

L'Equació de Schrödinger i els fenòmens de transport

Josep Planelles

29/10/99

Una de les maneres en que hom es refereix a la Mecànica Quàntica és Mecànica Ondulatòria. És cert que la Mecànica Quàntica és molt més que una Mecànica Ondulatòria. De fet, pot ser formulada en termes abstractes de vectors d'estat, operadors i matrius, sense cap referència a la Mecànica d'ones. Tanmateix, pot ser per raons històriques (o didàctiques?), és molt comú introduir la Mecànica Quàntica com una Mecànica Ondulatòria i, a posteriori, reformular-la amb major generalitat en termes d'estats, operadors, etc. Jo mateix he seguit aquest punt de vista en el meu curs introductori de Química Quàntica (J. Planelles "Química Quàntica", Col·lecció Material Docent, Publicacions de la Universitat Jaume I (Castelló) 1996).

Açò no lleva per a adonar-se que l'equació de Schrödinger no és l'equació d'un moviment ondulatori i que referir-se a la funció d'ona Ψ com amplitud d'ona de matèria és, si més no, equívoc (malgrat que es puga trobar així en molts llibres de gran qualitat). Fixem-nos: a un moviment ondulatori típic (moviment descrit per l'equació de D'Alembert: $\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$) la qualitat que es propaga *no és* la matèria sinó l'estat de moviment de la matèria. És a dir, el moment lineal i l'energia (M. Alonso and E. Finn, FÍSICA, Vol 2, Addison Wesley 1987 p. 719).

Pel contrari, on si que hi trobem transferència de matèria són als processos de difusió (processos que venen regits per la Llei de Fick). Si anomenem $n(x)$ a la densitat d'una substància macroscòpica no homogènia ($n(x)$ representa el nombre de partícules per unitat de volum) i imaginem que hi ha un gradient de densitat $\frac{\partial n}{\partial x}$, sabem que es produirà un flux j de partícules des de la zona de major concentració a la zona de menor concentració. (Definim j com el nombre de partícules que travessen la unitat de superfície en la unitat de temps). El flux és major a major gradient, de manera que podem escriure: $j = -D \frac{\partial n}{\partial x}$. D és l'anomenat coeficient de difusió i depèn de la substància concreta que es difon.

Si establim un balanç de matèria (entrada E - sortida S = acumulació A) tenim que l'entrada menys la sortida a través dos àrees de superfície S separades una distància infinitesimal dx perpendicular a la direcció del flux la podem escriure com: $E - A = S j_2 - S j_1 = -S dj = -S \frac{\partial j}{\partial x} dx$.

L'acumulació A de matèria a l'element de volum $dV = S dx$ la podem calcular com la variació del producte volum per densitat $n(x)dV$ per unitat de temps: $A = \frac{\partial n}{\partial t} dV = \frac{\partial n}{\partial t} S dx$.

Si substituïm j per la seva definició i tenim en compte que $E - S = A$, concloem que (Llei de Fick):

$$D \frac{\partial^2 n}{\partial x^2} = \frac{\partial n}{\partial t}.$$

Si recordem l'equació de Schrödinger en absència de camps externs, és a dir, potencial zero, $i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$, la reescrivim en la forma $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = \left(\frac{i\hbar}{2m}\right) \frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2}$, identifiquen Ψ amb la densitat (de probabilitat) de partícules, a la vegada que definim un "coeficient de difusió" $D = \left(\frac{i\hbar}{2m}\right)$ i un flux de probabilitat $j = -D \frac{\partial \Psi}{\partial x}$, concloem que podem reescriure l'equació de Schrödinger en la forma $\frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{\partial j}{\partial x}$, equació que es llegeix com que la variació del flux de densitat de corrent (o de probabilitat) j en una direcció es tradueix en una variació temporal de la densitat (de probabilitat) Ψ .

Cal dir, per a finalitzar la present reflexió, que s'aplegue com s'aplegue a la Mecànica Quàntica, hi haurà que fer el salt i deixar de banda les imatges clàssiques, encara que fer-ho completament no és gens fàcil. Com mot be deia Heisenberg: *It has been stated in the beginning that Copenhagen interpretation of quantum theory starts with a paradox. It starts from the fact that we describe our experiments in terms of classical physics and at the same time from the knowledge that these concepts do not fit nature accurately.*