COME OTTENERE L'EQUAZIONE DI SCHRODINGER MONO-DIMENSIONALE SECONDO LA MECCANICA ONDULATORIA

Accertato che la luce aveva un comportamento dualistico onda-particella, il fisico Louis de Broglie fece l'audace affermazione nel 1923 che tutta la materia può esibire proprietà ondulatorie. Egli ipotizzo che qualunque particella di massa m che si muove alla velocità v e quindi che ha un momento p = mv possiede un'onda associata di lunghezza d'onda ? pari a:

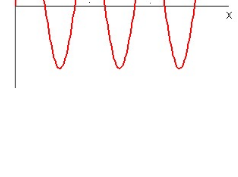
? = h / p   = h/mv   dove h è la costante di Planck.

De Broglie ha quindi messo in evidenza che il dualismo onda-particella non riguarda solo la luce ma è una caratteristica di trutta la materia e pertanto è possibile utilizzare le equazioni delle onde per descrivere il comportamento di una qualsiasi particella materiale che si muove con una quantità di moto mv.

L'EQUAZIONE D'ONDA MONODIMENSIONALE

Questa onda descritta in figura è un'onda sinusoidale la cui forma matematica è la più semplice cioè:

? = A sen 2? / ? ? x



la lunghezza dell'onda è la distanza che intercorre tra due punti di massimo come nella figura, mentre la distanza tra il punto di massimo e l'asse X viene chiamato Ampiezza dell'onda e si indica con A. Nel grafico dell'onda possiamo notare che :

il punto di partenza dell'onda è l'origine degli assi ed appena si giunge al primo dei massimi di onda questo punto è x= ?/2 per cui il valore di   ? = A sen 2?/? ? ?/2 = A sen ?

quando x è uguale alla distanza pari a 2 massimi (1 lunghezza d'onda) X=?   quindi ? = A sen 2?

da notare che ? assume valori positivi dall'origine sino a ? e negativi tra ? e 2?

Pertanto consideriamo che l'elettrone possa muoversi solo lungo l'asse X e non si possa muovere nè lungo l'asse Y nè su quello Z.

Dobbiamo adesso fare alcune considerazioni.

Abbiamo un elettrone che si muove lungo X con un'onda associata che abbiamo chiamato ?. A questo punto dobbiamo conoscere l'energia totale associata all'elettrone e sappiamo che possiamo considerare l'elettrone identificandolo con l'0nda che lo descrive cioè ?. Possiamo anche dire che il valore più alto di ? si ha quando x è pari a ?/2 e 5?/2 ed assume valori positivi ed ha invece il più alto valore negativo a x= 3?/2 .

I valori di ? =0 ci dicono che in quel punto con un certo valore di X l'elettrone non può essere trovato (per esempio nei punti ?/2 e 2?).

Abbiamo messo quindi in relazione il valore di ? con la possibilità di trovare l'elettrone in un certo punto con valore X e naturalmente abbiamo messo in relazione il momento dell'elettrone **p= mv con ?.**

Ovviamente la funzione dell'onda (funzione d'onda) sopra scritta, possiamo riscriverla

? = A sen 2? p / h ? x

Dobbiamo dire che questa è la più semplice forma di un'onda e che ? può essere rappresentata in forma molto più complessa.

Per ottenere l'equazione di Schrodinger dobbiamo sapere che **l'energia totale** associata all'elettrone è data **dall'energia cinetica e da quella potenziale** e che per ottenerla dobbiamo moltiplicare la funzione ? per l'operatore Amiltoniano che indichiamo con H.

Ma cos'è questo operatore Amiltoniano H ed in generale cosa sono gli operatori.?

Bene, la risposta è semplice. Considera per esempio la funzione matematica X^2 per ottenere la RADICE QUADRATA DI X^2 utilizziamo un operatore matematico il cui simbolo è ? e lo applichiamo alla funzione X^2 ed avremo

$?X^2$

il cui risultato è X .Quindi $?X^2 = X$

Otteniamo così una funzione nuova che è X : **abbiamo applicato un operatore matematico simbolizzato da ?** ad una funzione X^2 ed **abbiamo ottenuto il risultato di quella operazione che il simbolo ? rappresenta.**

Consideriamo un altro operatore matematico : l'operatore moltiplicazione 2 x ed applichiamolo alla funzione Y^2 .

Otteniamo $2 \times Y^2 = 2\ Y^2$

In questo caso l'operatore 2x applicato alla funzione Y^2 non ha trasformato la funzione in una funzione diversa ma l'ha lasciata uguale e quindi possiamo dire che l'operatore moltiplicazione x 2 non modifica la funzione ma la moltiplica lasciandola immutata.

Da quanto detto si capisce che gli operatori matematici possono essere di 2 tipi ;

1 - operatori che trasformano la funzione in una funzione diversa

2 - operatori che lasciano immutata la funzione moltiplicandola per un valore costante

Ma cos'è l'operatore Amiltoniano il cui simbolo è H ?

H non è altro che l'operatore energia che applicato ad una funzione non la modifica ma **la moltiplica per una costante E che non è altro che l'energia associata alla funzione.**

L'operatore energia (amiltoniano) applicato ad una funzione dà come risultato l'energia quindi si può scrivere

H? = E ?

ma che forma ha H ?

Siccome **H è un operatore energia totale** esso deve essere costituito da 2 parti : **una parte energia cinetica e l'altra energia potenziale:**

$H= P^2 /2m \quad -e^2 / r$

dove il primo dei due termini rappresenta **l'operatore energia cinetica** ed **il secondo l'energia potenziale** che indichiamo con U.

Per trovare l'energia dell'elettrone rappresentato dalla funzione ?, applichiamo ad essa l'operatore energia,(allo stesso modo con cui abbiamo applicato l'operatore radice quadrata alla funzione X^2)

P^2 /2m ? +U ? = E? cioè

P^2 /2m (A sen 2?p/h X) + U (A sen 2?p/h X) = E (A sen 2?p/h

X)

questa è l'appropriata espressione che rappresenta nel nostro caso la prima delle due fasi del calcolo dell'equazione d'onda.

Per ottenere l'appropriata espressione per P^2 ? dobbiamo effettuare la derivata seconda rispetto ad X

Considerando la forma di ?

? =A sen 2? p / h ? x

effettuiamo la derivata prima della funzione secondo l'asse X ed avremo

??/?x = 2?p/h A cos 2?p/h x ricordiamo infattiche **?Asen b x /?x = b Acos b x**

derivando ancora si ha:

$?^2$? / ? x^2 = - 2?P / h ? 2?P/h A sen 2?P/h X

$?^2$? / ? x^2 = - 4$?^2$P2/h^2 Asen 2?P/h X

tuttavia sappiamo che **A sen 2?P/h X = ?**

per cui **$?^2$? / ? x^2 = - 4$?^2$P2/h^2 ?**

si deduce che

P^2 ? = - h^2 /4$?^2$ **$?^2$? / ? x^2**

ricordando che P^2 ?/2m +U? = E ?

si deduce che l'equazione di Schrodinger monodimensionale sopra scritta adesso assume la seguente forma:

$$- h^2 /8?^2m \quad ?^2 ? / ? x^2 + U ? = E ?$$

che possiamo riscrivere

$$[- h^2 /8?^2m \quad ?^2 / ? x^2 + U] \; ? = E ?$$

da questa espressione è facile vedere la forma matematica dell'operatore H amiltoniano monodimensionale, ricordando che

$$H ? = E ?$$

$$H =[- h^2 /8?^2m \quad ?^2 / ? x^2 + U]$$

E' semplice poi ottenere **l'equazione di Schrodinger tridimensionale**

$$[- h^2 /8?^2m \quad ?^2 / ? x^2 - h^2 /8?^2m \quad ?^2 / ? y^2 - h^2 /8?^2m \quad ?^2 / ? z^2 + U] \; ? = E ?$$

in cui si ha

$$H= -h^2/8?^2m (?^2/?x^2 + ?^2/?y^2 + ?^2/?z^2)$$