Interpretazione statistica della funzione d'onda

Marcello Colozzo – http://www.extrabyte.info

Abbiamo ricavato l'equazione di Schrödinger per un sistema quanto-meccanico costituito da una particella di massa m che compie un moto 1-dimensionale e sottoposta a un campo di forze conservativo di energia potenziale $V(x)$. L'equazione si generalizza immediatamente al caso di una particella che si muove in $\mathbb{R}^3$. Precisamente, basta sostituire l'operatore di derivazione parziale seconda $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ con il laplaciano $\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, ottenendo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{x})\,\psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{1}$$

Iniziamo con l'osservare che la soluzione ψ di tale equazione può avere un andamento periodico a causa dell'unità immaginaria a secondo membro. Infatti, abbiamo visto nei numeri precedenti che la soluzione può essere scritta nella forma:

$$\psi(\mathbf{x},t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}}\psi_0(\mathbf{x}) \tag{2}$$

Questa circostanza suggerisce le denominazioni *funzione d'onda* per la grandezza ψ ed *equazione d'onda di Schrödinger* per la (1). Rileviamo tuttavia una differenza sostanziale con l'equazione d'onda di D'Alemb

$$\nabla^2\psi - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = 0,$$

che è del secondo ordine nella derivata temporale. Al contrario, l'equazione di Schrödinger è del primo ordine rispetto alla predetta variabile, per il modo in cui l'equazione è stata ricavata. Infatti, in forma operatoriale si scrive:

$$\hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{3}$$

dove $\hat{H}$ è l'operatore hamiltoniano associato al sistema. Ricordiamo poi che l'evoluzione temporale della funzione d'onda è un processo deterministico in forza dell'unicità delle soluzioni del problema di Cauchy:

$$\begin{cases} \hat{H}\psi = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \\ \psi(\mathbf{x},t_0) = \psi_0(\mathbf{x}) \end{cases} \tag{4}$$

In altri termini, il valore iniziale $\psi(\mathbf{x},t_0)$ determina (per un assegnato hamiltoniano e quindi per un dato sistema quantistico) il valore di ψ in un qualsiasi istante successivo. Ciò esprime il *principio di causalità* in meccanica quantistica [2].

Nei numeri precedenti abbiamo interpretato fisicamente la funzione d'onda attraverso la seguente identità funzionale:

$$\rho(\mathbf{x},t) = |\psi(\mathbf{x},t)|^2, \tag{5}$$

dove $\rho(\mathbf{x},t)$ è la densità di probabilità per la posizione, nel senso che la grandezza differenziale

$$dw = \rho(\mathbf{x}_0,t)\,d^3x$$

è la probabilità infinitesima di trovare al tempo t la particella nel volume infinitesimo d^3x centrato in $\mathbf{x}_0$. Inizialmente Schrödinger interpretò in maniera diversa la grandezza ψ definendo la (5) come la densità di carica elettrica al tempo t nel punto $\mathbf{x}$. È da tener presente che all'epoca erano sconosciute le particelle elettricamente neutre. Qualunque sia il significato fisico di ψ (densità di probabilità o di carica elettrica) iniziamo con il verificare che ρ verifica la cosiddetta equazione di continuità, premettendo alcune nozioni.

Sia $G(t)$ una grandezza scalare di densità $\rho(\mathbf{x},t)$:

$$G(t) = \int_D \rho(\mathbf{x},t)\, d^3x, \tag{6}$$

per un assegnato dominio $D \subseteq \mathbb{R}^3$. Dal momento che ρ è una funzione delle coordinate (x,y,z) e del tempo t, possiamo immaginare che essa venga "trasportata". Definiamo allora un campo vettoriale $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ – denominato *densità di corrente* di $G(t)$ – tale che se $d\sigma$ è un qualunque elemento di superficie e $\mathbf{n}$ il versore normale, $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{n}d\sigma$ è la quantità di grandezza che attraversa $d\sigma$ nell'unità di tempo. Ciò implica che

$$\int_S \mathbf{j}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{n}d\sigma$$

è la quantità di grandezza che attraversa la superficie S nell'unità di tempo. Dimostriamo il seguente teorema:

Teorema 1 *L'equazione del bilancio per la grandezza $G(t)$ di densità $\rho(x,t)$ e densità di corrente $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)$ è*

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = \gamma, \tag{7}$$

dove $\gamma(\mathbf{x},t)$ è la densità di velocità di creazione/distruzione della grandezza $G(t)$:

$$\Gamma(t) = \int_D \gamma(\mathbf{x},t)\, d^3x, \tag{8}$$

essendo $\Gamma(t)$ la velocità di creazione/distruzione di $G(t)$.

Dimostrazione. Preso ad arbitrio un dominio D di frontiera regolare ∂D, si ha che l'equazione del bilancio in forma integrale si scrive:

$$\frac{dG}{dt} + \oint_{\partial D} \mathbf{j}\cdot\mathbf{n}d\sigma = \Gamma(t)$$

Abbiamo

$$\frac{dG}{dt} = \frac{d}{dt}\int_D \rho(\mathbf{x},t)\, d^3x = \int_D \frac{\partial\rho}{\partial t} d^3x$$

L'integrale di superficie può essere convertito in un integrale di volume utilizzando il teorema della divergenza:

$$\oint_{\partial D} \mathbf{j}\cdot\mathbf{n}d\sigma = \int_D \operatorname{div}\mathbf{j} d^3x$$

Segue

$$\int_D \left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} - \gamma\right) d^3x = 0$$

Per l'arbitrarietà di D si ha:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} - \gamma = 0,$$

onde l'asserto. ■

Se $\gamma(\mathbf{x},t) > 0$ il mezzo in cui si propaga la grandezza G si dice *sorgente*. Viceversa, per $\gamma(\mathbf{x},t) < 0$ il mezzo assorbe. Per ultimo, $\gamma(\mathbf{x},t) = 0$ la grandezza G si conserva e l'equazione del bilancio si chiama *equazione di continuità*. Per quanto precede, tale equazione esprime localmente la conservazione di G, a differenza dell'equazione integrale

$$\frac{dG}{dt} + \oint_{\partial D} \mathbf{j}\cdot\mathbf{n}d\sigma = 0$$

che esprime globalmente la conservazione di G. Ciò premesso, riscriviamo l'equazione di Schrödinger (1) e la sua complessa coniugata

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(\mathbf{x})\,\psi(\mathbf{x},t) = i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} \\ -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^* + V(\mathbf{x})\,\psi^*(\mathbf{x},t) = -i\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \end{cases} \tag{9}$$

Moltiplichiamo la prima per ψ^* e la seconda per ψ, per poi sottrarre membro a membro:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^*\nabla^2\psi + \frac{\hbar^2}{2m}\psi\nabla^2\psi^* = i\hbar\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t} + \psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \Longleftrightarrow \tag{10}$$

$$\Longleftrightarrow \psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^* + \frac{2im}{\hbar}\frac{\partial}{\partial t}(\psi^*\psi) = 0$$

$$\Longleftrightarrow \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right) + \frac{\partial\rho}{\partial t} = 0$$

Definiamo

$$\mathbf{j}(\mathbf{x},t) = \frac{\hbar}{2im}(\psi^*\nabla\psi - \psi\nabla\psi^*), \tag{11}$$

la cui divergenza è

$$\operatorname{div}\mathbf{j} = \frac{\hbar}{2im}\left(\psi^*\nabla^2\psi - \psi\nabla^2\psi^*\right)$$

Ne consegue che la (10) è l'equazione di continuità per la grandezza di densità $\rho(\mathbf{x},t)$:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{j} = 0 \tag{12}$$

Schrödinger definì

$$\rho_c(\mathbf{x},t) = q\rho(\mathbf{x},t), \tag{13}$$

dove q è la carica elettrica della particella. Quindi la densità di corrente elettrica associata a tale carica è

$$\mathbf{j}_c(\mathbf{x},t) = q\mathbf{j}(\mathbf{x},t) \tag{14}$$

Tuttavia tale interpretazione offre il fianco a numerose critiche [1]. Ad esempio, l'eventuale *sparpagliamento* dell'onda descritta dalla funzione $\psi(\mathbf{x},t)$ determina un conseguente sparpagliamento della carica elettrica trasportata, contrariamente ai risultati delle esperienze che vedono una particella elettricamente carica come un oggetto puntiforme. Fu Max Born che nel 1926 propose l'interpretazione statistica discussa in precedenza, e cioè $dw = \rho(\mathbf{x}_0,t)\,d^3x$ è laprobabilità infinitesima di osservare al tempo t la particella nell'elemento di volume centrato in $\mathbf{x}_0$, mentre $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{n}d\sigma dt$ è la probabilità infinitesima che la particella attraversi l'elemento di superficie $d\sigma$ nell'intervallo di tempo infinitesimo dt. L'interpretazione statistica ha senso solo se ci riferiamo a un numero $N \gg 1$ di particelle che si trovano nelle stesse condizioni iniziali. Un tale sistema fisico è denominato *fascio*. In tale configurazione sperimentale, la grandezza dw è il numero N' di particelle osservate al tempo t nel volume d^3x, mentre $\mathbf{j}(\mathbf{x},t)\cdot\mathbf{n}d\sigma dt$ è il numero N'' di particelle che attraversano l'elemento di spuerficie $d\sigma$ nell'intervallo di tempo dt. Se le particelle hanno una carica elettrica q:

$$\begin{aligned} qN' &= \text{carica elettrica del fascio di particelle} \\ N''\mathbf{j} &= \text{densità di corrente elettrica del fascio di particelle} \end{aligned}$$

Riferimenti bibliografici

[1] Caldirola P. Cirelli R., Prosperi G.M. *Introduzione alla Fisica Teorica*Utet, 1987.

[2] Davydov A.S., *Meccanica quantistica.* Edizioni Mir, 1981