 m^2}}$$

pacchetto d'onda si sparpaglia

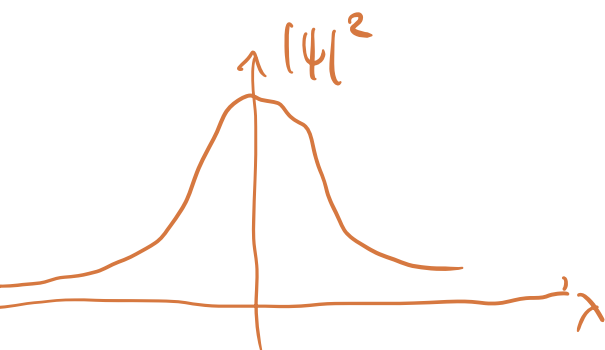
Analogamente: $\langle p \rangle_{\psi_t} = p_0$ $\Delta p_{\psi_t} = \frac{\hbar}{a}$

$\leadsto \langle x \rangle_{\psi_t}$ e $\langle p \rangle_{\psi_t}$ soddisfano le equazioni del moto classiche per la particella libera (cioè $\frac{d}{dt} \langle p \rangle_{\psi_t} = 0$ $\frac{d}{dt} \langle x \rangle_{\psi_t} = \frac{\langle p \rangle_{\psi_t}}{m}$)

Qto è vero per ogni variabile dinamica

$$\langle f(x, p) \rangle_{\psi_t} = f(x_{cl}(t), p_{cl}(t))$$

\uparrow Soddisfa eq. di Schrödinger ψ_t
 \uparrow soddisfa eq. di Hamilton



$t \rightarrow$

