EQUAZIONE DI SCHRODINGER DIPENDENTE DAL TEMPO E OPERATORI QUANTISTICI

- Equazione di Schrodinger;
- Argomenti di plausibilità dell'equazione di Schrodinger;
- Equazione di Schrodinger dipendente dal tempo per una particella soggetta a forze conservative o per n particelle;

Analizziamo in dettaglio i fattori comuni degli esperimenti analizzati delle ipotesi ad hoc utilizzate per spiegarli:

CORPO NERO

dimensione sistema atomico o sub-atomico	nuova cost. h	energia degli osscillatori varia nel discreto

EFFETTO FOTOELETTRICO

dimensione sistema atomico o sub-atomico	nuova cost. h	campo e.m. discreto $E=h\nu$ $P=h/\lambda$	onde e.m. equivalenti a particelle

PRESSIONE DI RADIAZIONE

Onda e.m. ha quantita di moto e momemto della quantità di moto, tipiche caratteristiche particellari. Se en. quanti: $E=h\nu$ $P=h/\lambda$

ATOMO

dimensione sistema atomico o sub-atomico	nuova cost. h	mom. ang. discreto $L=nh/2\pi$ spettri discreti

CALORE SPECIFICO

Viene spiegato impiegando le stesse ipotesi ad hoc introdotte da Plank per il Corpo Nero e da Einstein per l'Effetto Fotoelettrico

DIFFRAZIONE DI ELETTRONI

dimensione sistema atomico o sub-atomico	nuova cost. h	elettrone equivalente a una onda

PRINCIPIO DI DE BROGLIE

$$\textit{onda} \quad \Leftrightarrow \quad \textit{particella}$$

$$h\nu = \mathrm{E}$$

$$\frac{h}{\lambda} = \mathrm{p}$$

$$\Psi(\vec{\mathrm{r}},\mathrm{t}) \quad \Leftrightarrow \quad \vec{\mathrm{r}}(\mathrm{t})$$

campo d'onda

- quale significato fisico ha ? Cioè, cosa si propaga ?
- di quale equazione differenziale è soluzione?

posizione

- nella **r(t)** sono racchiuse tutte le info fisiche
- **r(t)** è soluzione delle equazioni del moto

EQUAZIONE DI SCHRODINGER

Vediamo adesso di scrivere, noto il sistema quantistico, l'equazione differenziale di cui la funzione d'onda Ψ è soluzione.

E' da notare che di tale equazione differenziale non si può dare alcuna "dimostrazione" in quanto essa costituisce la legge fondamentale della meccanica quantistica.

La sua validità è verificata a posteriori mediante il confronto tra previsioni teoriche e dati sperimentali.

Data una particella quantistica di massa m sottoposta a forze conservative di potenziale classico V, l'equazione di Schrodinger è

$$\boxed{i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})\right]\Psi}$$

dove $\Delta = \vec{\nabla}\cdot\vec{\nabla}$ è il prodotto scalare tra due operatori gradiente.

Argomenti di plausibilità dell’equazione di Schrodinger

Vediamo alcuni dei ragionamenti fatti da Schrodinger per ricavare l’equazione base della meccanica quantistica.
Tali ragionamenti permettono di giustificarne la forma e capirne il contenuto fisico.

Partiamo dando per assodati i Principi di DeBroglie. Per il dualismo onda-particella valgono le seguenti relazioni:

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad\qquad E = h\nu$$

$$p = m\mathrm{v}_{\mathrm{m}}$$

Relazione tra quantità di moto di una particella (massa m e velocità v_{m}) e lunghezza d’onda

Relazione tra l’energia della particella e la frequenza dell’onda

L'esperimento di diffrazione da cristallo effettuato con onde e.m. e con elettroni ha mostrato identità di risultati e quindi ***"stessa descrizione matematica dal punto di vista ondulatorio"*.**

L'equazione di una onda piana in direzione *l* è:

$$\Psi(l,t) = Ae^{i(kl-\omega t)} \qquad (1)$$

con $\omega = 2\pi\nu$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda}$$

$\lambda\nu = \mathrm{v_f}$ velocità di fase

Si ottiene

$$\frac{\nu}{\mathrm{v_f}} = \frac{1}{\lambda} \Rightarrow \frac{1}{\lambda} = \frac{p}{h} = \frac{m\mathrm{v_m}}{h} \qquad (2)$$

valido per particelle di massa m non nulla

Masse puntiformi e fotoni si propagano come onde allo stesso modo.

L'eq. diff. che di cui l'onda e.m. piana è soluzione è nota

$$\Delta\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\mathrm{v}_\mathrm{f}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} \qquad (3)$$

<u>Quale sarà l'eq. diff. che di cui l'onda associata ad una massa puntiforme m è soluzione ?</u>

Sostituiamo l'onda piana (1) dentro la derivata temporale nell'eq. (3)

$$\Delta\Psi(\vec{r},t) = \frac{1}{\mathrm{v}_\mathrm{f}^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = \frac{1}{\mathrm{v}_\mathrm{f}^2}\left(-\omega^2\Psi\right)$$

$$\Delta\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\omega^2}{\mathrm{v}_\mathrm{f}^2}\Psi$$

Per una particella puntiforme di massa non nulla da (2) si ha:

$$\Delta\Psi(\vec{r},t) = -\frac{\omega^2}{\mathrm{v}_\mathrm{f}^2}\Psi = -\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi = -\frac{p^2}{\hbar^2}\Psi = -\frac{m^2\mathrm{v}_\mathrm{m}^2}{\hbar^2}\Psi$$

$$\Delta\Psi(\vec{r},t) = -\frac{m}{\hbar^2}\left(m\mathrm{v}_\mathrm{m}^2\right)\Psi = -\frac{m}{\hbar^2}\left(2T\right)\Psi$$

energia
cinetica

Ma: **en. cinetica= en. totale – en. potenziale**

T* = *E* - *V

$$\Delta\Psi(\vec{r},t) = -\frac{2m}{\hbar^2}\left(E - V\right)\Psi$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V\Psi = E\Psi \qquad (4)$$

Calcoliamo: $$\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -i\omega\Psi = -i\frac{\hbar\omega}{\hbar}\Psi = -i\frac{E}{\hbar}\Psi$$

$$E\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = i\hbar\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t}$$

Sostituendo in (4) si ottiene

$$i\hbar\frac{\partial \Psi(\vec{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(\vec{r},t) + V(\vec{r})\Psi(\vec{r},t)$$

Questa equazione differenziale ha come soluzione l'onda associata ad una massa puntiforme *m* soggetta ad un potenziale *V*.

Si tratta dell'eq. diff. trovata da Schrodinger nel 1925

Vediamo adesso alcune considerazioni aggiuntive.

Come ci suggerisce l'equazione di Schrodinger, consideriamo una particella puntiforme di massa m descritta come un'onda piana della forma

$$\Psi(x,t) = Ae^{i\left(\vec{k}\vec{r} - \omega t\right)}$$

sostituendola nella eq. di Schrodinger

da $\quad \Delta\Psi(x,t) = -k^2\Psi; \quad \dfrac{\partial\Psi}{\partial \mathrm{t}} = -i\omega\Psi$

si ottiene

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2\Psi + V\Psi = \hbar\omega\Psi \Rightarrow \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + V = \hbar\omega$$

$$\frac{p^2}{2m} + V = E$$

che è la relazione dell'energia totale di una particella di massa *m*.

Un ragionamento analogo può essere fatto per le onde e.m. (che rappresentano la descrizione ondulatoria dei fotoni) che soddisfano all'equazione delle onde di D'Alambert.

Prendiamo il campo elettrico di un'onda e.m. piana nella forma complessa

$$\vec{E}(\vec{r},t) = \vec{A}e^{i\left(\vec{k}\vec{r}-\omega t\right)}$$

Sostituiamo nell'equazione delle onde

$$\Delta\vec{E} = \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial^2 t}\vec{E}$$

$$-k^2\vec{E} = \frac{1}{c^2}(i\omega)^2\vec{E} \Rightarrow \hbar^2 k^2 = \frac{\hbar^2\omega^2}{c^2}$$

$$p = \frac{E}{c}$$

Come nel caso dell'equazione di Schrodinger, la sostituzione di una soluzione dà la relazione energia-impulso.

Se quindi pensiamo di fare la seguente analogia operatoriale:

Energia E $\rightarrow$ $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$

impulso p $\rightarrow$ $-i\hbar\nabla$

Dalla relazione energia-impulso con la sostituzione delle grandezze fisiche classiche con operatori è possibile ottenere

sia l'equazione delle onde e.m.

sia l'equazione di Schrodinger.

EQUAZIONE DI SCHRODINGER DIPENDENTE DAL TEMPO

per una particella di massa **m** e soggetta a forze conservative di potenziale **V(r)**.

La particella, da un punto di vista classico, può essere descritta con l'hamiltoniana:

$$H = energia\ cinetica + energia\ potenziale$$

$$H = T + V = \frac{p^2}{2m} + V(\vec{r})$$

L'equazione di Schrodinger può essere vista come l'equazione operatoriale:

$$\hat{E} \cdot \Psi(\vec{r}, t) = \hat{H} \cdot \Psi(\vec{r}, t)$$

Dove $\hat{E}$ e $\hat{H}$ sono due operatori lineari agenti sulle funzioni che descrivono il sistema $\Psi(\vec{r}, t)$

Quindi l’equazione differenziale che descrive lo stato del sistema quantistico costituito da una particella di massa m soggetta ad un potenziale V(r),

può essere desunta dall’hamiltoniana e dall’energia classica viste come operatori (in accordo con il principio di corrispondenza:

Energia E $\rightarrow$ $i\hbar\dfrac{\partial}{\partial t}$

hamiltoniana H $\rightarrow$ $-\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{r})$

Se il sistema è composto da **n** particelle di vettore posizione $\mathbf{r_i}$ **i=1,2,…n**

$$H = \sum_{i=1}^{n}\frac{p_i^{\;2}}{2m_i} + V(\vec{r}_{1,}\vec{r}_2,\ldots\vec{r}_n)$$

$$con \qquad \Psi = \Psi(\vec{r}_{1,}\vec{r}_2,\ldots\vec{r}_n,t)$$