



paolo carlizza (paolo.carlizza)

FISICA ONDULATORIA: COME RISOLVERE LE EQUAZIONI SCHROENDIGER

22 February 2013

Nella fisica atomica, ai primi del 1900, l'atomo era trattato in maniera deterministica, con un nucleo di protoni e neutroni al centro ed elettroni, piu' esterni che descrivevano orbite circolari attorno ad esso, a seconda dello stato energetico. Si parlava allora di stati energetici quantici degli elettroni, caratterizzati da lettere alfabetiche maiuscole e combinazioni di lettere alfabetiche minuscole con numeri.

La condizione di quantizzazione nell'atomo, il cui modello era di Bohr, nasceva dal fatto di tenere in conto che l'elettrone non irradiasse, durante la sua orbita e perdesse energia, per non essere risucchiato dal nucleo e si risolveva con l'ipotesi che all'elettrone stesso dovesse avere associata un'onda stazionaria, con un numero di lunghezze d'onda pari alla lunghezza dell'orbita attorno al nucleo.

Poi subentrano dopo il 1920 i contributi di Einstein, Bose, Fermi e Dirac, che danno all'onda associata all'elettrone una caratteristica statistica, che porta all'equazione fondamentale della meccanica ondulatoria, l'equazione di Schroendinger.

Data la complessita', l'argomento e' suscettibile di modifiche successive. Infine, piu' di qualche passaggio logico e' ritenuto scontato, altrimenti dovrebbe introdursi un corso preliminare di matematica sugli operatori quantistici.

Analisi introduttiva

Nuovi studi statistici, intorno al 1920 fanno si' che all'elettrone venga associata una funzione d'onda complessa $\psi(P)$ con P, posizione coordinata del punto, tale che il suo modulo al quadrato, producesse la densita' di probabilita' di trovare l'elettrone in quel punto. L'elettrone diventa cosi' un'onda di probabilita' e la sua posizione segue l'andamento di un'onda, sia nel tempo che nello spazio. Questa funzione d'onda e' regolata da equazioni differenziali dette di Schroendinger, che derivano dall'aver definito degli operatori di posizione, quantita' di moto ed energia. Per farla breve, omettendo di parlare degli operatori posizione e quantita' di moto, possiamo introdurre l'operatore di energia totale, detto hamiltoniano, che s'identifica in

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V$$

dove m e' la massa della particella sotto studio (l'elettrone) e $\hbar$ il rapporto tra la costante di Planck h e 2π . La somma di questi due termini e' data dall'energia cinetica piu' l'energia potenziale V . L'operatore si applica alla funzione d'onda $\Psi(P)$ e per sapere l'andamento spazio temporale della funzione d'onda occorre eguagliare questa applicazione funzionale all'applicazione dell'operatore evoluzione temporale su $\psi(P)$, in modo da aversi l'equazione di Schoendiger completa nello spazio e nel tempo, ossia:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi + V\psi = i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}$$

Questa eguaglianza deriva da un teorema fondamentale, conseguente a postulati della meccanica quantistica.

Metodo di calcolo dell'equazione con le variabili separabili

Poiche' la variabile Ψ , dipende dalle coordinate spaziali x,y,z e la variabile t del tempo, la funzione Ψ puo' pensarsi scritta come il prodotto di quattro funzioni, dipendenti ognuna da ciascuna variabile. ossia:

$$\Psi = X(x) \cdot Y(y) \cdot Z(z) \cdot T(t)$$

Ricordando che $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$,

con alcune manipolazioni, per esempio, dividendo ambo i membri per il prodotto $X(x)Y(y)Z(z)T(t)$, si ottiene alla fine:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{X} \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} + \frac{1}{Y} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} + \frac{1}{Z} \cdot \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} \right) + V = i\hbar \frac{1}{T} \cdot \frac{\partial T}{\partial t}$$

Trattando il caso del particella libera con potenziale $V=0$ costante, si ha: L'unica condizione in cui l'uguaglianza viene realizzata e' quando i due membri sono delle costanti, ossia che si abbia la relazione

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = i\hbar k_t$$

Per questo abbiamo la scomposizione in quattro equazioni differenziali, le prime tre di secondo grado e l'ultima di primo grado.

Avremo le seguenti relazioni:

$$\frac{1}{X} \frac{\partial^2 X}{\partial x^2} = k_x^2$$

$$\frac{1}{Y} \frac{\partial^2 Y}{\partial y^2} = k_y^2$$

$$\frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial z^2} = k_z^2$$

$$\frac{1}{T} \frac{\partial T}{\partial t} = k_t$$

L'ultima equazione differenziale nel tempo e' di primo ordine, e per comodita' di calcoli successivi si pone:

$$i\hbar k_t = E$$

Quest'espressione ha le dimensioni di un'energia, ed E rappresenta l'energia totale del sistema. La soluzione della quarta equazione differenziale, nel tempo, e' del tipo $T(t) = C_0 \exp\left(-i\frac{E}{\hbar}t\right)$. Per la non stazionarieta' della funzione d'onda, in questa sede non ci saranno approfondimenti, ma in genere una teoria un poco piu' avanzata puo' farci capire la sua configurazione totale si sposta nello spazio, espandendosi, ma diminuendo d'intensita'. Nel caso unidimensionale della coordinata x, nel tempo, il modulo al quadrato della funzione d'onda nello stato fondamentale, assume un andamento quasi a campana, che si sposta nella direzione positiva dell'asse dei tempi, allargandosi e diminuendo in ampiezza.

Ritornando al caso spaziale tridimensionale, che stavamo descrivendo, ognuna delle altre tre equazioni di secondo ordine nelle variabili x,y,z danno le soluzioni:

$$\begin{aligned} X(x) &= C_1 \sin(k_x x) + C_2 \cos(k_x x) \\ Y(y) &= C_3 \sin(k_y y) + C_4 \cos(k_y y) \\ Z(z) &= C_5 \sin(k_z z) + C_6 \cos(k_z z) \end{aligned}$$

che derivano da combinazioni lineari di esponenziale ad esponente complesso e dalla formula di Eulero per i numeri complessi.

Possiamo trovare gli integrali generali, mentre le soluzioni particolari si trovano imponendo le condizioni al contorno.

Supponendo il problema simmetrico nelle tre coordinate, si puo' trovare l'energia l'energia corrispondente agli stati della funzione ψ . Considerando una formula precedente, che lega le costanti k_i , con $i=x, y, z$ ed imponendo l'uguaglianza:

$$k = k_x = k_y = k_z$$

si ottiene:

$$E = \frac{3\hbar^2 k^2}{8\pi^2 m}$$

con $\hbar$ costante di Planck. L'energia in questo caso non dipende da numeri quantici ed assume tutti i valori possibili.

Le condizioni al contorno devono essere in modo che la $\Psi(P,t) = \psi(P)T(t)$ non diverga e sia l'integrale del modulo al quadrato della autofunzione pari ad uno, dove P sono le tre coordinate del punto nello spazio. Se si calcola il prodotto dell'autofunzione per il suo complesso coniugato, ossia

$$\Psi(P,t)\Psi^*(P,t) = |\psi(P)|^2$$

essendo

$$\Psi(P,t) = \psi(P) \exp\left(-\frac{iE}{\hbar}t\right)$$

che rappresenta la densita' di probabilita' di trovare la particella in un punto dello spazio, si ha che questo prodotto non dipende dal tempo e $\psi(P)$ costituisce un'onda stazionaria.

Se la soluzione è in x, y e z la scriviamo equivalentemente, come $\psi(\xi) = A \exp(ik\xi) + B \exp(-ik\xi)$ con $\xi = x$ o y o z e le applichiamo l'operatore quantita' di moto, si ha:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\xi)}{\partial \xi} = p\psi(\xi)$$

si ottengono come autovalori le quantita' di moto $\hbar k_e - \hbar k$, ossia due quantita' di moto in due direzioni opposte, per cui la particella si muove ambo i sensi con probabilita' proporzionali $|A|^2$ e $|B|^2$. Infatti, $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ e $k = \frac{2\pi}{\lambda}$; il loro prodotto e' pari a $\frac{h}{\lambda}$, che e' la quantita' di moto p (relazione di De Broglie). Inoltre, se noi abbiamo due autofunzioni ψ_1 e ψ_2 in combinazione lineare, il valore medio di una grandezza misurata e' la combinazione lineare tra le misure di ogni ψ_i , secondo coefficienti di proporzionalita' che sono le probabilita' di ottenere ogni misura.

Possiamo fare un esempio con una buca di potenziale a due dimensioni, che vale:

$V=0$ per

$$-\frac{L_x}{2} < x < \frac{L_x}{2}$$

$$-\frac{L_y}{2} < y < \frac{L_y}{2}$$

e $V=\infty$ per il resto del dominio x,y .

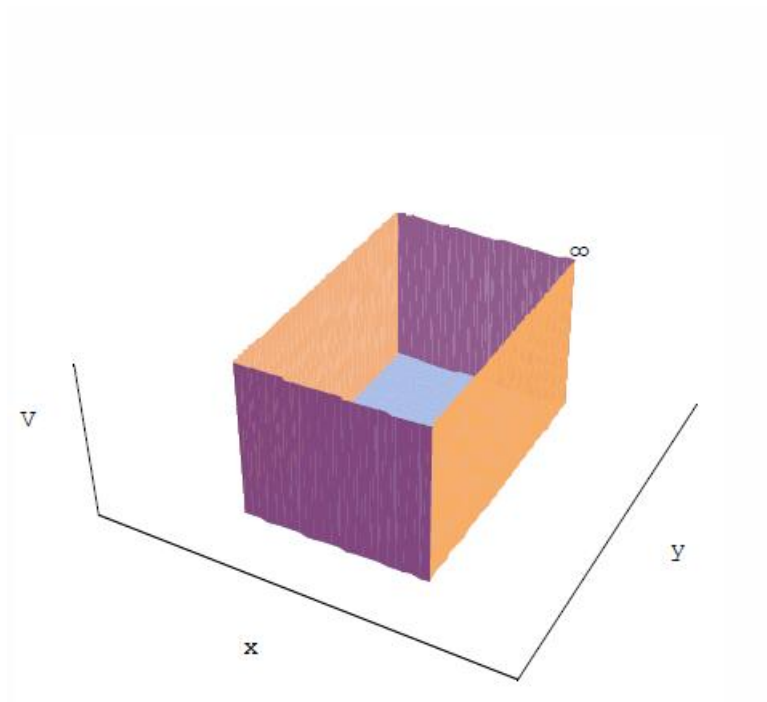


Fig. 1. Buca di potenziale bidimensionale

Imponendo una soluzione $\psi((x,y) = u_x(x) + u_y(y)$, si ottiene da $H\psi = E\psi$, la parte stazionaria dell'equazione di Schroendinger, una doppia uguaglianza:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u_x(x)}{\partial x^2} = E u_x(x)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 u_y(y)}{\partial y^2} = E u_y(y)$$

per uguaglianza di parti uguali fra i due membri dell'equazione di Schroendinger.

Le condizioni al contorno sono:

$$u_x\left(\frac{-L_x}{2}\right) = u_x\left(\frac{L_x}{2}\right) = 0$$

$$u_y\left(\frac{-L_y}{2}\right) = u_y\left(\frac{L_y}{2}\right) = 0$$

,

perche' la funzione d'onda si annulla ai margini di una barriera di potenziale infinita, Per avere poi soluzioni soluzioni del tipo:

$$u_x = \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin^2(n_x + 1) \frac{\pi}{2} + \cos \frac{n_x \pi x}{L} \sin^2(n_x \frac{\pi}{2})$$

$$u_y = \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin^2(n_y + 1) \frac{\pi}{2} + \cos \frac{n_y \pi y}{L} \sin^2(n_y \frac{\pi}{2})$$

con energie quantizzate, proprio perche' la particella non e' piu' libera, le quali valgono secondo i numeri quantici n_x ed n_y :

$$E_{n_x} = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2L_x^2} \quad E_{n_y} = \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2L_y^2}$$

Le energie totali sono la somma delle energie quantizzate secondo x e y, ossia:

$$E(n_x, n_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2} \left(\frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} \right)$$

Anche la funzione d'onda $\psi(x,y)$ dipende dai numeri quantici n_x e n_y e per ogni coppia di essi ha una sua configurazione nello spazio. Sotto, gli andamenti della probabilita' $|\psi(m,n)|^2$, per le coppie di numeri quantici (1,1), (1,2), (2,1), (2,3), (2,4),(4,2).

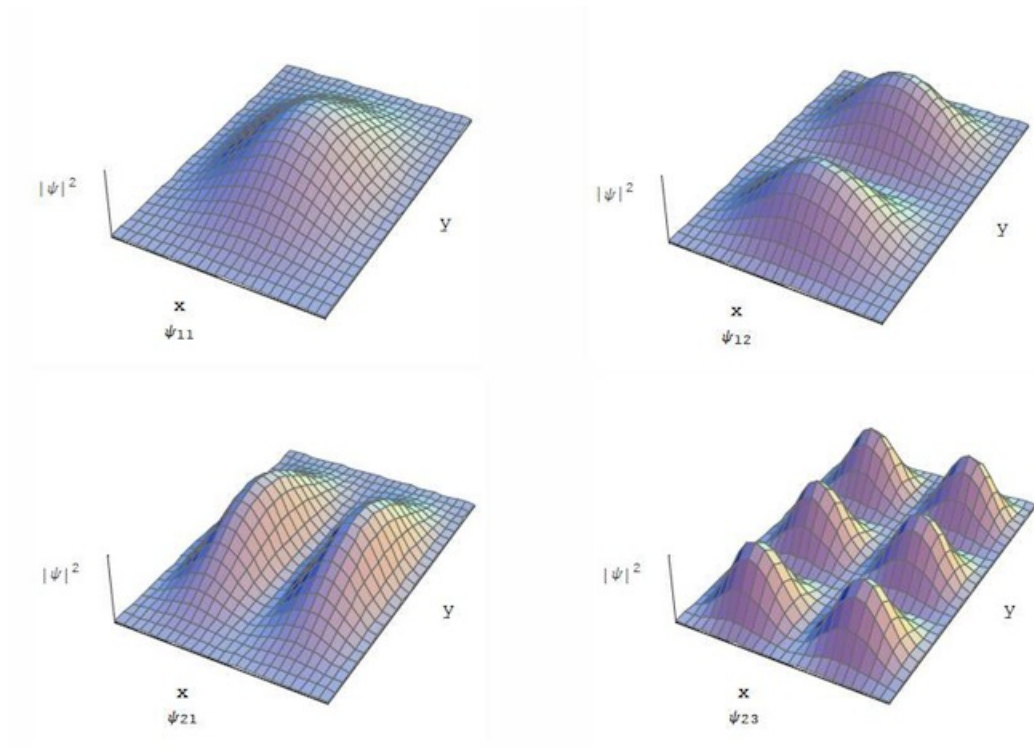


Fig. 2a. Stati $(1,1), (1,2), (2,1), (2,3)$ della probabilit  bidimensionale di trovare una particella, in una buca di potenziale.

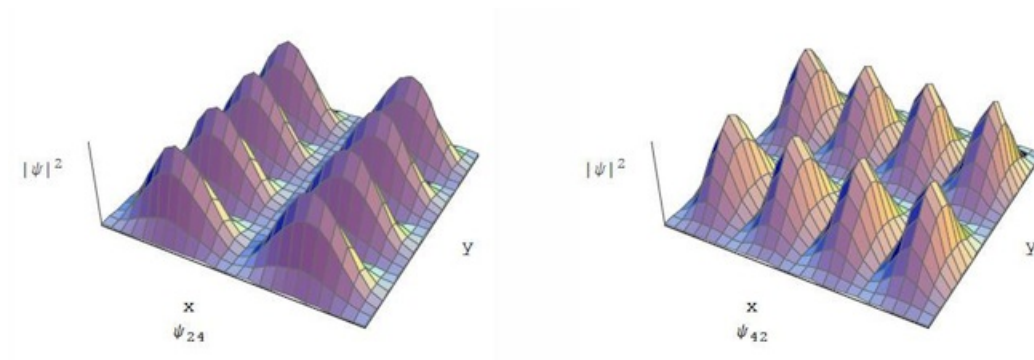


Fig. 2b. Probabilit  di trovare la particella in una buca di potenziale bidimensionale con i numeri quantici $(2,4)$ e $(4,2)$.

Estratto da ["http://www.electroyou.it/mediawiki/index.php?title=UsersPages:Paolo.carlizza:fisica-ondulatoria-come-risolvere-le-equazioni-schroendiger"](http://www.electroyou.it/mediawiki/index.php?title=UsersPages:Paolo.carlizza:fisica-ondulatoria-come-risolvere-le-equazioni-schroendiger)