Equazione di Schrödinger (non relativistica)

L'equazione di Schrödinger, formulata da Erwin Schrödinger nel 1926, costituisce uno tra i primi approcci quantitativi proposti per la modellizzazione dei fenomeni della meccanica quantistica.

É basata su un modello fenomelogico che prevede un certo numero di ipotesi iniziali abbastanza restrittive:

1. I fenomeni di creazione e annihilazione delle particelle sono trascurabili e quindi che il numero di particelle resta costante mentre il processo evolve.
2. Tutte le velocità in gioco sono sufficientemente piccole da rendere valida un'approssimazione non relativistica.

.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Le due ipotesi sono interdipendenti. Si consideri, ad esempio, un processo di collisione in cui due particelle di uguale massa si scontrano in modo tale che la velocità di ciascuna particella al centro di massa del sistema sia vicina alla velocità della luce. In queste circostanze potrebbe essere disponibile energia cinetica sufficiente per la creazione di ulteriori particelle di massa uguale o diversa. Se, d'altra parte, le velocità sono piccole e l'energia cinetica disponibile è altrettanto piccola, allora i fenomeni di creazione non possono aver luogo: sono vietati dalla legge di conservazione dell'energia. C'è una importante eccezione a questa condizione. Poiché la massa a riposo del fotone è zero, i fotoni possono sempre essere creati o distrutti (cioè, la luce può essere emessa o assorbita) anche se tutte le altre particelle con massa a riposo diversa da zero si muovono a velocità non relativistiche. Se interpretiamo la teoria di Schrödinger in senso lato i fenomeni di assorbimento e di emissione della luce sono contemplati.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Dobbiamo quindi modificare le ipotesi come segue:

1. Sono esclusi i fenomeni di creazione e annihilazione di particelle con massa m, mentre i fotoni possono essere emessi e assorbiti.
2. Tutte le particelle materiali si muovono a velocità ridotte e possono quindi essere descritte non relativisticamente.
3. Il fotone, che non può mai essere descritto in modo non relativistico, rappresenta l'eccezione alle due condizioni descritte sopra.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Dobbiamo fare riferimento alla teoria di Schrödinger come a una teoria fenomenologica invece che una teoria fondamentale. Tuttavia, la teoria di Schrödinger si è dimostrata estremamente efficace quando applicata ad atomi e molecole, e quindi come uno strumento ed un'approssimazione molto utile per la modellizzazione di molti fenomeni.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

La teoria di Schrödinger riguarda un'equazione delle onde, nota come equazione di Schrödinger, che descrive le onde di de Broglie associate alla particella.

Abbiamo già derivato una equazione d'onda, l'equazione di Klein-Gordon, che è invariante dal punto di vista relativistico: vale indipendentemente dal fatto che la particella si muova lentamente o rapidamente, e ha la stessa forma in ogni sistema di riferimento inerziale.

L'equazione d'onda, derivata secondo i principi della teoria di Schrödinger, corrisponde ad un'approssimazione non relativistica.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Consideriamo l'interpretazione della funzione d'onda secondo cui la "particella si trova con maggiore probabilitá in quelle regioni dello spazio in cui l'ampiezza della $\psi(\mathbf{r}, t)$ è grande".

La funzione d'onda di Schrödinger $\psi(\mathbf{r}, t)$, cioè l'ampiezza dell'onda di de Broglie nella teoria di Schrödinger, descrive la distribuzione di probabilità della particella nello spazio e nel tempo.

Se proviamo a localizzare la particella attraverso una misurazione della sua posizione in un dato istante di tempo t la probabilità di trovare la particella nel volume $d^3(\mathbf{r})$ contenente il punto r è proporzionale a $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3(\mathbf{r})$.

La densità di probabilità è quindi proporzionale al modulo quadro della funzione d'onda .

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

La funzione d'onda di Schrödinger è una funzione complessa della posizione e del tempo che soddisfa l'equazione (lineare) di Schrödinger. Ogni funzione d'onda definita corrisponde a un determinato stato di moto della particella.

Abbiamo notato che se $\psi_S(\mathbf{r}, t)$ è una possibile funzione d'onda, lo è anche la funzione $e^{i\theta}\psi_S(\mathbf{r}, t) = \psi_B(\mathbf{r}, t)$ dove θ è una costante reale.

Le distribuzioni di probabilità definite da ψ e da ψ_1 sono identiche. Ciò significa che le due funzioni d'onda $\psi_S(\mathbf{r}, t)$ e $\psi_B(\mathbf{r}, t)$ descrivono lo stesso stato di movimento della particella.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Consideriamo innanzitutto un caso molto semplice, una singola particella che si muove in assenza di forze esterne: cioè una particella libera di massa a riposo m e momento p. Consideriamo l'onda piana associata alla particella. L'energia totale E della particella, secondo la teoria della relativitá ristretta, è data dalla somma dell'energia a riposo

$$E_0 = mc^2$$

e dell'energia cinetica relativistica

$$K = (\gamma - 1)mc^2$$

con $\gamma = 1/\sqrt{1-(v/c)^2}$ il fattore di Lorentz. L'energia della particella é quindi data da:

$$E = E_0 + K = mc^2 + (\gamma - 1)mc^2 = \gamma mc^2 \tag{1}$$

cioè semplificando:

$$E = \sqrt{m^2c^4 + c^2p^2} \tag{2}$$

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Consideriamo ora l'approssimazione non relativistica in cui assumiamo che la velocità della particella sia molto più piccola della velocità della luce.

L'approssimazione non relativistica implica che il termine c^2p^2 sia molto più piccolo del termine m^2c^4. Quindi possiamo riscrivere la E e sviluppare in serie la radice quadrata:

$$E = mc^2\sqrt{1 + \frac{p^2}{m^2c^2}} \tag{3}$$

mantenendo solo i primi termini dello sviluppo:

$$E \cong mc^2 + \frac{p^2}{2m} \tag{4}$$

Il primo termine è l'energia a riposo della particella, e il secondo termine è l'espressione non relativistica dell'energia cinetica della particella (cioè $K = 1/2mv^2$).

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Consideriamo quindi nuovamente la funzione d'onda di de Broglie:

$$\psi_B(\mathbf{r}, t) = A \exp i(\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} - \omega t) \tag{5}$$

Tenendo conto che il vettore d'onda $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$ e che la frequenza $\omega = E/\hbar$, con l'espressione dell'energia

$$E \cong mc^2 + \frac{p^2}{2m} \tag{6}$$

si scrive:

$$\omega \cong \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{p^2}{2m\hbar} \tag{7}$$

Sostituendo $\mathbf{k}$ e ω

$$\psi_B(\mathbf{r}, t) = \exp i\left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}}{\hbar} - \frac{p^2}{2m\hbar} t\right) \exp i\left(-\frac{mc^2}{\hbar} t\right) \tag{8}$$

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Il primo fattore della funzione d'onda si scrive:

$$\psi_s(\mathbf{r}, t) = \exp i \left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{p}}{\hbar} t - \frac{p^2}{2m\hbar} t \right)$$

quindi:

$$\psi_B(\mathbf{r}, t) = \psi_{\mathbf{s}}(\mathbf{r}, t) \exp i \left(-\frac{mc^2}{\hbar} t \right)$$

Inoltre si osserva che il modulo quadro della funzione d'onda:

$$|\psi_B(\mathbf{r}, t)|^2 = |\psi_s(\mathbf{r}, t)|^2$$

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Le due funzioni d'onda ψ_S e ψ_B differiscono solo in un fattore complesso di modulo quadro unitario, indipendente dallo stato del moto della particella, cioè indipendente da $\mathbf{p}$.

I moduli quadri delle due funzioni d'onda sono identici su tutto lo spazio e ad ogni istante.

La distribuzione di probabilità della particella può essere descritta in termini della funzione d'onda ψ_S o della *funzione d'onda di Broglie* ψ_B.

La ψ_S è quindi indicata come *funzione d'onda di Schrödinger* che descrive una particella libera che si muove con momento p.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Procedendo come si era fatto in una delle lezioni precedenti (Slot 3), cioè calcolando la derivata della ψ_S *funzione d'onda di Schrödinger* si ottiene l'equazione differenziale lineare:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_S(\mathbf{r},t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_S(\mathbf{r},t) \tag{9}$$

detta equazione di Schrödinger.

L'equazione ottenuta non contiene la velocità della luce c in coerenza con l'ipotesi fatta inizialmente di particelle con velocità inferiori rispetto a c.

Equazione di Schrödinger (non relativistica)

Il fatto che si considera solo la ψ_S dà luogo all'approssimazione:

$$\omega \cong \frac{mc^2}{\hbar} + \frac{p^2}{2m\hbar} \quad \rightarrow \quad \omega \cong \frac{p^2}{2m\hbar} \tag{10}$$

quindi la velocitá di fase della funzione d'onda di Schrodinger risulta:

$$v'_f = \frac{\omega}{k} = \frac{p}{2m}, \quad \text{where} \quad k = \frac{p}{\hbar} \tag{11}$$

diversa dalla velocità di fase di De Broglie.

$$v_f \cong \frac{mc^2}{p} + \frac{p}{2m} \tag{12}$$

La velocità di gruppo che è invece quella fisicamente significativa risulta essere uguale:

$$\frac{1}{v} = \frac{dk}{d\omega} = \frac{m}{p} \tag{13}$$