Equazione di Schrödinger

Prima di riportare l'equazione di Schrodinger un breve accenno alle trasformate di Fourier e alla delta di Dirac spesso utilizzate.

→ Data una funzione $\phi(\vec{x})$ si definisce trasformata di Fourier di $\phi(\vec{x})$ l'integrale

$$F(\phi(\vec{x})) = \int \phi(\vec{x})\, e^{-i\vec{p}\vec{x}}\, d^3x = c(\vec{p})$$

la controtrasformata di Fourier vale

$$F^{-1}(c(\vec{p})) = \int c(\vec{p})\, e^{i\vec{p}\vec{x}'}\, d^3p = \phi(\vec{x}')$$

La definizione è ben posta infatti

$$\phi(\vec{x}') = \iint \phi(\vec{x})\, e^{-i\vec{p}(\vec{x}-\vec{x}')}\, d^3x\, d^3p$$

l'uguaglianza è verificata perché si può dimostrare che

$$\int e^{-i\vec{p}(\vec{x}-\vec{x}')}\, d^3p = \delta_3(\vec{x}-\vec{x}')$$

dove $\delta_3(\vec{x}-\vec{x}')$ è detta delta di Dirac

cioè una funzione nulla per $\vec{x} \neq \vec{X}'$ e

tale che $\int \delta_3(\vec{x}-\vec{x}')\, d^3X = 1$

Di seguito riportiamo l'equazione di Schrodinger per una particella libera non relativistica.

La soluzione di tale equazione permette di determinare l'evoluzione della funzione d'onda nel tempo $\phi(x,y,z,t)$ e di determinare la probabilità che al tempo t la particella sia presente in un volume $\Delta x \Delta y \Delta z$ valore dato da $P(x,y,z,t) = \int |\phi(x,y,z,t)|^2 \Delta x \Delta y \Delta z$

con $|\phi(x,y,z,t)|^2 = \phi^*(x,y,z,t)\,\phi(x,y,z,t)$ e

e ϕ^* complessa coniugata di ϕ.

Considero una funzione complessa della forma

$\phi = e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$ secondo la quantizzazione

dell'energia di Planck e la lunghezza d'onda di

De Broglie possiamo scrivere:

$$E = hf = \frac{h\omega}{2\pi} = \hbar \omega$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} K = \hbar K$$

sostituendo

$$\phi = e^{i/\hbar (\vec{p}\vec{x} - Et)}$$

da cui si ricava

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \phi}{\partial x} = \dfrac{i}{\hbar} p_x \phi \\[2ex] \dfrac{\partial \phi}{\partial t} = -\dfrac{i}{\hbar} E \phi \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} p_x \phi = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial x} \phi \\[1ex] p_y \phi = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial y} \phi \\[1ex] p_z \phi = -i\hbar \dfrac{\partial}{\partial z} \phi \\[1ex] E \phi = i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t} \phi \end{cases}$$

Dovendo valere

$$2mE = p^2$$

$$2mE\,\phi = p^2\,\phi$$

$$\boxed{i\hbar \frac{\partial}{\partial t}\phi = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial x^2}\phi + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2}\right]}$$

L'equazione di Schrodinger è un'equazione lineare.

Data la linearità una soluzione può essere scritta nella forma

$$\phi(\vec{x},t) = c(\vec{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\vec{x} - Et)}\, d^3p$$

$$\boxed{\text{con } E = p^2/2m}$$

Ma $\phi(\vec{x}, t=0) = c(\vec{p})\, e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\vec{x}}\, d^3p$

$c(\vec{p})$ rappresenta la trasformata di Fourier della funzione d'onda calcolata al tempo ϕ.

Fisicamente $|c(\vec{p})|^2 d^3p$ rappresenta la probabilità che la particella abbia una quantità di moto compresa tra $\Delta p_x \Delta p_y \Delta p_z$ - mentre $|\phi(x,t)|^2 d^3x$ la probabilità che la particella si trovi nel volume $\Delta x \Delta y \Delta z$ al tempo t.

Il principio di indeterminazione di Heisenberg

Il principio di indeterminazione di Heisenberg afferma che alcune grandezze quali ad esempio posizione x e quantità di moto p_x oppure energia E e tempo t non possono essere misurate in modo preciso senza commettere un errore valutato secondo la formula

$$\Delta x \, \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} .$$

Va osservato che quando si prepara il sistema misurando i valori di queste grandezze per definire la funzione $\phi(x, y, z, t=0)$ tale funzione conterrà in modo intrinseco l'incertezza suddetta.

L'evoluzione temporale della funzione d'onda ⓪
porterà ad un risultato probabilistico
ricordando che

$$\int \phi^*(x,y,z,t)\,\phi(x,y,z,t)\,\Delta x\,\Delta y\,\Delta z$$

rappresenterà la probabilità di trovare la particella nel volume $\Delta x\,\Delta y\,\Delta z$ mentre le grandezze

$$\int c^*(p,t)\,c(p,t)\,\Delta p_x\,\Delta p_y\,\Delta p_z$$

rappresenterà la probabilità
che la particella al tempo t presenti
quantità di moto incluso tra i valori
$\Delta p_x\,\Delta p_y\,\Delta p_z$.

Per quanto detto prima il risultato
non è probabilistico per mancanza di
informazioni sulle condizioni iniziali o per

un difetto dei sistemi di misura non troppo (3)

precisi.

L'incertezza è intrinseca al modello stesso

e non può essere eliminata.

Cercheremo di dimostrare di seguito questa

affermazione cercando di seguire la logica

della dimostrazione senza appesantirci sui

calcoli.

Ricordiamo che una funzione gaussiana

$$f(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right]$$ gode delle

seguenti proprietà:

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,dx = 1$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} x\, f(x)\,dx = \mu$$ è la media della gaussiana

$$\int_{-\infty}^{\infty} (x-\mu)^2 f(x)\,dx = \sigma^2$$ è la varianza della gaussiana

Considero ora una particolare funzione d'onda

della forma

$$\psi(x,t=0) = \frac{1}{\sqrt[4]{\pi}\,\sqrt{d}}\, \exp\left[\frac{i}{\hbar}\, p_0 (x-x_0) - \frac{(x-x_0)^2}{2d^2}\right]$$

tale funzione d'onda verifica la relazione

$$|\psi(x,t=0)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{\pi}}\, \exp\left[-\frac{(x-x_0)^2}{d^2}\right]$$

cioè una funzione gaussiana con media x_0 e

varianza $d^2/2$.

A questo punto si considera la trasformata (5)

di Fourier della funzione

$F(\phi(x,t=0)) = c(p,t=0)$ si ricava

$$c(p,t=0) = \sqrt{\frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}}\ \exp\left(-\frac{i}{\hbar}px_0 - \frac{(p_0-p)^2 d^2}{2\hbar^2}\right)$$

$$|c(p,t)|^2 = \frac{d}{\hbar\sqrt{\pi}}\ \exp\left(-\frac{(p-p_0)^2 d^2}{\hbar^2}\right)$$ è

una funzione gaussiana con media p_0 e

varianza $\frac{\hbar^2}{2d^2}$.

Possiamo quindi verificare che per la

funzione d'onda al tempo $t=0$ vale la

proprietà $(\Delta x)^2(\Delta p)^2 = \frac{d^2}{2}\frac{\hbar^2}{2d^2} = \frac{\hbar^2}{4}$

Possiamo ora considerare l'evoluzione temporale della funzione d'onda.

$$\phi(x,t) = \int \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, c(p,t=0)\, \exp\left(-\frac{ip^2}{2m\hbar}t + \frac{ipx}{\hbar}\right) dp$$

così risolvendo l'integrale si calcola

$$|\phi(x,t)|^2 = \frac{1}{d\sqrt{\pi\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{d^4 m^2}\right)}}\, \exp\left[-\frac{1}{d^2\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{d^4 m^2}\right)}\left(x - x_0 - \frac{p_0 t}{m}\right)^2\right]$$

la densità di probabilità della funzione evoluta nel tempo ha media $\left(x_0 + \frac{p_0 t}{m}\right)$ e varianza $\frac{d^2}{2}\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{d^4 m^2}\right)$

$$\Delta x^2 \Delta p^2 = \frac{d^2}{2}\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{d^4 m^2}\right)\frac{\hbar^2}{2d^2} \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

Dall'equazione precedentemente riportata si verifica che continua a valere il principio di indeterminazione di Heisenberg, anzi aumenta con il tempo l'incertezza.

Si riscontra anche che la varianza di $|\psi(x,t)|^2$ varia e aumenta con il tempo secondo la legge $\frac{d^2}{2}\left(1+\frac{\hbar^2 t^2}{d^4 m^2}\right)$.

Questo fenomeno è detto dispersione ed aumenta quando l'onda è vincolata ad attraversare una fenditura di D molto stretta.

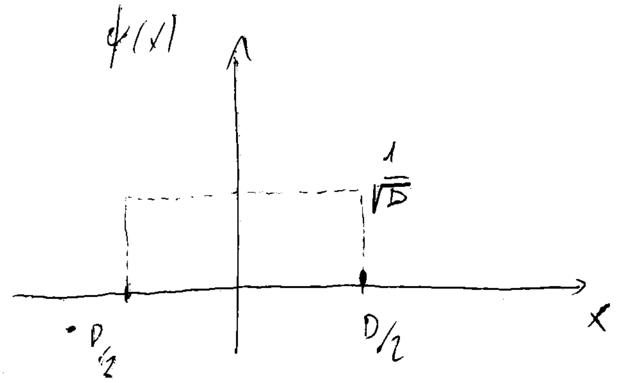
Questo fenomeno è riscontrabile per la luce che presenta lunghezze d'onda paragonabili a D. Per particelle presenti $\lambda = \frac{h}{p} \simeq 0$ il fenomeno è irrilevante.

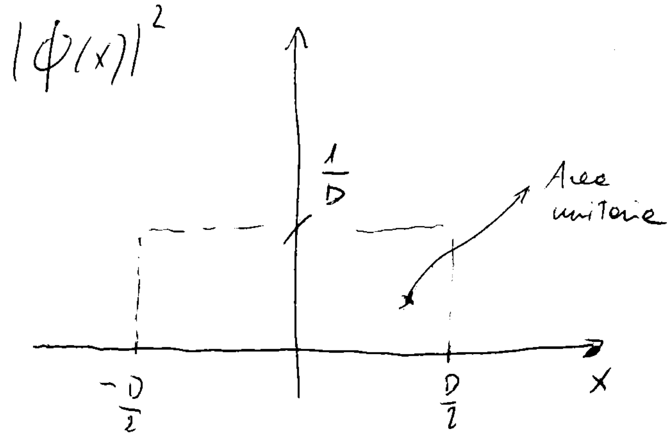
Interferenza da una fenditura con il modello quantistico

Si vuole di seguito verificare che i principi della meccanica quantistica ed in particolar modo il principio di indeterminazione di Heisemberg possono essere visti come la causa della diffrazione attraverso una fenditura di dimensione D.

Consideriamo una particella (fotone) la cui funzione d'onda è data dall'espressione

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{D}} & |x| < \frac{D}{2} \\ 0 & |x| > D \end{cases}$$





in pratica la particella è vincolata ad attraversare la fenditura di dimensione D.

La probabilità che si trovi in questa posizione è data da $|\varphi(x)|^2 = 1$; altrove la probabilità è nulla.

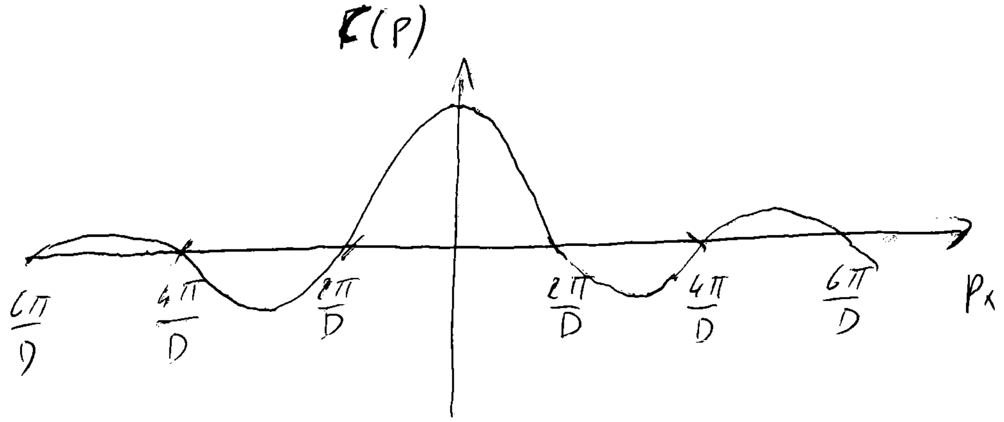
Calcolo ora la trasformata di Fourier di $\varphi(x)$

$$C(p_x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{D}} e^{-i(p_x)x}\, dx = \left. \frac{e^{-i(p_x)x}}{-i\, p_x \sqrt{D}} \right|_{-\frac{D}{2}}^{\frac{D}{2}} =$$

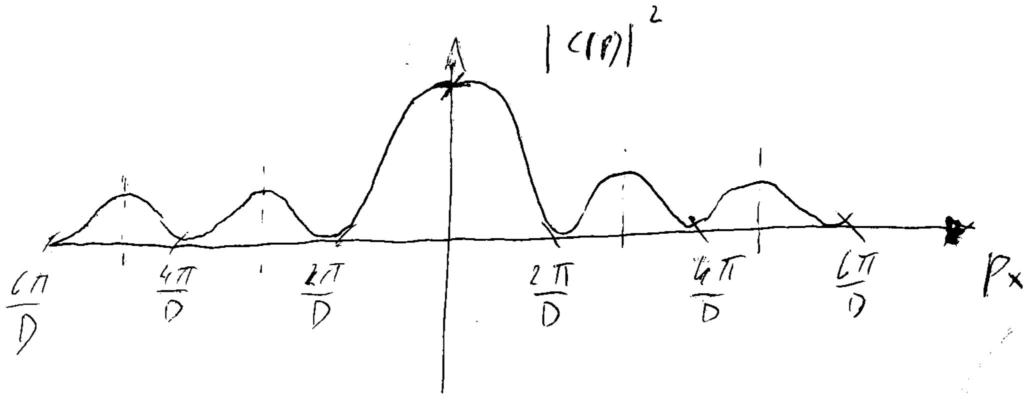
$$= \frac{e^{-i(p_x)D/2} - e^{i(p_x)D/2}}{-i\, p_x \sqrt{D}} = \frac{2 \operatorname{sen}\left[(p_x)\frac{D}{2}\right]}{p_x \sqrt{D}}$$

Grafico la funzione $C(p_x)$ considerando che si annulla per $p_x \frac{D}{2} = n\pi$ cioè

$$p_x = \frac{2n\pi}{D}$$



considero la funzione $|C(p)|^2$



Dal grafico di $|C(p)|^2$ si evidenzia che la probabilità di ottenere alcuni valori di p_x è nulla.

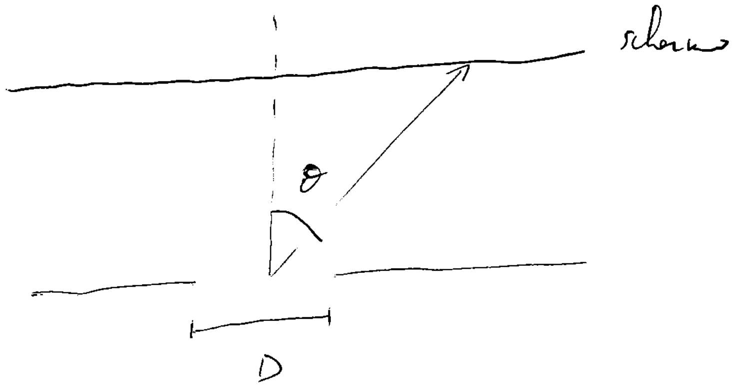
Questi valori sono dati dalla relazione

$$p_x = \frac{2n\pi}{D} \qquad \text{per } n = 1, 2, 3, 4, 5 \ldots$$

Nello svolgere i calcoli abbiamo considerato $\hbar = 1$ per semplificare.

Eliminando quest'ipotesi semplificative dobbiamo sostituire p_x con $\frac{p_x}{\hbar}$ che rappresenta la quantità di moto della particella.

$$\frac{p_x}{\hbar} = \frac{2n\pi}{D} \qquad n=1,2,3,4,5\ldots$$



ma $p_x = p \operatorname{sen}\theta$

e considerando la relazione di De Broglie

$$p_x = p \operatorname{sen}\theta = \frac{h}{\lambda}\operatorname{sen}\theta$$

Sostituendo

$$\frac{h}{\hbar}\,\frac{\operatorname{sen}\theta}{\lambda} = \frac{2n\pi}{D} \Rightarrow \cancel{2\pi}\,\frac{\operatorname{sen}\theta}{\lambda} = \frac{\cancel{2}n\cancel{\pi}}{D}$$

$$\operatorname{sen}\theta = \frac{n\lambda}{D} \qquad n=1,2,3,4,5 \quad \text{(condizione di buio)}$$

Equazioni di Schrodinger per particelle soggette ad un potenziale

L'equazione di Schrodinger per una particella soggetta ad un potenziale $V(x,y,z)$ indipendente dal tempo si scrive:

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

Si cerca una soluzione della forma

$\varphi(\vec{x},t) = \varphi_1(\vec{x})\,\varphi_2(t)$ e quindi separando la variabile temporale da quella spaziale si risolve il sistema

$$\begin{cases} i\hbar \dfrac{\partial}{\partial t}\varphi_2(t) = E_i\,\varphi_2(t) \\ \left(-\dfrac{\hbar^2}{2m}\dfrac{\partial^2}{\partial x_j^2} + V(\vec{x})\right)\varphi_1(\vec{x}) = E_i\,\varphi_1(\vec{x}) \end{cases}$$

La risoluzione della seconda equazione differenziale permette di trovare le autofunzioni $\varphi_{1i}(\vec{x})$ e gli autovalori E_i.

La soluzione della prima equazione differenziale non è altro che $\varphi_2(t) = \exp\left(-\frac{iE_i t}{\hbar}\right)$.

Una soluzione generica si scrive

$$\varphi(\vec{x},t) = \varphi_1(x)\,\varphi_2(t) = \sum_i A_i\,\varphi_{1i}(\vec{x})\,\varphi_i(t) =$$

$$= \sum_i A_i\,\varphi_{1i}(\vec{x}) \exp\left[-\frac{i E_i t}{\hbar}\right]$$

Se le autofunzioni $\varphi_{1i}(\vec{x})$ sono ortonormali vale la relazione

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi_{1i}^{*}(\vec{x})\,\varphi_{1j}(\vec{x})\,d^3x = \begin{cases} 1 & \text{se } i=j \\ 0 & \text{se } i\neq 0 \end{cases} = \delta(i,j)$$

i coefficienti A_i si determinano conoscendo la condizione iniziale data dalla funzione

$$\varphi(\vec{x}, t=0) = \sum_i{}' A_i \, \varphi_{1i}(\vec{x})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \varphi^*(\vec{x}, t=0) \, \varphi_{1i}(\vec{x}) \, d^3x = A_i .$$

Questo metodo viene utilizzato per esempio per calcolare gli orbitali dell'atomo di idrogeno.