Considerazioni sul comportamento relativistico della particella quantistica

Fausto Vezzaro

sitofausto@gmail.com

Sommario

L'equazione di Schrödinger è fondata sulla relazione classica che sussiste tra energia cinetica e quantità di moto, è quindi evidente che essa cessa di essere valida quando la velocità della particelle diventa confrontabile con quella della luce. Sebbene il problema relativistico sia stato risolto con metodi differenti (Dirac), in questo articolo proverò ad affrontarlo mantenendo il formalismo di Schrödinger e procedendo con plausibili manipolazioni simboliche. L'equazione finale è purtroppo assai complessa, e mi è stato impossibile verificare se restituisce i valori relativisticamente esatti dei dati spettrali.

1 Particella debolmente relativistica

1.1 Una formulazione debolmente relativistica dell'equazione di Schrödinger

Dalla relatività sappiamo che possiamo esprimere l'energia cinetica come differenza tra l'energia relativistica totale e l'energia a riposo

$$K = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4} - mc^2 \tag{1}$$

e dunque

$$K = mc^2\left(\sqrt{\varepsilon + 1} - 1\right) \qquad \text{dove} \qquad \varepsilon = \frac{p^2}{m^2c^2} \tag{2}$$

ma per ε piccolo vale l'approssimazione $\sqrt{\varepsilon+1} - 1 \approx \frac{\varepsilon}{2} - \frac{\varepsilon^2}{8}$ quindi per piccole energie cinetiche la correzione relativistica al primo ordine è

$$K = \frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} \tag{3}$$

e quindi, utilizzando le relazioni di de Broglie,

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega \\ \boldsymbol{p} &= \hbar\boldsymbol{k} \end{aligned} \tag{4}$$

possiamo simbolicamente scrivere la conservazione dell'energia meccanica $K + U = E$ così

$$\frac{\hbar^2}{2m}k^2 - \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}k^4 + U = \hbar\omega \tag{5}$$

dove $k = |\boldsymbol{k}|$. Ora osserviamo che data una generica onda sinusoidale

$$\Psi(\boldsymbol{r}, t) = Ae^{i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t + \phi)} \tag{6}$$

valgono le

$$\dot{\Psi} = -i\omega\Psi \tag{7}$$

$$\nabla^2\Psi = -k^2\Psi \tag{8}$$

da quest'ultima vediamo poi che

$$\nabla^4\Psi = k^4\Psi \tag{9}$$

dove si è utilizzato l'operatore biarmonico $\nabla^4\Psi \equiv \nabla^2\left(\nabla^2\Psi\right)$. Moltiplicando la 5 per Ψ potremmo allora aspettarci che l'equazione che regola il comportamento della funzione d'onda in regime debolmente relativistico sia del tutto analoga a quella che abbiamo in regime non relativistico

$$\boxed{\widehat{A}\Psi = i\hbar\dot{\Psi}} \tag{10}$$

l'unica differenza è che vi è un termine correttivo nell'operatore hamiltoniano

$$\boxed{\widehat{A} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4 + U} \tag{11}$$

che giustamente si riduce all'ordinario operatore $\widehat{H}$ se $c \to \infty$.

1.2 Una formulazione indipendente dal tempo

Consideriamo una soluzione a variabili separabili $\Psi(\boldsymbol{r}, t) = \psi(\boldsymbol{r})f(t)$, sostituendo nella 10 e dividendo per la soluzione stessa otteniamo

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\nabla^2\psi}{\psi} - \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\frac{\nabla^4\psi}{\psi} + U = i\hbar\frac{\dot{f}}{f} \tag{12}$$

Se il potenziale è stazionario possiamo eguagliare i due membri a una costante C. La seconda equazione

$$i\hbar\dot{f} = Cf \tag{13}$$

restituisce

$$f(t) \propto e^{-\frac{iCt}{\hbar}} \tag{14}$$

la quale mostra che la distribuzione di probabilità $|\Psi|^2$ è stazionaria ed uguale a $|\psi|^2$ opportunamente normalizzato. La Ψ va allora calcolata per mezzo della

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi - \frac{\hbar^4}{8m^3c^2}\nabla^4\Psi + U\Psi = C\Psi \tag{15}$$

Sostituendo la generica onda sinusoidale 6, usando le relazioni di de Broglie e dividendo per Ψ vediamo che

$$\frac{p^2}{2m} - \frac{p^4}{8m^3c^2} + U = C \tag{16}$$

Queste manipolazioni portano a ipotizzare che la costante C coincida con meccanica totale della particella. Concludendo, ciò che abbiamo trovato per l'equazione di Schrödinger debolmente relativistica dipendente dal tempo vale anche per gli stati stazionari: l'equazione è del tutto analoga a quella relativa al regime non relativistico

$$\boxed{\widehat{A}\Psi = E\Psi} \tag{17}$$

ed occorre solo tenere conto della piccola modifica all'operatore hamiltoniano (che però rende l'equazione assai più complicata). Sarebbe interessante confrontare le autoenergie che emergono da questa equazione con i dati spettrali, ciò permetterebbe una verifica sperimentale delle correzioni relativistiche qui descritte.

2 Particella ultrarelativistica

2.1 Una formulazione ultrarelativistica dell'equazione di Schrödinger

Per scrivere una versione ultrarelativistica dell'equazione di Schrödinger procederemo in modo analogo a quanto fatto nei paragrafi precedenti, ma il fatto che nell'equazione di conservazione dell'energia la quantità di moto non appare al quadrato crea delle difficoltà che risolveremo come segue.
La conservazione dell'energia è

$$E = pc + U \tag{18}$$

Per pervenire a una comoda versione dell'equazione di Schrödinger ultrarelativistica è conveniente portare la U a sinistra ed elevare al quadrato (il fatto che eleviamo al quadrato ci deve però mettere in guardia sulla possibilità di pervenire a soluzioni spurie). Applicando le relazioni di de Broglie possiamo allora ottenere

$$\hbar^2\omega^2\Psi + U^2\Psi - 2\hbar\omega U\Psi = c^2\hbar^2k^2\Psi \tag{19}$$

dove abbiamo anche moltiplicato per Ψ. Si consideri ora la seguente equazione

$$\boxed{c^2\hbar^2\nabla^2\Psi = \hbar^2\ddot{\Psi} + 2iU\hbar\dot{\Psi} - U^2\Psi} \tag{20}$$

È facile verificare che sostituendovi la generica onda sinusoidale 6 si ottiene la 19, ovvero la conservazione dell'energia (si sfrutti anche il fatto che $\ddot{\Psi} = -\omega^2\Psi$, come conseguenza della 7). Notiamo che se $U = 0$ la 20 si riduce all'equazione delle onde elettromagnetiche $\Box^2\Psi = 0$, il pacchetto semplicemente viaggia a velocità c in moto rettilineo uniforme. È vero che classicamente U è definita a meno di una costante additiva arbitraria (ciò rende l'ultima affermazione apparentemente priva di senso), tuttavia credo che nel contesto della particella libera possa essere utile definire una energia potenziale assoluta come energia a riposo della particella[1] (si vedano anche i commenti alla 32).

2.2 Una formulazione indipendente dal tempo

Consideriamo una soluzione a variabili separabili $\Psi(\boldsymbol{r},t)=\psi(\boldsymbol{r})f(t)$, sostituendo nella 20 otteniamo

$$c^2\hbar^2 f\nabla^2\psi = \hbar^2\psi\ddot{f} + 2iU\hbar\psi\dot{f} - U^2\psi f \tag{21}$$

dividiamo per $f\psi$

$$c^2\hbar^2\frac{\nabla^2\psi}{\psi} = \hbar^2\frac{\ddot{f}}{f} + 2iU\hbar\frac{\dot{f}}{f} - U^2 \tag{22}$$

Se $\frac{\dot{f}}{f}$ è una costante indipendente dal tempo[2] possiamo separare in due parti, l'una dipendente solo dallo spazio e l'altra solo dal tempo (se il potenziale è stazionario)

$$c^2\hbar^2\frac{\nabla^2\psi}{\psi} - 2iU\hbar\frac{\dot{f}}{f} + U^2 = \hbar^2\frac{\ddot{f}}{f} \tag{23}$$

eguagliamo allora, senza perdita di generalità, a una costante Z^2. La seconda equazione diventa

$$\ddot{f} = \frac{Z^2}{\hbar^2}f \tag{24}$$

che ha soluzione

$$f(t) = Ae^{\frac{Z}{\hbar}t} + Be^{-\frac{Z}{\hbar}t} \tag{25}$$

Ma dobbiamo scegliere uno solo dei due (uno qualunque) o non viene soddisfatta la condizione $\frac{\dot{f}}{f}=$ costante. Avremo allora

$$\frac{\dot{f}}{f} = \pm\frac{Z}{\hbar} \tag{26}$$

dove si ha il segno superiore se si sceglie l'esponente positivo e il segno inferiore se si sceglie quello negativo. Sostituendo in 23 troviamo

$$c^2\hbar^2\frac{\nabla^2\psi}{\psi} \mp 2iUZ + U^2 = Z^2 \tag{27}$$

[1]Per coerenza, nel contesto dei sistemi a più particelle, si potrebbe stabilire che l'energia potenziale sia pari alla somma di tutte le energie a riposo quando le particelle del sistema sono sparpagliate a grande distanza fra loro (e subisca poi le opportune variazioni quando il sistema viene assemblato).

[2]In presenza di soluzioni a variabili separabili, nella prima sezione dell'articolo questa era una conseguenza della stazionarietà del potenziale, qui invece è una premessa per rendere stazionario $|\Psi|^2$, la "dimostrazione" è più debole.

che può essere riscritta anche così

$$-c^2\hbar^2\nabla^2\psi = (\pm iZ - U)^2\psi \tag{28}$$

Se vi inseriamo la generica onda 6 e applichiamo la relazione di de Broglie otteniamo una relazione da confrontarsi con il quadrato della conservazione dell'energia $p^2c^2 = (E-U)^2$

$$p^2c^2 = (\pm iZ - U)^2 \tag{29}$$

Possiamo trarre le seguenti conclusioni. Se prendiamo il segno superiore (dobbiamo allora prendere il primo esponente nella e nella 25) abbiamo $Z = -iE$. Se utilizziamo il segno inferiore (secondo esponente) abbiamo $Z = iE$. In ogni caso otteniamo una funzione del tipo

$$f(t) = Ae^{-\frac{iEt}{\hbar}} \tag{30}$$

dal che concludiamo $|\Psi|^2$ è stazionario. Possiamo a questo punto scrivere l'equazione di Schrödinger ultrarelativistica in caso stazionario sostituendo i possibili valori di Z nella 28 (o equivalentemente sostituendo la 30 nella 23)

$$-c^2\hbar^2\nabla^2\psi = (E-U)^2\psi \tag{31}$$

dove, lo ricordiamo, è ammessa la possibilità di soluzioni spurie.

3 Formulazione generale

Procedendo con i metodi descritti in questo articolo, considerato che l'energia cinetica relativistica è scrivibile come $\sqrt{m^2c^4 + p^2c^2} - mc^2$, e che dalla 7 si ha $\ddot{\Psi} = -\omega^2\Psi$, siamo portati a concludere che la versione relativisticamente esatta dell'equazione di Schrödinger è

$$\boxed{c^2\hbar^2\nabla^2\Psi = \hbar^2\ddot{\Psi} + 2i\hbar(U - mc^2)\dot{\Psi} + U(2mc^2 - U)\Psi} \tag{32}$$

Per ottenerla è sufficiente isolare la radice nella conservazione dell'energia, elevare al quadrato, sfruttare le relazioni di de Broglie, moltiplicare per Ψ e procedere nel solito modo.

Naturalmente nei limiti non relativistico e relativistico estremo l'equazione si riduce alla ordinaria equazione di Schrödinger e alla 20. Inoltre se per la particella libera supponiamo che l'energia potenziale coincida con la sua energia a riposo, la 32 si riduce all'equazione di Klein-Gordon.

Per ottenere la corrispondente equazione indipendente dal tempo, si può poi procedere in modo del tutto analogo a quanto fatto nella seconda parte di questo articolo: sostituiamo una soluzione a variabili separabili e dividiamo per la stessa, isoliamo i termini supponendo che $\frac{\dot{f}}{f}$ sia una costante, traiamo tutte le conclusioni fino all'equazione 26, che andiamo a sostituire ottenendo

$$-c^2\hbar^2\nabla^2\Psi = [-Z^2 \pm 2i(mc^2 - U)Z + U(U - 2mc^2)]\Psi \tag{33}$$

Inserendo la generica onda e applicando le 4 troviamo allora un'equazione che, confrontata con la $c^2p^2 = U^2 + E^2 - 2mc^2U + 2mc^2E - 2UE$ che discende dalla conservazione dell'energia, ci porta a concludere che deve essere

$$E^2 + 2mc^2E - 2UE = -Z^2 \pm 2imc^2Z \mp 2iUZ \tag{34}$$

dove E è l'energia meccanica totale. Possiamo poi trarre esattamente le conclusioni riportate dopo l'equazione 29 pervenendo, in modo analogo, alla formulazione indipendente dal tempo

$$\boxed{-c^2\hbar^2\nabla^2\Psi = [E^2 + 2(mc^2 - U)E + U(U - 2mc^2)]\Psi} \tag{35}$$

che nei casi limite si comporta come ci si attende. Volendo le si può anche dare una forma più simile a quella dell'equazione di Schrödinger:

$$\widehat{I}\Psi = L\Psi \tag{36}$$

dove L è una costante pari a $E\left(\frac{E}{2mc^2} + 1\right)$ e dove

$$\widehat{I} = \widehat{H} + \widehat{M} \tag{37}$$

dove $\widehat{H}$ è l'ordinario operatore hamiltoniano e

$$\widehat{M} = \frac{U}{mc^2}\left(E - \frac{U}{2}\right) \tag{38}$$

Si può dire che praticamente tutto quello che è stato trattato in questo articolo affonda le sue radici nella equazione 32. Sarebbe interessante risolvere la 35 nel caso di un potenziale coulombiano centrale, per confrontare con i dati spettrali e con i valori che si ottengono per mezzo dell'equazione di Schrödinger.