Equazione di Schrödinger

dualità onda-particella $\rightarrow$ particella libera come onda piana

$$\Psi(x,t) \propto \exp\{i\,(k\,x - \omega\,t)\}$$

de Broglie $$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar\,k$$

Einstein $$E = h\,\nu = \hbar\,\omega$$

$\Rightarrow$ $$\Psi(x,t) \propto \exp\left\{\frac{i}{\hbar}(p\,x - E\,t)\right\}$$

NB - $\quad p\,x - E\,t = p^{\mu}\,x_{\mu} \quad \rightarrow \quad \Psi(x,t) \propto \exp\left(\frac{i}{\hbar}\,\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}\right)$

Equazione di Schrödinger

- derivata temporale: $$\frac{\partial \Psi}{\partial t} \quad \rightarrow \quad -i\,\frac{E}{\hbar}\,\Psi$$

$$\Longrightarrow \qquad i\,\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = E\,\Psi$$

- derivata 2^ spaziale: $$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} \quad \rightarrow \quad \left(i\,\frac{p}{\hbar}\right)^2 \Psi$$

$$\Longrightarrow \qquad -\hbar^2\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = p^2\,\Psi$$

$$E = \frac{p^2}{2\,m} \qquad \Longrightarrow \qquad \boxed{i\,\hbar\,\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2\,m}\,\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}}$$

Equazione di Schrödinger

- spazio 3D: $$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad \to \quad \nabla^2$$
- potenziale esterno *V*: $$E = \frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} + V(\vec{x})$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \underbrace{\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right\}}_{\text{Hamiltoniana } H} \Psi}$$

equazione di Schrödinger

Hamiltoniana *H*

operatore, i.e.
$H : f(\cdot) \to f(\cdot)$

NB - eq.ne lineare $\to$ principio di sovrapposizione

- non relativistica: 1^ ordine in *t*, 2^ ordine in *x*

$\to$ eq.ni relativistiche: Klein-Gordon, Dirac

Equazione di Schrödinger

Soluzione generale

Ipotesi – *H* indipendente dal tempo $\longrightarrow$ soluzione nella forma a variabili separate

$$\Psi(\vec{r},t) = u(\vec{r})\,T(t)$$

$$i\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}\Psi}{\mathrm{d}t} = H\,\Psi \quad \longrightarrow \quad i\,\hbar\,u(\vec{r})\,\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = H\,\{u(\vec{r})\,T(t)\}$$

dividendo per Ψ, poiché *H* non agisce su *T*:

$$i\,\hbar\,\frac{1}{T}\,\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{u}\,H\,\{u\}$$

i due membri sono funzione di variabili diverse $\longrightarrow$ uguaglianza possibile solo se ciascun membro = costante

Equazione di Schrödinger

$$i\,\hbar\,\frac{1}{T}\,\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = E = \frac{1}{u}\,H\,\{u\}$$ con E costante

i.e.

$$i\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}t} = E\,T(t) \qquad (1)$$

$$H\,\{u\} = E\,u(\vec{r}) \qquad (2)$$

- soluzione della (1): $T(t) = A\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}\,E\,t\right)$ $\qquad A = \mathrm{cost.}$
- soluzione della (2): eq.ne agli autovalori per l'operatore H
  $\longrightarrow$ la costante E assume il significato di energia

  H indip. da t $\longrightarrow$ eq.ne di Schrödinger degli stati stazionari

Equazione di Schrödinger

$$\longrightarrow \qquad \Psi(\vec{r},t) = A\,u(\vec{r})\,\exp\left(-\frac{i}{\hbar}E\,t\right)$$

NB - $\displaystyle\int_V \mathrm{d}\vec{r}\;|\,\Psi(\vec{r},t)\,|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad |\,A\,|^2 \int_V \mathrm{d}\vec{r}\,u^2(\vec{r}) = 1$ (★)

$\longrightarrow$ a meno di una fase, determino *A*

La (2) è una eq.ne differenziale lineare del 2^ ordine:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\,m}\nabla^2 + V(\vec{r})\right]\,u(\vec{r}) = E\,u(\vec{r})$$

Equazione di Schrödinger

potenziale V regolare ovunque $\longrightarrow$ soluzione è funzione continua con derivate 1^ e 2^ continue, i.e. $u(r) \in C^2$

(★) $\longrightarrow$ $u(\vec{r}) \in \mathcal{L}^2$ (funzioni a quadrato sommabile)

↓

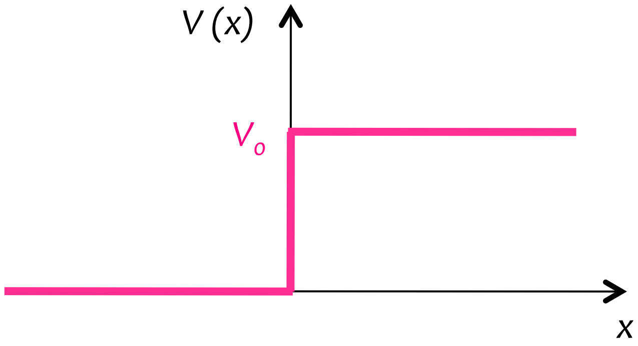
condizioni al contorno opportune (e.g., se $\vec{r}$ percorre tutto $\mathbb{R}^3$, tali condizioni sono fissate dal corretto comportamento asintotico della funzione per $r \to \infty$) determinano lo spettro degli autovalori dell'energia E $\longrightarrow$ $\boxed{\text{spettro discreto}}$

i.e., quantizzazione dell'energia risulta da normalizzazione della probabilità

Gradino di Potenziale

Fascio di particelle di massa *m* ed energia *E* in moto lungo asse *x* con velocità *v* → flusso incidente:

$$j_i = v = \frac{\hbar\, k}{m}$$



- $x < 0$: particelle libere → eq.ne degli stati stazionari:

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} = E\,u(x) \qquad (1)$$

- $x > 0$: particelle soggette a potenziale costante = V_o
→ eq.ne degli stati stazionari:

$$-\frac{\hbar^2}{2\,m}\frac{\mathrm{d}^2 u}{\mathrm{d}x^2} + V_0\,u(x) = E\,u(x) \qquad (2)$$

Gradino di Potenziale

$E < 0$

(1) $\longrightarrow$ $$u''(x) - \mu^2 u(x) = 0 \qquad (x < 0)$$

(2) $\longrightarrow$ $$u''(x) - \eta^2 u(x) = 0 \qquad (x > 0)$$

dove: $$\mu^2 = \frac{2m}{\hbar^2}|E| \qquad \eta^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 + |E|)$$

$\downarrow$

$$u(x) = \begin{cases} a_1 e^{-\mu x} + a_2 e^{\mu x} & (x < 0) \\ b_1 e^{-\eta x} + b_2 e^{\eta x} & (x > 0) \end{cases}$$

Gradino di Potenziale

1. $$\lim_{|x|\to\infty} u(x) = \text{finito} \qquad \to \qquad a_1 = b_2 = 0$$

i.e. $$u(x) = \begin{cases} a\,\mathrm{e}^{\mu\,x} & (x<0) \\ b\,\mathrm{e}^{-\eta\,x} & (x>0) \end{cases}$$

2. $$\lim_{x\to 0^-} u(x) = \lim_{x\to 0^+} u(x) \qquad \to \qquad a = b \qquad (\blacklozenge)$$

$$\downarrow$$

3. $$\lim_{x\to 0^-} u'(x) = \lim_{x\to 0^+} u'(x) \qquad \to \qquad \mu\,a = -\,\eta\,b \qquad \mu = -\,\eta$$

$\rightarrow$ no soluzioni per $E < \min V(x)$

(risultato, in accordo con la teoria classica, indipendente dalla forma del potenziale)

Gradino di Potenziale

$E > 0$

- $E > V_0$

(1) $\longrightarrow$ $$u''(x) + k^2 u(x) = 0 \qquad (x < 0)$$

(2) $\longrightarrow$ $$u''(x) + k'^2 u(x) = 0 \qquad (x > 0)$$

dove: $$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E \qquad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V_0)$$

$\downarrow$

$$u(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-ikx} & (x < 0) \\ C\,\mathrm{e}^{ik'x} + D\,\mathrm{e}^{-ik'x} & (x > 0) \end{cases}$$

Gradino di Potenziale

1. fascio incidente ($x < 0$): $\mathrm{e}^{i\,k\,x} \quad \rightarrow \quad A = 1$

2. solo onde progressive per $x > 0$ $\quad \rightarrow \quad D = 0$

$$\longrightarrow \qquad u(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{i\,k\,x} + B\,\mathrm{e}^{-i\,k\,x} & (x < 0) \\ C\,\mathrm{e}^{i\,k'\,x} & (x > 0) \end{cases}$$

3. $$\lim_{x \to 0^-} u(x) = \lim_{x \to 0^+} u(x) \quad \rightarrow \quad 1 + B = C$$

4. $$\lim_{x \to 0^-} u'(x) = \lim_{x \to 0^+} u'(x) \quad \rightarrow \quad i\,k\,(1 - B) = i\,k'\,C$$

$$\longrightarrow \qquad B = \frac{k - k'}{k + k'} \qquad C = \frac{2\,k}{k + k'}$$

Gradino di Potenziale

✓ classicamente il fascio proseguirebbe indisturbato lungo *x*; caso quantistico: barriera provoca riflessione → flusso riflesso:

$$j_r = -v\,|B|^2 = -\frac{\hbar\,k}{m}\,|B|^2$$

→ coefficiente di riflessione: $R = \frac{|j_r|}{j_i} = |B|^2$

✓ parte del fascio incidente viene trasmesso: $j_t = \frac{\hbar\,k'}{m}\,|C|^2$

→ coefficiente di trasmissione: $T = \frac{j_t}{j_i} = \frac{k'}{k}\,|C|^2$

NB - $R + T = 1$

- $E \gg V_0 \quad \rightarrow \quad k = k' \quad \rightarrow \quad B = 0, C = 1$

Gradino di Potenziale

- $E < V_o$

(1) $\longrightarrow$ $$u''(x) + k^2 u(x) = 0 \qquad (x < 0)$$

(2) $\longrightarrow$ $$u''(x) - \bar{k}^2 u(x) = 0 \qquad (x > 0)$$

dove: $$\bar{k}^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)$$

$\downarrow$

$$u(x) = \begin{cases} A\,\mathrm{e}^{ikx} + B\,\mathrm{e}^{-ikx} & (x < 0) \\ C\,\mathrm{e}^{\bar{k}x} + D\,\mathrm{e}^{-\bar{k}x} & (x > 0) \end{cases}$$

Gradino di Potenziale

1. fascio incidente ($x < 0$): $\mathrm{e}^{i\,k\,x} \quad \rightarrow \quad A = 1$

2. $\lim_{|x| \to \infty} u(x) = \text{finito} \quad \rightarrow \quad C = 0$

$$\longrightarrow \qquad u(x) = \begin{cases} \mathrm{e}^{i\,k\,x} + B\,\mathrm{e}^{-i\,k\,x} & (x < 0) \\ D\,\mathrm{e}^{-\bar{k}\,x} & (x > 0) \end{cases}$$

3. $\lim_{x \to 0^-} u(x) = \lim_{x \to 0^+} u(x) \quad \rightarrow \quad 1 + B = D$

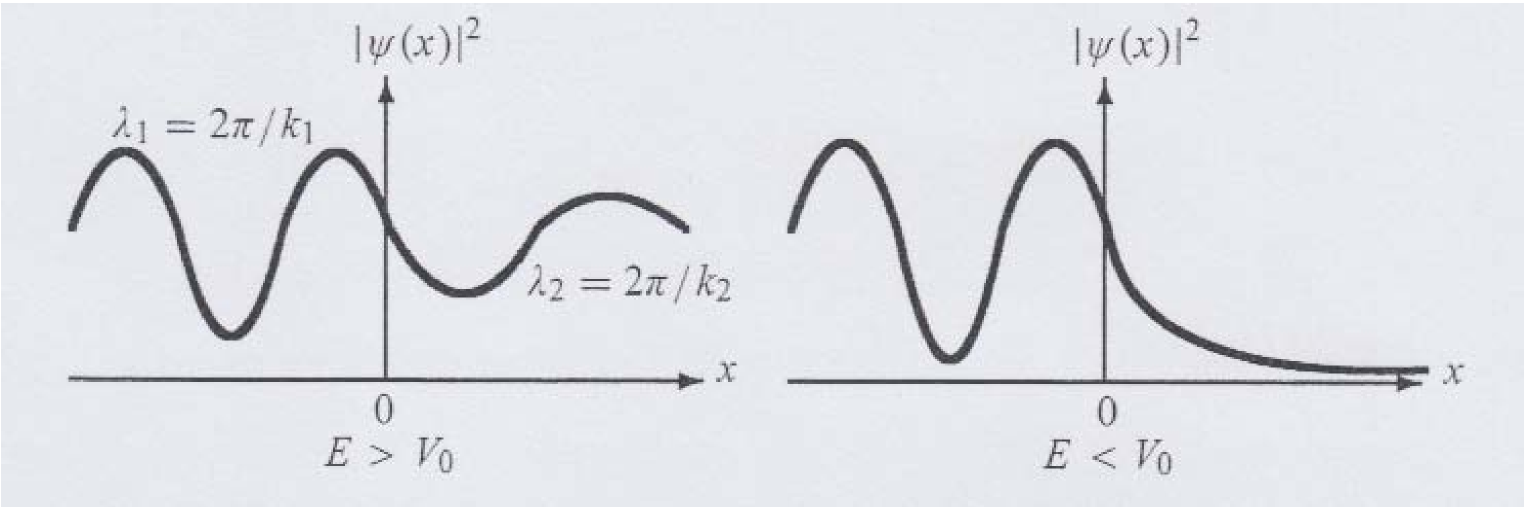
4. $\lim_{x \to 0^-} u'(x) = \lim_{x \to 0^+} u'(x) \quad \rightarrow \quad i\,k\,(1 - B) = -\bar{k}\,D$

$$\longrightarrow \qquad B = \frac{k - i\,\bar{k}}{k + i\,\bar{k}} \qquad\qquad D = \frac{2\,k}{k + i\,\bar{k}}$$

Gradino di Potenziale

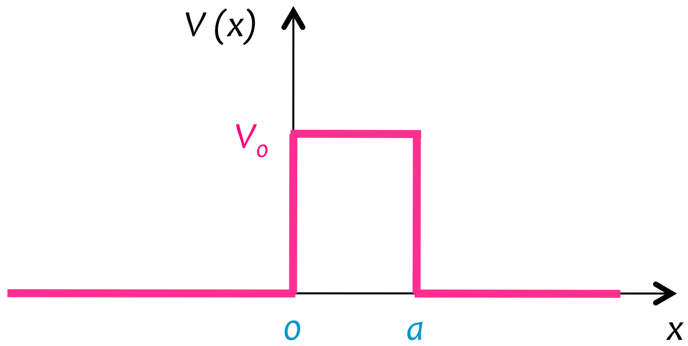
- ✓ $|B| = 1 \qquad \rightarrow \qquad j_r = j_i$ particelle che urtano la barriera, rimbalzano (come caso classico)

- ✓ $|D|^2 = \dfrac{4\,k^2}{k^2 + \bar{k}^2} = 4\,\dfrac{E}{V_0} \neq 0$ probabilità non nulla di trovare particelle in $x > 0$ (contrasto con caso classico: torna per $V_0 \rightarrow \infty$)



Barriera di Potenziale

$$V(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ V_0 & 0 \le x \le a \\ 0 & x > a \end{cases}$$



$\boxed{E > V_o}$

Classicamente: particella che s'avvicina alla barriera da sinistra con impulso

$$p_1 = \sqrt{2\,m\,E}$$

entra nella regione della barriera e viene rallentata a un impulso

$$p_2 = \sqrt{2\,m\,(E - V_0)}$$

Barriera di Potenziale

che conserva fino a quando raggiunge $x = a$, oltre il quale accelera a un impulso $p_3 = p_1$, che mantiene per tutto $x > a$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + k_1^2\right)\,\psi(x) = 0 \qquad\qquad x \le 0, \quad x \ge a$$

$$k_1 = \frac{\sqrt{2\,m\,E}}{\hbar}$$

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + k_2^2\right)\,\psi(x) = 0 \qquad\qquad 0 < x < a$$

$$k_2 = \frac{\sqrt{2\,m\,(E - V_0)}}{\hbar}$$

Barriera di Potenziale

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A\, e^{i\,k_1\,x} + B\, e^{-i\,k_1\,x} & x \leq 0 \\ \psi_2(x) = C\, e^{i\,k_2\,x} + D\, e^{-i\,k_2\,x} & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = E\, e^{i\,k_1\,x} & x \geq a \end{cases}$$

imponiamo continuità della f. d'o. e della sua derivata spaziale in corrispondenza dei confini tra le varie regioni di *x*, i.e.

$\boxed{x = 0}$

$$\psi_1(0) = \psi_2(0) \qquad \psi_1'(0) = \psi_2'(0)$$

$$A + B = C + D \qquad k_1\,(A - B) = k_2\,(C - D)$$

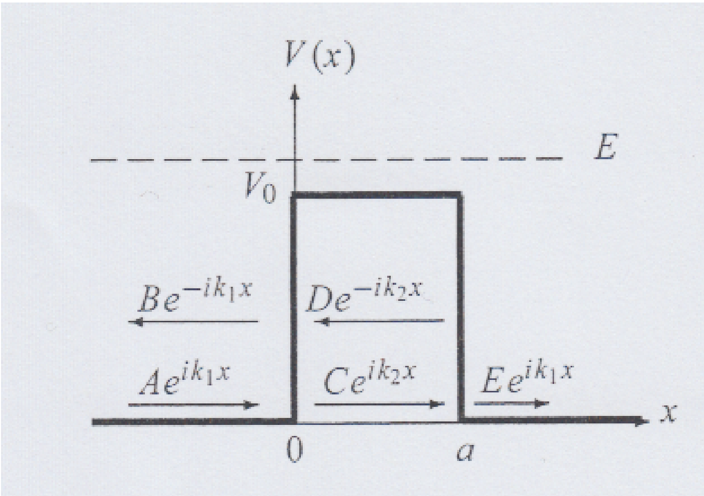
Barriera di Potenziale

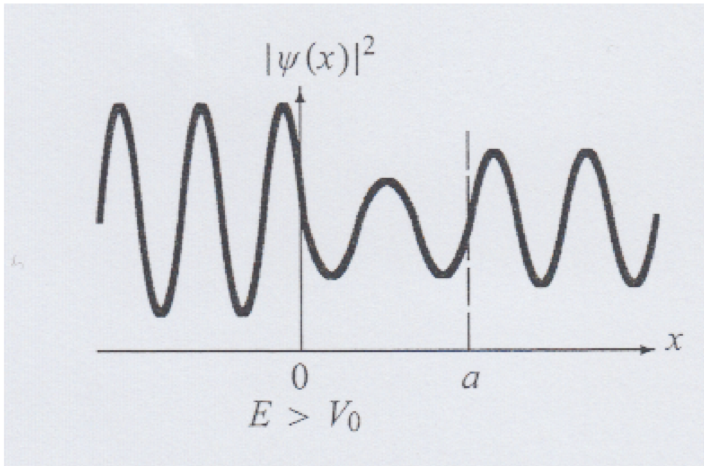
$\boxed{x = a}$

$$\psi_2(a) = \psi_3(a) \qquad \psi_2'(a) = \psi_3'(a)$$

$$C\,e^{i\,k_2\,a} + D\,e^{-i\,k_2\,a} = E\,e^{i\,k_1\,a} \qquad k_2\,(C\,e^{i\,k_2\,a} - D\,e^{-i\,k_2\,a}) = k_1\,E\,e^{i\,k_1\,a}$$

da cui ricaviamo le costanti *B*, *C*, *D* ed *E* in termini di *A*





Barriera di Potenziale

- ✓ coefficiente di trasmissione

$$T = \frac{k_1\,|E|^2}{k_1\,|A|^2} = \left\{1 + \frac{\sin^2[\lambda\,\sqrt{\epsilon - 1}]}{4\,\epsilon\,(\epsilon - 1)}\right\}^{-1}$$

$$\lambda = \frac{a}{\hbar}\,\sqrt{2\,m\,V_0} \qquad\qquad \epsilon = \frac{E}{V_0}$$

- ✓ coefficiente di riflessione

$$R = \frac{k_1\,|B|^2}{k_1\,|A|^2} = \left\{1 + \frac{4\,\epsilon\,(\epsilon - 1)}{\sin^2[\lambda\,\sqrt{\epsilon - 1}]}\right\}^{-1}$$

Barriera di Potenziale

- $E >> V_0 \quad \rightarrow \quad \epsilon >> 1 \quad \longrightarrow$
$$\epsilon\,(\epsilon-1) \simeq \epsilon^2$$
$$\lambda\,\sqrt{\epsilon-1} \simeq \lambda\,\sqrt{\epsilon} = \frac{a}{\hbar}\sqrt{2\,m\,E}$$

$$\longrightarrow \quad \frac{\sin^2[\lambda\,\sqrt{\epsilon-1}\,]}{4\,\epsilon\,(\epsilon-1)} \to 0 \quad \longrightarrow \quad T \to 1, \quad R \to 0$$

per energie *E >> V₀*, le particelle non sentono l'effetto della barriera di potenziale $\longrightarrow$ trasmissione totale

- $\lambda\,\sqrt{\epsilon-1} = n\,\pi \quad (n \in \mathbb{N}) \quad \rightarrow \quad T = 1$

$$\longrightarrow \quad E_n = V_0 + \frac{n^2\,\pi^2\hbar^2}{2\,m\,a^2}$$

$\longrightarrow$ risonanza (assente in fisica classica) dovuta a interferenza costruttiva tra onda incidente e onda riflessa

Barriera di Potenziale

$\boxed{E < V_0}$ classicamente: riflessione totale in $x = 0$ $\rightarrow$ nessuna particella può penetrare la barriera (in corrispondenza di essa avrebbe energia cinetica < 0)

Come caso precedente, eccetto per la sostituzione:

$$k_2 \quad \rightarrow \quad i\,k_2 = i\,\frac{\sqrt{2\,m\,(V_0 - E)}}{\hbar}$$

per cui:

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A\,e^{i\,k_1\,x} + B\,e^{-i\,k_1\,x} & x \leq 0 \\ \psi_2(x) = C\,e^{k_2\,x} + D\,e^{-k_2\,x} & 0 < x < a \\ \psi_3(x) = E\,e^{i\,k_1\,x} & x \geq a \end{cases}$$

Barriera di Potenziale

Imponendo continuità della f. d'o. e della sua derivata spaziale in corrispondenza dei confini tra le varie regioni di *x*, si ottengono le seguenti relazioni tra le costanti *A*, *B*, *C*, *D* ed *E*

$$A + B = C + D$$

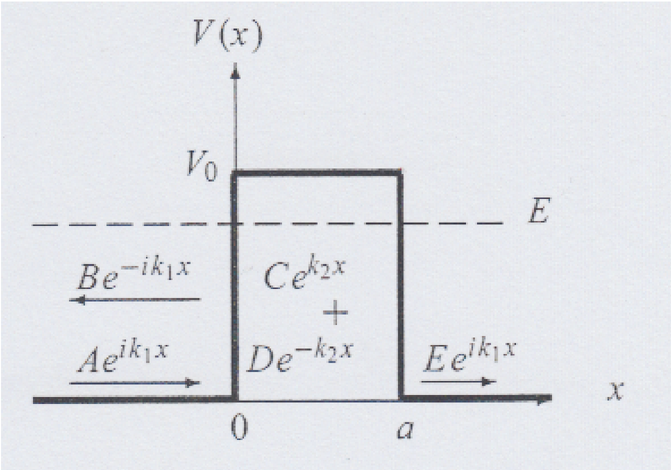
$$i\,k_1\,(A - B) = k_2\,(C - D)$$

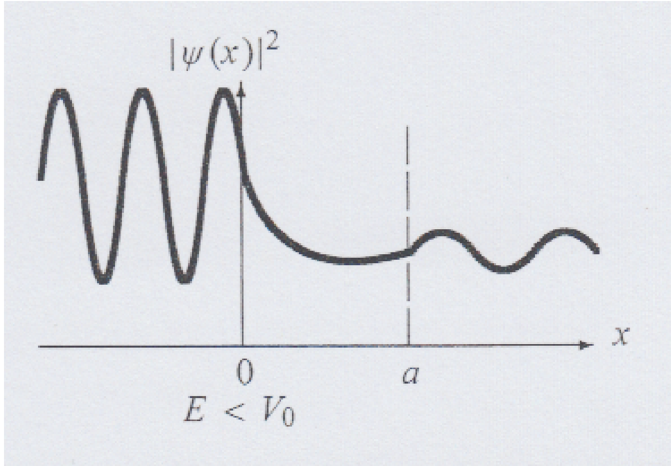
$$C\,e^{k_2\,a} + D\,e^{-k_2\,a} = E\,e^{i\,k_1\,a}$$

$$k_2\,(C\,e^{k_2\,a} - D\,e^{-k_2\,a}) = i\,k_1\,E\,e^{i\,k_1\,a}$$

da cui è possibile ricavare l'espressione della funzione d'onda nelle varie regioni e, quindi, i coefficienti di trasmissione e riflessione

Barriera di Potenziale





NB – $|\psi|^2 \neq 0$ nella regione $x \geq a$ $\rightarrow$ probabilità per la trasmissione oltre la barriera non è nulla, come nel caso classico $\rightarrow$ effetto tunnel: oggetti quantistici possono passare attraverso barriere classicamente impenetrabili. Effetto puramente quantistico la cui origine è nella natura ondulatoria della materia.

Barriera di Potenziale

✓ coefficiente di trasmissione

$$T = \left\{ 1 + \frac{\sinh^2(\lambda \sqrt{1-\epsilon})}{4\epsilon\,(1-\epsilon)} \right\}^{-1}$$

✓ coefficiente di riflessione

$$R = \frac{T}{4\epsilon\,(1-\epsilon)} \sinh^2\left(\lambda \sqrt{1-\epsilon}\right)$$

NB – Limite $\hbar \to 0 \quad \longrightarrow \quad \lambda \to \infty \quad \longrightarrow \quad \sinh^2\left(\lambda \sqrt{1-\epsilon}\right) \to \infty$

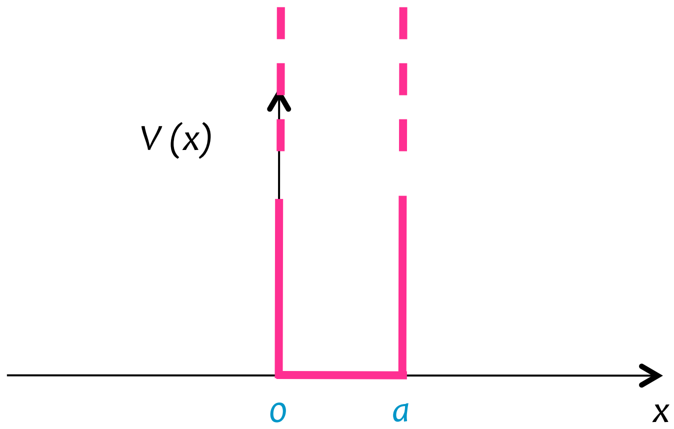
$$\longrightarrow \qquad T \sim \frac{4\epsilon\,(1-\epsilon)}{\sinh^2\left(\lambda \sqrt{1-\epsilon}\right)} \to 0 \qquad R \to 1$$

ritroviamo il caso classico

Pozzo infinito di Potenziale

Particella di massa *m* confinata a muoversi all'interno di un pozzo di potenziale infinitamente profondo

$$V(x) = \begin{cases} +\infty & x < 0 \\ 0 & 0 \leq x \leq a \\ +\infty & x > a \end{cases}$$



Classicamente la particella rimane confinata nel pozzo, muovendosi avanti e indietro con impulso

$$p = \sqrt{2mE}$$

come risultato delle ripetute riflessioni dalle pareti del pozzo

Pozzo infinito di Potenziale

1) $x < 0, \quad x > a \quad \rightarrow \quad \psi(x) = 0$

2) $x \in [0, a] \quad \rightarrow \quad \left(\frac{d^2}{dx^2} + k^2 \right) \psi(x) = 0$

$$k = \frac{\sqrt{2\, m\, E}}{\hbar}$$

$$\longrightarrow \quad \psi(x) = A'\, e^{i\, k\, x} + B'\, e^{-i\, k\, x} = A\, \sin(k\, x) + B\, \cos(k\, x)$$

$$\psi(0) = 0 \quad \rightarrow \quad B = 0 \quad \longrightarrow \quad \psi(x) = A\, \sin(k\, x)$$

$$\psi(a) = 0 \quad \rightarrow \quad A\, \sin(k\, a) = 0 \quad \rightarrow \quad k_n\, a = n\, \pi \qquad (n \in \mathbb{N})$$

$$\longrightarrow \quad E_n = \frac{p_n^2}{2\, m} = \frac{\hbar^2\, k_n^2}{2\, m} = n^2\, \frac{\pi^2\, \hbar^2}{2\, m\, a^2}$$

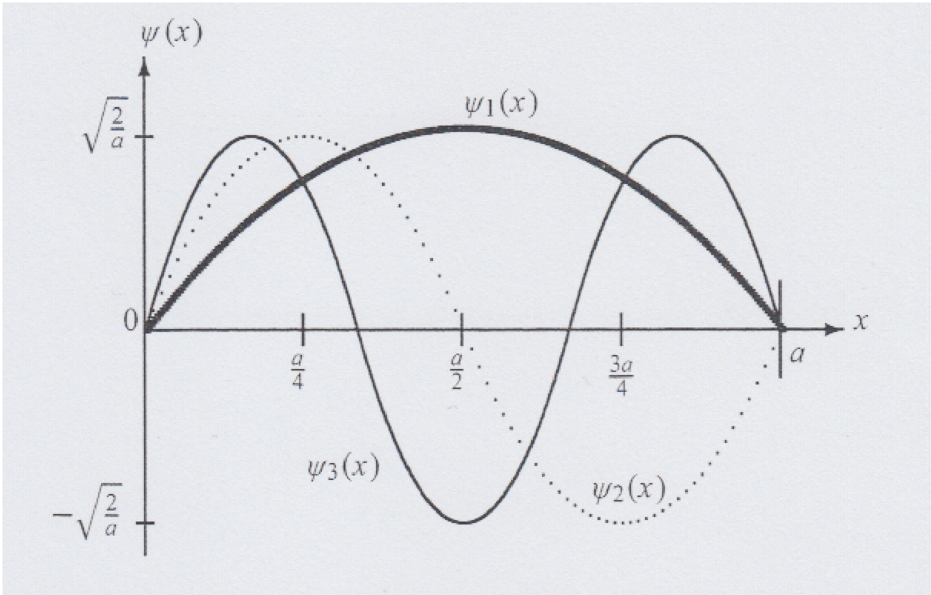
Pozzo infinito di Potenziale

contrariamente a quello che accade in fisica classica, lo spettro dei possibili valori dell'energia è discreto

$$\int_0^a \mathrm{d}x\, |\psi_n(x)|^2 = 1 \quad \rightarrow \quad |A|^2 \int_0^a \mathrm{d}x\, \sin^2\left(n\,\pi\,\frac{x}{a}\right) = 1 \quad \longrightarrow \quad A = \sqrt{\frac{2}{a}}$$

e, quindi:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}}\,\sin\left(n\,\pi\,\frac{x}{a}\right)$$



NB – livello di energia più bassa:

$$n = 1 \quad \rightarrow \quad E_1 = \frac{\pi^2\,\hbar^2}{2\,m\,a^2}$$

energia di punto zero