

SOLUZIONI NUMERICHE EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER NON DIPENDENTE DAL TEMPO

Una delle più importanti equazioni della meccanica quantistica, se non la più importante, è l'equazione di Schrödinger. Si tratta di un'equazione differenziale nel campo complesso, caso particolare del più generale problema di Sturm-Liouville. L'equazione è di tipo lineare e il modulo quadro della sua soluzione fornisce un'ampiezza di probabilità che è interpretabile a livello statistico come la probabilità di trovare una particella in una determinata regione dello spazio. Essa ha avuto un ruolo centrale nella comprensione dell'atomo di idrogeno e del perché sono permessi soltanto alcuni valori discreti dell'energia dell'elettrone orbitante intorno al nucleo. Le soluzioni permesse dell'equazione di Schrödinger sono quelle a quadrato sommabili e per convenzione la loro norma quadra viene posta uguale ad uno, così che il significato probabilistico intrinseco nella funzione d'onda abbia senso. Un'importante proprietà è il principio di sovrapposizione, ovvero che la somma di due soluzioni è ancora soluzione, valido essendo le funzioni d'onda soluzioni di un'equazione differenziale lineare.

Purtroppo i problemi risolvibili analiticamente in meccanica quantistica sono pochi, per questo fin da subito si sono ricercati metodi alternativi per riuscire trovare i livelli energetici e le funzioni d'onda di determinati potenziali.

Uno dei metodi più importanti e facilmente applicabili è la teoria delle perturbazioni. Essa consiste nel risolvere prima l'hamiltoniana imperturbata per poi andare a calcolare analiticamente le varie correzioni degli autovalori e delle autofunzioni che dipenderanno dalla perturbazione stessa.

Risulta avere comunque grossi limiti a causa delle ipotesi da dover soddisfare per poterla applicare, come ad esempio che la perturbazione debba essere piccola in valore assoluto rispetto all'hamiltoniana imperturbata.

Il secondo metodo, sicuramente molto più potente del precedente, è quello numerico. I metodi numerici permettono di risolvere in maniera approssimata un'equazione differenziale, e trovare quindi il suo spettro di energia e le sue autofunzioni. Esistono vari algoritmi che permettono di risolvere i sistemi in meccanica quantistica. Tra i più utilizzati e con maggiore applicazione ci sono il metodo delle differenze finite semplici (SCD), il metodo di Numerov per il calcolo delle fasi di scattering ad esempio e il metodo di shooting.

Con il metodo delle differenze finite è possibile ad esempio trovare con l'accuratezza voluta i primi livelli energetici di un sistema non risolubile analiticamente come quello dell'oscillatore anarmonico, non trattabile con i metodi classici senza ipotesi molto restrittive. Esso consiste nel discretizzare l'intervallo di definizione scelto e prendere i valori assunti dalla funzione sui punti del reticolo. Più fine sarà il reticolo, migliore sarà l'approssimazione. Un reticolo troppo sottile però può portare ad errori numerici di macchina, per cui per ogni problema occorre testare il reticolo e l'intervallo più adatti.