

Equazione di Schrödinger

L'equazione di Schrödinger assume diverse forme a seconda della situazione fisica. La scrittura per il caso generale è:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H} \Psi(\mathbf{r}, t)$$

$\Psi(\mathbf{r}, t)$ Funzione d'onda

\hat{H} Operatore hamiltoniano

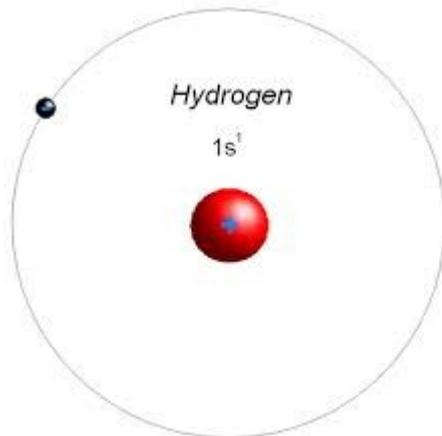
Nel caso di una particella in tre dimensioni soggetta ad un potenziale V :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\mathbf{r}, t) + V(\mathbf{r}, t) \Psi(\mathbf{r}, t)$$

Stati stazionari

Equazione non dipendente dal tempo. La funzione d'onda e' detta autofunzione dell'hamiltoniano, e l'energia e' detta autovalore:

$$\hat{H}\Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r})$$



Interazione elettrone nucleo. Nel caso polielettronico anche interazione elettrone elettrone

$$\hat{H} = \sum_i \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} - \sum_A \frac{q_A}{r_{Ai}} \right) + \sum_{i < j}^n \frac{1}{r_{ij}}$$

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_n^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \nabla_e^2 + V(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_n|)$$

Molecule H_2^+

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_{\mathbf{r}_e}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_{\mathbf{R}_A}^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_{\mathbf{R}_B}^2 - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_A|} - \frac{e^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{R}_B|} + \frac{e^2}{|\mathbf{R}_A - \mathbf{R}_B|}$$

