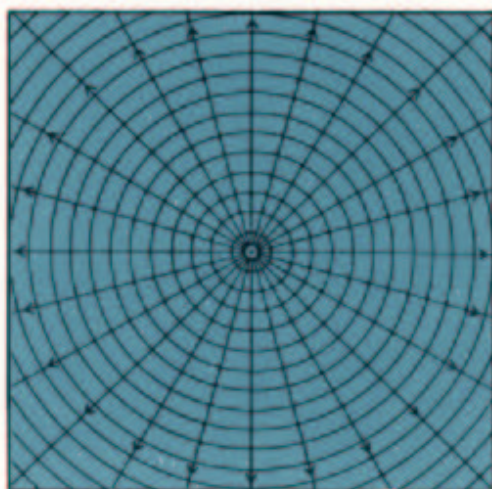


Sigfrido Boffi

LA MECCANICA DELLE ONDE



QUADERNI DI FISICA TEORICA



Università degli Studi di Pavia
Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica

QUADERNI DI FISICA TEORICA
Collana curata da Sigfrido Boffi

Comitato Scientifico

Bruno Bertotti
Italo Guarneri
Alberto Rimini

Sigfrido Boffi

LA MECCANICA DELLE ONDE

Università degli Studi di Pavia
Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica

Prima edizione: febbraio 1991
Prima edizione web: febbraio 2005

ISBN 88-85159-04-4

INDICE

Premessa	7
§ 1. Erwin Schrödinger	9
§ 2. 1926: un anno di grazia	17
§ 3. Alcune difficoltà matematiche	19
– Quantizzazione come problema agli autovalori	
(prima comunicazione)	25
(seconda comunicazione)	45
(terza comunicazione)	83
(quarta comunicazione)	85

PREMESSA

Questo quaderno è dedicato a Erwin Schrödinger, l'inventore della descrizione ondulatoria delle particelle atomiche. L'equazione che porta il suo nome è così fondamentale nello studio dei fenomeni atomici e nucleari da non richiedere per il suo uso alcun riferimento bibliografico, come succede per quelle acquisizioni del pensiero umano che sono entrate nel patrimonio culturale e che si tramandano di generazione in generazione come la saggezza dei popoli. D'altra parte l'interpretazione delle soluzioni dell'equazione di Schrödinger ha sconvolto la visione della fisica classica, per la quale la realtà è oggettiva e deterministica, e suscita tuttora qualche riluttanza d'accettazione che già lo stesso Schrödinger di tanto in tanto manifestava. Rivivere, con la vivacità d'espressione dell'autore, la genesi delle idee, sostenute da una sapiente tecnica matematica, è quindi un'esperienza utile, e forse anche necessaria, per apprezzare il senso della teoria e, nello stesso tempo, la forza della creatività, guidata dalla richiesta di un ineludibile riscontro sperimentale.

La traduzione dei lavori sulla quantizzazione come problema agli autovalori avviene con il consenso della figlia di Schrödinger, signora Ruth Braunizer, cui l'autore è grato per l'incoraggiamento ricevuto. Il disegno in copertina è ispirato a una figura tratta da un articolo di divulgazione scientifica dello stesso Schrödinger, pubblicato nel 1953 su *Scientific American*. Utili conversazioni sono state anche quelle avute con Bruno Bertotti, James McConnell, Ezio Mognaschi e Giuseppe Savaré.

Lohn

Warum noch heut eine schöne frau
jung wie der morgentau
mir ihre warmen lippen beut
ich künd es dir genau:

Weil mir zu keiner stund
kein irdisches geschmeid,
keines ruhmes wichtigkeit
über die liebe der frauen ging.
Über dem kuss von geliebten mund
war mirs gering.

Oft wurd ich gescholten,
dass ich das leben verträume,
lieber als rechne reime.
Jetzt – wird mirs vergolten.

Ricompensa

Perché ancor oggi una bella donna
giovane come la rugiada del mattino
mi porge le sue calde labbra
te lo rivelo francamente:

Perché in nessun momento
nessun gioiello terreno,
nessun onore importante
per me valeva più dell'amore delle donne.
Di fronte al bacio della bocca amata
per me era poca cosa.

Spesso sono stato rimproverato
di passar la vita sognando,
di fare più rime che conti.
Ora – ne sono compensato.

E. Schrödinger ¹

§ 1. Erwin Schrödinger

Erwin Rudolph Alexander Joseph Schrödinger nacque a Vienna il 12 agosto 1887, unico figlio di Rudolf e di Georgine (Georgie) Emilia Brenda Bauer. La madre era la seconda delle tre figlie di Alexander Bauer, professore di chimica nella scuola, la Technische Hochschule di Vienna, in cui aveva studiato Rudolf. Questi aveva ereditato un'attività commerciale basata sul linoleum, che permetteva di garantire una certa tranquillità economica alla famiglia. Ma Rudolf aveva anche vasti interessi che seppe comunicare al figlio in un'atmosfera di amichevole fiducia.

Fino all'età di dieci anni Erwin ebbe un'educazione familiare; grazie alla nonna materna, Emily Russell, acquistò la grande dimestichezza con la lingua inglese che si può apprezzare nei suoi scritti maturi. Durante il ginnasio seppe armonizzare gli studi scientifici con gli studi letterari, approfondendo la conoscenza del mondo classico e della filosofia greca e imparando molto bene

¹ E. Schrödinger: *La mia visione del mondo. La mia vita - Poesie*, a cura di Bruno Bertotti, Garzanti, Milano, 1987, pp. 184–185.

il latino e il greco. Nell'autunno 1906 si iscrisse all'Università di Vienna poco dopo la tragica scomparsa di Boltzmann, che vi era stato professore di Fisica Teorica dal 1894². Il suo successore e discepolo, Friedrich (Fritz) Hasenöhrl (1874–1915), ne aveva assimilato gli insegnamenti e a sua volta ne spiegava le teorie con lucida chiarezza; era anche un esperto di elettrodinamica e di meccanica e, come tale, ebbe una grande influenza sulla formazione teorica di Erwin³.

Il 20 maggio 1910 Schrödinger si laureò con una tesi sulla conducibilità di un isolante esposto all'aria umida, di cui era relatore il fisico sperimentale Franz Serafin Exner (1849–1926)⁴. Dopo aver compiuto un anno di servizio militare volontario come ufficiale⁵, divenne assistente di Exner e cominciò l'attività didattica con delle esercitazioni agli studenti. I suoi primi lavori scientifici riguardarono problemi di conducibilità elettronica in relazione all'elettricità atmosferica, alla teoria del magnetismo e dei dielettrici e alla dispersione anomala della luce: erano il frutto di ricerche, anche sperimentali, svolte in stretta collaborazione con Exner stesso e l'altro suo assistente Fritz Karl Wilhelm Kohlrausch (1884–1953)⁶. Altri lavori, più teorici, riguardarono la dinamica reticolare alla luce della teoria dei solidi di Debye⁷. Nel gen-

² Ludwig Eduard Boltzmann (1844–1906) ha dato fondamentali contributi alla meccanica statistica e alla teoria atomistica, ma visse in un clima di incomprendimento scientifica per lui traumatizzante, che forse aggravò i motivi del suo suicidio avvenuto il 5 settembre 1906 a Duino, presso Trieste.

³ Lo stesso Schrödinger, nelle note autobiografiche da lui scritte in occasione della pubblicazione del suo discorso Nobel (in *Les Prix Nobel en 1933*, Imprimerie Royale P.A. Norstedt & Söner, Stoccolma, 1935, p. 86–87; trad. it. in S. Boffi: *Onde di materia e onde di probabilità*, Quaderni di Fisica Teorica, n. 2, Università di Pavia, 1989, pp. 27–41) ricorda: “in un ciclo, che si protrasse per otto semestri, ciascuno di cinque ore di lezione alla settimana, le maggiori teorie della meccanica e i problemi agli autovalori della fisica del continuo mi vennero presentati proprio nel dettaglio con cui più tardi mi sarebbero stati necessari”.

⁴ E. Schrödinger: *Über die Leitung der Elektrizität auf der Oberfläche von Isolatoren an feuchter Luft* [Conducibilità elettrica alla superficie di isolanti in aria umida], *Sitzungsberichte der Kaiserlichen Akademie der Wissenschaften* (Wien) **119** (1910) 1215–1222.

⁵ La leva obbligatoria era di tre anni, ma per un ufficiale volontario essa era ridotta a un solo anno.

⁶ Fritz era un altro discepolo di Boltzmann. Nel 1855 il nonno di Fritz, Rudolf Kohlrausch (1809–1858), con Wilhelm Eduard Weber (1804–1891), aveva determinato la velocità della luce confrontando le unità di carica elettrostatica e elettromagnetica. La ricerca faceva parte del programma di determinazione di un sistema di unità “assolute” di misura che Weber andava sviluppando con Johann Friedrich Karl Gauss (1777–1855) a Göttingen.

⁷ La teoria dei calori specifici dei solidi, elaborata nel 1912 da Petrus Josephus Wilhelmus Debye [Peter Debye] (1884–1966), migliorava l'approccio di Albert Einstein (1879–1955) tenendo conto che nei solidi ci sono onde sonore longitudinali e trasversali; ma anche per Debye, come per Einstein, a queste onde si doveva associare la stessa idea di discretizzazione dell'energia in termini di quanti che aveva permesso a Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858–1947) di spiegare lo spettro della radiazione di corpo nero nel 1900, avviando quel processo di idee che ha dato origine alla meccanica quantistica. Debye ricevette il premio Nobel per la Chimica nel 1936 per il contributo dato alla conoscenza della struttura molecolare

naio 1914, grazie a questa attività scientifica, Erwin divenne libero docente conseguendo la *Habilitation*.

Durante la prima guerra mondiale prestò servizio, prima come ufficiale di artiglieria sul fronte italiano lungo l'Isonzo e poi come insegnante di meteorologia in una scuola militare vicino a Vienna. Contrariamente al suo maestro e amico Hasenhörl⁸, Schrödinger subì piuttosto le vicende storiche, cercando rifugio nella ricerca e interessandosi, oltre che di fisica dei solidi, anche del moto browniano e della teoria della gravitazione. In questi anni bui si dedicò anche a varie letture filosofiche, approfondendo la sua conoscenza di autori quali Spinoza, Schopenhauer, Avenarius, Mach⁹.

Era ormai un fisico affermato quando, il 24 marzo 1920, sposò Annamarie (Anny) Bertel, di nove anni più giovane di lui. Nello stesso anno fu chiamato

mediante diffrazione di raggi X nei gas, grazie al metodo da lui sviluppato intorno al 1915 a Göttingen con Paul Scherrer (1890–1969).

⁸ Hasenhörl, partito volontario per il fronte, morì a Folgaria (l'allora Vielgereuth) durante un assalto alla guida della sua compagnia.

⁹ Benedetto (Baruch) de Spinoza (1632–1677) è il filosofo occidentale moderno che ha riformulato in modo radicale il monismo immanentistico e panteistico della tradizione neoplatonica. Di famiglia ebrea d'origine spagnola, emigrata per sfuggire all'Inquisizione, nacque ad Amsterdam e si formò nella locale comunità israelitica in cui questa tradizione era particolarmente viva, ma ne venne espulso come eretico.

Nella ricerca dell'unità dell'essere, infranta da René Descartes (Cartesio, 1596–1650) con la netta separazione tra una *res cogitans* totalmente libera e una *res extensa* meccanica e necessaria, Spinoza realizza una sintesi tra la concezione metafisico-teologica e la concezione scientifica del mondo. Il punto centrale della sua filosofia è il concetto di sostanza, la cui realtà va riferita a Dio come *natura naturante*, che esiste in sé e si manifesta singolarmente nel molteplice come *natura naturata*. L'atto libero creativo di Dio è conseguenza di un ordine necessario che appartiene alla sua stessa natura: un ordine geometrico che fa scaturire le cose come i singoli teoremi scaturiscono dai postulati della geometria. Le cose però non derivano da Dio per creazione, come nella tradizione giudaico-cristiana, o per emanazione, come nelle dottrine di ispirazione platonica; esse piuttosto si concatenano e si saldano tra di loro nella necessità della sostanza divina come le singole proposizioni all'interno della geometria. Così il problema della conoscenza delle singole realtà è ricondotto alla conoscenza di Dio che è *Deus sive Natura*, nel quale le cose appaiono illusoriamente contingenti, mentre *sub specie aeternitatis* riacquistano la loro necessità: è in questa percezione dell'Assoluto che si raggiunge un'*Ethica ordine geometrico demonstrata*, come titola la sua opera principale, uscita postuma nel 1677.

Di Arthur Schopenhauer (1788–1860) Schrödinger aveva letto tutta l'opera, apprezzandone soprattutto il richiamo alla mistica indiana. Partendo dalla distinzione introdotta da Immanuel Kant (1724–1804) tra noumeno e fenomeno, Schopenhauer ritiene però che il noumeno sia conoscibile attraverso la volontà, una volontà infinita, una e indivisibile, di cui partecipano tutti gli uomini e che si oggettivizza nel fenomeno: questo dunque esiste solo come rappresentazione, cioè sempre e soltanto in relazione con un altro essere che lo percepisce ricorrendo alle forme a priori della coscienza: spazio, tempo, causalità. L'intelletto, nell'ordinare i dati delle intuizioni spazio-temporali attraverso la categoria della causalità, non è però in grado di portarci oltre il mondo sensibile, oltre il fenomeno: la volontà percipiente è illusione che vela la realtà delle cose nella loro intima essenza, come il "velo di maya" dei *Veda* maschera la conoscenza del mondo. Ma, contrariamente a Kant, Schopenhauer ritiene che il noumeno sia conoscibile proprio attraverso la volontà, tensione continua, lacerante, che si annienta nell'esperienza estetica quando viene raggiunta la consapevolezza non di sé, ma dell'oggetto intuito. Il riconoscimento quindi dell'unità della volontà in tutti

a Jena come assistente di Max Wien¹⁰. Dopo sei mesi fu nominato professore straordinario a Stoccarda e, dopo un altro semestre, professore ordinario a Breslau. Nell'ottobre 1921, in sostituzione di Max Theodor Felix von Laue (1879–1960), si trasferì a Zurigo¹¹. Qui rimase sei anni, un periodo fertile e sereno, anche se turbato inizialmente da problemi di salute che lo costrinsero a un soggiorno di sei mesi ad Arosa per curarsi da un attacco di tubercolosi. È di questo periodo, trascorso a contatto di colleghi, quali Hermann Weyl¹² e Peter Debye¹³, di cui divenne grande amico, il gruppo più importante dei suoi lavori, dedicato alla quantizzazione come problema agli autovalori, che viene presentato e discusso in questo Quaderno.

“... Nel suo lavoro sugli spettri¹⁴ stava utilizzando naturalmente la teoria

gli uomini, al di là dell'illusoria molteplicità, è possibile attraverso un'atto di liberazione che lacera questo velo e che Schopenhauer individua nell'asceti: purificarsi da ogni volontà e passione, trasformando la *voluntas* in *noluntas*, permette all'uomo di liberarsi dalla fatale alternanza di dolore e di noia nella sazietà.

Richard Avenarius (1843–1896), professore di filosofia induttiva a Zurigo, fu uno degli esponenti dell'empirio-criticismo. Nel costruire una filosofia come scienza che escluda ogni metafisica, Avenarius privilegia l'esperienza pura, quella che precede la distinzione tra fenomeno fisico e fenomeno psichico. Per lui, individuo e ambiente circostante non sono due realtà separate e opposte: l'uomo ha esperienza dell'ambiente nello stesso senso in cui ha esperienza di se stesso. La distinzione tra fisico e psichico è solo conseguenza di una falsificazione dell'esperienza, provocata da un processo fittizio, l'introiezione, che genera le sensazioni personali e rompe la naturale unità del mondo empirico.

Ernst Mach (1838–1916) fu professore di fisica e poi di filosofia all'Università di Vienna. Per Mach la distinzione tra fenomeno fisico e fenomeno psichico è puramente convenzionale e di carattere pratico. Essa scaturisce solo da come si considerano le sensazioni, che sono i veri elementi originari dell'esperienza: un colore è un fatto fisico se lo si fa dipendere dalla fonte luminosa, ma diventa psichico se messo in relazione alla retina dell'occhio. La scienza è solo un modo economico di maneggiare le sensazioni attraverso la definizione di leggi naturali che mettono in relazione tra di loro i caratteri distintivi dei fenomeni.

Perciò Mach si trovava in netto contrasto col realismo del collega Boltzmann e dei suoi allievi, che cercavano di unificare meccanica e termodinamica alla luce dell'atomismo e di un'interpretazione statistica delle leggi termodinamiche.

¹⁰ Max Wien (1866–1938) era cugino di Wilhelm Carl Werner Otto Fritz Franz Wien (1864–1928), che aveva ricevuto il premio Nobel per la Fisica nel 1911 per essere riuscito a spiegare la cosiddetta legge dello spostamento, riguardante il legame tra la temperatura e la frequenza di picco dello spettro della radiazione di corpo nero.

¹¹ Nello stesso anno, il 12 settembre, gli venne a mancare la madre; il padre era già morto il 24 dicembre 1919. Schrödinger confessa di non avere prestato ai suoi genitori in questi ultimi anni tutta l'attenzione necessaria, causa questa da lui attribuita agli incubi notturni avuti tra il 1919 e il 1921: “che io sia per il resto raramente afflitto da incubi non contrasta con questa interpretazione, perché in verità non accade spesso che, come si dice, qualcosa mi provochi rimorsi di coscienza” (così scrive due mesi prima di morire; cfr. E. Schrödinger: *La mia visione del mondo. La mia vita - Poesie, loc. cit.*, p. 116).

¹² Hermann Weyl (1885–1955), fisico e matematico, ha continuato l'opera di Einstein tesa a trasferire in proprietà geometriche dello spazio-tempo gli aspetti della dinamica relativistica.

¹³ Debye si era trasferito a Zurigo da poco, provenendo da Göttingen.

¹⁴ Così ricorda Dirac nel necrologio, da lui scritto su *Nature* [189 (1961) 355–356], riferendosi

orbitale di Bohr ¹⁵, ma trovava sempre insoddisfacenti le condizioni quantiche di tale teoria e sentiva che gli spettri atomici si sarebbero dovuti realmente determinare mediante qualche tipo di problema agli autovalori. Nel 1924, de Broglie ¹⁶ pubblicò il suo lavoro sulle onde associate al moto di particelle libere. Ciò influenzò profondamente Schrödinger e lo indusse a tentare di generalizzare le onde di de Broglie al caso di particelle legate. Alla fine ottenne una soluzione chiara del problema che portava alla comparsa di livelli energetici come autovalori di un certo operatore. Immediatamente applicò il suo metodo all'elettrone dell'atomo di idrogeno, prendendo in dovuta considerazione la meccanica relativistica per il moto dell'elettrone, così come aveva fatto de Broglie. I risultati non erano in accordo con le osservazioni. Ora noi sappiamo che il metodo di Schrödinger era corretto e che le discrepanze erano dovute solamente al non aver considerato lo spin dell'elettrone ¹⁷. Tuttavia lo spin dell'elettrone a quel tempo era sconosciuto e Schrödinger rimase molto deluso, concluse che il suo metodo non era adatto e lo abbandonò. Solo dopo qualche mese vi ritornò e notò che, se avesse trattato l'elettrone non relativisticamente, il suo metodo avrebbe dato risultati in accordo con le osservazioni in approssimazione non relativistica. Scrisse il suo lavoro e lo pubblicò nel 1926. Fu con questo ritardo che l'equazione d'onda di Schrödinger fu presentata al mondo . . . ”

Per questa serie di lavori Erwin Schrödinger fu insignito del premio Nobel per la Fisica nel 1933 insieme con lo stesso Dirac che aveva chiarito il problema dello spin dell'elettrone.

Nell'ottobre 1927 Schrödinger si trasferì a Berlino sulla cattedra lasciata vacante da Max Planck dopo circa quaranta anni di insegnamento. Berlino era un centro di attività scientifica molto importante e Schrödinger vi si trovò certamente a suo agio; ma da un punto di vista della produzione scientifica il periodo berlinese è caratterizzato principalmente come un periodo di riflessione

al racconto che lo stesso Schrödinger gli fece.

¹⁵ È la teoria che Niels Henrik David Bohr (1885–1962) originariamente sviluppò durante la sua tesi di dottorato per rendere conto degli spettri a righe degli atomi, imponendo che la radiazione venisse emessa o assorbita solo quando l'elettrone nell'atomo salta da un orbitale all'altro, mentre un elettrone in moto stazionario su un orbitale non irraggia.

N. Bohr: *On the constitution of atoms and molecules* [Sulla struttura degli atomi e delle molecole], *Philosophical Magazine* **26** (1913) 1–25, 476–502, 857–875.

¹⁶ L'ipotesi della natura ondulatoria dell'elettrone, e in generale di ogni cosiddetta particella della fisica atomica, fu proposta da Louis-Victor de Broglie (1892–1987) nel corso degli studi per la sua tesi dottorato: *Recherches sur la théorie des quanta* [Ricerche sulla teoria dei quanti], *Annales de Physique* **3** (1925) 22–128. Cfr. anche S. Boffi: *Le onde di de Broglie*, Quaderni di Fisica Teorica, n. 1, Università di Pavia, 1989.

¹⁷ Fu proprio lo stesso Dirac a scoprire la natura relativistica dello spin dell'elettrone nel cercare di generalizzare al caso relativistico il formalismo della meccanica quantistica.

Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984): *The Quantum Theory of the Electron* [La teoria quantistica dell'elettrone], *Proceedings of the Royal Society of London* **A117** (1928) 610–624; *The Quantum Theory of the Electron. Part II* [La teoria quantistica dell'elettrone. II parte], *Proceedings of the Royal Society of London* **A118** (1928) 351–361.

sul significato dei risultati della scienza ¹⁸.

L'avvento al potere del partito nazionalsocialista nella primavera del 1933 convinse Schrödinger a lasciare la Germania. Grazie all'interessamento di Lindemann ¹⁹ nell'ottobre fu chiamato al Magdalen College di Oxford con un contratto di cinque anni.

Nel periodo di permanenza in Inghilterra, tra il 1934 e il 1936, tenne dei corsi di lezione anche all'Università di Madrid, dove sembrava che gli potessero proporre una cattedra; ma prima di arrivare a una decisione conclusiva scoppiò la guerra civile in Spagna. Ricevette invece un'analogha offerta contemporaneamente dalle Università di Edinburgo in Scozia e di Graz in Austria. Il richiamo della terra natia indusse Schrödinger a scegliere Graz, mentre a Edinburgo andò Max Born (1882–1970), anche lui in esilio volontario per motivi politici.

Nell'agosto 1938, in seguito all'annessione dell'Austria alla Germania avvenuta in marzo, Schrödinger fu licenziato, perché il suo allontanamento dalla Germania nel 1933 veniva interpretato dalle autorità naziste come un atto ostile ²⁰. Approfittando del fatto che ancora non gli era stato ritirato il passaporto e che per valicare il confine italo-austriaco non c'era bisogno di visto, si rifugiò in Vaticano presso l'Accademia Pontificia, di cui era membro. Di qui, con l'aiuto di amici comuni suoi e di Born, riparò di nuovo a Oxford e quindi a Gent in Belgio, dove venne invitato come professore in visita. Questa era una soluzione provvisoria in attesa di poter andare a Dublino, da dove il primo ministro irlandese, Eamon de Valera ²¹, volendo istituire un centro di studi storici e matematici, si era messo in contatto con Schrödinger.

Dopo il primo settembre 1939, con l'invasione della Polonia da parte

¹⁸ È in questo periodo, per esempio, che riesce a pubblicare il testo della sua prolusione all'Università di Zurigo del 9 dicembre 1922: *Was ist ein Naturgesetz? [Che cos'è una legge naturale?]*, *Die Naturwissenschaften* **17** (1929) 9–11, riportata in traduzione italiana nel volume *L'immagine del mondo*, Boringhieri, Torino, 1963, pp. 11–19.

¹⁹ Frederick Alexander Lindemann (1886–1957) era stato allievo di Walter Hermann Nernst (1864–1941) a Berlino nello studio dei calori specifici dei solidi, trasferendosi poi a Oxford nel 1919 dove sviluppò un centro di fisica delle basse temperature. Dal 1933 si prodigò anche a favore dei rifugiati tedeschi in Inghilterra. Fu nominato Lord Cherwell per i suoi servizi di consigliere del governo britannico.

²⁰ Al richiamo delle autorità aveva anche risposto in maniera ambigua: come riportato in *Nature* **141** (1938) 929, il 30 marzo 1938 sul giornale di Graz *Tagespost* comparve una lettera di Schrödinger al Senato Accademico dell'Università in cui faceva pubblica confessione di non avere compreso bene, stando seduto al suo tavolo di lavoro, “la reale volontà e il vero destino della mia terra”.

²¹ Nato a New York da una famiglia con origini irlandesi e spagnole, Eamon de Valera (1882–1975) fu una personalità eccezionale per interessi scientifici e ampiezza di disegno politico. Condannato a morte per i moti irlandesi del 1916, ma successivamente amnistiato, prese parte attiva nei primi atti dello Stato Libero d'Irlanda costituitosi nel 1922. Nel 1932 divenne capo del governo irlandese e ministro degli esteri, cariche che tenne fino al 1948. Nel 1932 fu anche eletto presidente del Consiglio della Lega delle Nazioni, con sede in Ginevra, e nel 1938 presidente dell'Assemblea della stessa. Tra il 1959 e il 1973 fu Presidente della Repubblica d'Irlanda.

delle truppe naziste, anche la situazione in Belgio diventava pericolosa: interrompendo una lunga vacanza sulla costa atlantica belga a La Panne e accettando l'invito urgente di de Valera, il sette ottobre Schrödinger con la moglie raggiunse Dublino dove divenne professore dell'Accademia Reale Irlandese. L'Institut for Advanced Studies di Dublino fu fondato solo nel 1940, con due sezioni: una di studi celtici e l'altra di fisica teorica. Schrödinger fu nominato direttore della sezione di fisica teorica nel 1941, carica che tenne fino al 1956.

In questo periodo Schrödinger poté dedicarsi alle questioni filosofiche, continuando a lavorare scientificamente e prestandosi a cicli di conferenze che venivano seguiti da un pubblico attento e numeroso²². Resta famoso il ciclo di lezioni, tenuto nel 1943 al Trinity College di Dublino, sulla spiegazione fisica del fenomeno della vita²³, che costituisce spunto interessante e controverso per la moderna biologia molecolare²⁴.

Personalità libera e anticonformista²⁵, dedicava molto tempo alla riflessione filosofica. In profondo disaccordo con Kant, Schrödinger riteneva che proprio nell'ambito della conoscenza la metafisica è una guida indispensabile: "se eliminiamo la metafisica, arte e scienza si riducono a miseri oggetti senza anima, incapaci di ogni evoluzione ulteriore"²⁶. Ma la sua metafisica è ispirata da Schopenhauer: con lui, sente il fascino della filosofia indiana dei *Veda*, per la quale la realtà percepita è solo rappresentazione mentale, espressione di una Mente Universale. Il *karman*, l'idea che non appartiene a un singolo individuo, ma che esiste e vive di generazione in generazione, anche per lui è alla base di una consapevolezza universale che mette in relazione gli individui

²² I suoi interessi principali riguardarono problemi di elettrodinamica nonlineare e il tentativo di una teoria di campo unificata per il campo elettromagnetico e quello gravitazionale.

Per notizie sul periodo irlandese della vita di Schrödinger si vedano gli articoli di Sir William McCrea (*Eamon de Valera, Erwin Schrödinger and the Dublin Institute*, in *Schrödinger. Centenary celebration of a polymath*, ed. C.W. Kilmister, Cambridge University Press, 1987, pp. 119–135) e di James McConnell (*Erwin Schrödinger (1887–1961) Austro-Irish Nobel Laureate*, Occasional Papers in Irish Science and Technology, Royal Dublin Society, 1988, n. 5).

²³ *What is Live? The Physical Aspects of the Living Cell*, Cambridge University Press, 1944 [traduzione italiana in *Che cos'è la vita?*, Sansoni, Firenze, 1947, *Scienza e umanesimo. Che cos'è la vita?*, Sansoni, Firenze, 1970, 1978].

²⁴ Si vedano, ad esempio i contributi di Linus Pauling (n. 1901) (*Schrödinger's contribution to chemistry and biology*, pp. 225–233) e di Max Ferdinand Perutz (n. 1914) (*Erwin Schrödinger's What is Life? and molecular biology*, pp. 234–251) nel libro: *Schrödinger. Centenary celebration of a polymath*, loc. cit.

²⁵ È spesso ricordato il suo procedere a piedi, con calzoncini alla zuava e zainetto in spalla, dalla stazione al lussuoso albergo di Bruxelles, sede dei Congressi Solvay, frequentati da un ristretto numero di fisici, autorevoli anche nella foggia del loro vestire.

²⁶ E. Schrödinger: *La mia visione del mondo*, loc. cit., p. 19.

Oltre a suggestive poesie e a uno sguardo d'insieme alla sua vita due mesi prima di morire, il libro raccoglie un saggio a carattere filosofico composto di due parti scritte a distanza di trentacinque anni, nel 1925 e nel 1960, ma che dimostrano una mirabile unità e profondità di pensiero.

nello spazio e nel tempo e che non muore con l'individuo ²⁷.

Affascinato dalla lettura dei libri di Semon ²⁸, era convinto dell'esistenza di una sola coscienza, grazie alla quale il mondo giunge a manifestarsi e quindi a esistere. Questa coscienza si estrinseca negli atti individuali di un processo di apprendimento, ma le competenze, una volta acquisite, tendono a eclissarsi dalla sfera della coscienza per entrare in un patrimonio universale inconscio che costituisce la realtà unica: "cosciente è ciò che diviene, ciò che è, è inconscio" ²⁹.

Ma "nessun io è solo. Alle sue spalle s'allunga una catena di esperienze fisiche e, loro sottospecie particolare, intellettuali; l'io ne è l'ultimo anello, a esse reagisce e dà seguito" ³⁰. "La molteplicità degli esseri viventi è solo apparenza (*maya*); essi sono in realtà aspetti di un *unico Essere*" ³¹. Allora il mondo fisico, come espressione di una Mente Universale, deve avere una struttura razionale comprensibile alle menti individuali, che di questa Mente Universale sono manifestazione. Proprio in virtù di questa razionalità del reale, Schrödinger dunque, che pure era affascinato dalla visione del mondo emergente dalle filosofie orientali, non poteva accettare la rinuncia a una descrizione

²⁷ Fondandosi anche su Schopenhauer, Schrödinger si lasciava spesso travolgere dall'innamoramento, quasi ritenendolo un processo con cui il noumeno kantiano entra nel mondo dei fenomeni o, meglio, quasi l'amplesso sessuale fosse la prefigurazione dell'illuminazione buddista che recupera l'unità del reale: l'amore diventa preludio dell'unione mistica delle scritture induiste.

Così, da una relazione con Hildegunde (Hilda) March, il 30 aprile 1934 nasce Ruth Georgie Erica. Hildegunde aveva sposato quattro anni prima il fisico Arthur March (1891–1957), autore di un interessante testo sulla teoria dei quanti (*Theorie der Strahlung und der Quanten*, J.A. Barth, Lipsia, 1919), ma forse dotato di minor fascino di un prossimo premio Nobel. Amante del teatro da sempre, Erwin nella primavera del 1944 si invaghisce per due mesi di un'attrice, Sheila May Greene, moglie di David Greene, professore di lingue moderne e celtiche. Per lei scrive molte delle poesie che fan parte della raccolta pubblicata nel 1949 (*Gedichte*, riportate tradotte in *La mia visione del mondo*, loc.cit.) Il 9 giugno 1945 nasce Blathnaid Nicolette, allevata poi da David Greene che si era nel frattempo separato dalla moglie. Ma nella primavera 1945 l'interesse di Erwin si era già rivolto a un'altra donna, impiegata in un ufficio governativo. Nella ricostruzione minuziosa e piuttosto pettegola della vita di Schrödinger fatta dal chimico fisico Walter J. Moore (*Schrödinger. Life and Thought*, Cambridge University Press, 1989) di questa donna viene citato solo lo pseudonimo, Kate Nolan. Da lei nasce il 3 giugno 1946 Linda Mary Therese, cui fu dato il cognome Russell, cognome del nonno materno di Schrödinger.

²⁸ Richard Semon (1859–1918) era uno zoologo tedesco, seguace di Jean-Baptiste de Monet de Lamarck (1744–1829), biologo francese e primo sostenitore di una teoria dell'evoluzione delle specie. In due libri, che Schrödinger aveva letto in gioventù, Semon sosteneva, come Lamarck, l'ereditarietà del patrimonio acquisito dagli organismi viventi: la traccia lasciata nell'individuo dagli stimoli esterni è permanente e ereditaria, ricomparendo attraverso l'inconscio come un registro di memoria (*mneme*).
R. Semon: *Die Mneme als erhaltendes Prinzip in Wechsel des organischen Geschehens*, Engelmann, Lipsia, 1904; *Die mnemischen Empfindungen in ihren Beziehungen zu den Originalempfindungen*, Engelmann, Lipsia, 1909.

²⁹ *La mia visione del mondo*, loc.cit., p. 57.

³⁰ *La mia visione del mondo*, loc.cit., p. 39.

³¹ *La mia visione del mondo*, loc.cit., p. 97.

oggettiva dei fenomeni fisici, quale imposta dall'interpretazione probabilistica che la scuola di Copenhagen, sviluppatasi attorno a Bohr, aveva assegnato alla sua soluzione della formulazione quantistica ³².

Nel marzo 1956 tornò a Vienna per ricoprire la cattedra di Fisica Teorica fino al settembre 1958, quando fu nominato professore emerito.

Già insignito della medaglia Matteucci nel 1927 e della medaglia Max Planck nel 1937, membro della Royal Irish Academy, della Royal Society di Londra, dell'Accademia Pontificia delle Scienze, dell'Accademia dei Lincei e dell'Accademia dei Quaranta, trovò in patria rinnovata ammirazione con l'ordine al merito della pace conferitogli dalle autorità viennesi nel 1957. In occasione del centenario della nascita, inoltre, la sua effigie venne riprodotta sulle banconote da 1000 scellini.

Dopo lunga malattia Erwin Schrödinger morì nella natia Vienna il 4 gennaio 1961, assistito dalla moglie che gli sopravvisse quattro anni. Fu sepolto ad Alpbach, sulle alpi tirolesi, dove amava trascorrere le vacanze e dove la famiglia acquistò una casa con i soldi del suo premio Nobel.

§ 2. 1926: un anno di grazia

La meccanica ondulatoria, che oggi fisici e chimici usano quotidianamente per risolvere i problemi riguardanti il comportamento degli atomi e dei nuclei atomici, sorse improvvisamente alla mente di Schrödinger verso la fine del 1925 quando venne a conoscenza dei risultati della tesi di de Broglie. Nel secondo dei due tomi dedicati a Schrödinger ³³, Jagdish Mehra e Helmut Rechenberg ripercorrono quei mesi in cui Schrödinger a Zurigo discuteva di ciò con Debye, il quale giustamente sosteneva che l'ipotesi di de Broglie di un'onda associata alla particella poteva essere accettata solo se si era in grado di scrivere un'equazione d'onda. Però l'idea dell'onda funzionava, perché lo stesso Schrödinger l'aveva usata con successo nella teoria dei gas di Einstein considerando le onde stazionarie associate agli atomi racchiusi in una scatola ³⁴.

³² Si veda ad esempio l'articolo di E. Schrödinger: *Might perhaps Energy be a merely Statistical Concept? [L'energia potrebbe essere forse un concetto puramente statistico?]*, Nuovo Cimento **9** (1958) 162–170. In questo lavoro, letto il 26 marzo 1958 al Congresso congiunto della Società di Fisica e della Società di Chimica-Fisica austriache, Schrödinger sostiene che "l'opinione diffusa che il proposito di dare una descrizione oggettiva della realtà fisica debba essere abbandonato [va] respinta, basandosi sul fatto che il cosiddetto mondo esterno è costituito soltanto di elementi delle singole menti ed è caratterizzato come ciò che è comune a tutti, e riconosciuto da ogni persona sana e ragionevole. Donde è inevitabile la richiesta di una descrizione non soggettiva, naturalmente senza pregiudizio del fatto che essa sia deterministica o di altra natura".

³³ J. Mehra e H. Rechenberg: *The Historical Development of Quantum Theory. Erwin Schrödinger and the Rise of Wave Mechanics*. Vol. 5, Springer-Verlag, New York-Berlino, 1987.

³⁴ Fu lo stesso Einstein a presentarne all'Accademia delle Scienze di Berlino il 7 gennaio 1926 alcuni risultati. Un altro lavoro di Schrödinger su temi collegati era stato ricevuto il 15

Per uno studio della genesi delle idee di Schrödinger è utile la lettura di tre quaderni di appunti, nei quali si trovano con gran dettaglio tutti gli aspetti che hanno trovato sistemazione nella stesura delle quattro comunicazioni sulla quantizzazione come problema agli autovalori ³⁵.

In ordine di ricevimento da parte delle riviste che li hanno pubblicati, vengono qui ricordati i nove lavori originali che il trentottenne Schrödinger scrisse nel 1926.

27 gennaio:

Quantisierung als Eigenwertproblem (Erste Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (prima comunicazione)], Annalen der Physik **79** (1926) 361–376;

23 febbraio:

Quantisierung als Eigenwertproblem (Zweite Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (seconda comunicazione)], Annalen der Physik **79** (1926) 489–527;

18 marzo:

Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen [Relazione tra la meccanica quantistica di Heisenberg-Born-Jordan e la mia], Annalen der Physik **79** (1926) 734–756;

10 maggio:

Quantisierung als Eigenwertproblem (Dritte Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (terza comunicazione)], Annalen der Physik **80** (1926) 437–490;

21 giugno:

Quantisierung als Eigenwertproblem (Vierte Mitteilung) [Quantizzazione come problema agli autovalori (quarta comunicazione)], Annalen der Physik **81** (1926) 109–139;

9 luglio:

Der stetige Übergang von der Mikro– zur Makromechanik [Il passaggio continuo dalla micro– alla macromeccanica], Die Naturwissenschaften **14** (1926) 664–666;

3 settembre:

An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules [Una teoria ondulatoria della meccanica di atomi e molecole],

dicembre 1925 dalla rivista *Physikalische Zeitschrift*.

E. Schrödinger: *Die Energiestufen des idealen einatomigen Gasmodells [I livelli energetici del modello di gas perfetto monoatomico]*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften (Berlino, 1926) 23–36; *Zur Einsteinschen Gastheorie [Teoria dei gas di Einstein]*, *Physikalische Zeitschrift* **27** (1926) 95–101.

³⁵ Cfr. J. Mehra e H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory. Erwin Schrödinger and the Rise of Wave Mechanics*. Vol. 5, loc. cit., cap. III.

Physical Review **28** (1926) 1049–1070;

30 novembre:

Über den Comptoneffekt [Sull'effetto Compton],

Annalen der Physik **82** (1927) 257–264;

10 dicembre:

Der Energieimpulssatz der Materiewellen [La legge dell'energia e dell'impulso delle onde di materia],

Annalen der Physik **82** (1927) 265–272.

I primi sei di questi lavori, per la loro eccezionale importanza, furono subito raccolti in un volume e costituirono il primo manuale di meccanica ondulatoria, che si arricchì anche degli altri nelle successive edizioni ³⁶.

§ 3. Alcune difficoltà matematiche

L'ipotesi di de Broglie sul comportamento ondulatorio delle particelle era scaturita dallo studio del moto libero inteso come una propagazione ondulatoria. Schrödinger invece è interessato all'utilizzo dell'idea per riprodurre la fenomenologia degli stati legati di un elettrone nell'atomo d'idrogeno. L'onda di de Broglie, la cui lunghezza d'onda si sintonizza alla lunghezza dell'orbita chiusa descritta dall'elettrone, diventa così un'onda stazionaria di cui Schrödinger propone l'equazione di definizione. Tale equazione è però un'equazione differenziale alle derivate parziali del secondo ordine nelle coordinate spaziali e per la sua risoluzione occorrono tecniche allora ben note ormai da trenta anni ai matematici, ma meno note ai fisici dell'epoca. Nella sua prima comunicazione, aiutato anche da Weyl, suo collega a Zurigo, Schrödinger riepilora un libro sulle equazioni differenziali ³⁷ che forse aveva letto ai tempi degli studi universitari e da cui trae risultati che presenta senza dimostrazione. Solo in occasione della più completa seconda comunicazione, Schrödinger ricorre al testo fondamentale di Richard Courant (1888–1972) e David Hilbert (1862–1943) ³⁸ che è tuttora il testo di riferimento per questo tipo di problemi.

Allo scopo di facilitare la comprensione di quanto viene discusso nella prima comunicazione, qui si presenta, sulla linea del testo di Schlesinger, la

³⁶ E. Schrödinger: *Abhandlungen zur Wellenmechanik*, J.A.Barth, Lipsia, 1927, seconda edizione 1928. La traduzione inglese, a opera di J.F. Shearer, apparve l'anno successivo: *Collected Papers on Wave Mechanics*, Blackie and Son, Ltd., Londra e Glasgow, 1928.

Per un'introduzione alla lettura di alcuni lavori fondamentali per la meccanica ondulatoria, tra i quali alcuni brani (tradotti in inglese) di quelli qui presentati, si veda anche il testo di Gunther Ludwig: *Wave Mechanics*, Pergamon Press, Oxford, 1968.

³⁷ Ludwig Schlesinger (1864–1933): *Einführung in die Theorie der Differentialgleichungen mit einer unabhängigen Variablen*, (Sammlung Schubert, n. 13), G.J. Göschen, Lipsia, 1900.

³⁸ R. Courant e D. Hilbert: *Methoden der mathematischen Physik*, 2 voll., Springer, Berlino, 1924.

derivazione dell'andamento asintotico (17) di p. 33 della soluzione dell'equazione (7') di p. 31, valido per grandi valori della coordinata radiale r dell'elettrone.

Se si rappresenta la soluzione U della (7') mediante la trasformata di Laplace,

$$U(r) = \int_L dz w(z) e^{zr},$$

e si indica con D_r l'operatore che agisce sulla U nel primo membro della (7') di Schrödinger, $D_r U(r) = 0$, si ottiene:

$$D_r U = D_r \int_L dz w(z) e^{zr} = \int_L dz w(z) D_r e^{zr}.$$

D'altra parte:

$$\begin{aligned} D_r e^{zr} &= (\delta_1 z + \epsilon_1) e^{zr} + (z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0) r e^{zr} \\ &= (\delta_1 z + \epsilon_1) e^{zr} + (z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0) \frac{de^{zr}}{dz} \\ &\equiv \Delta_z e^{zr}, \end{aligned}$$

cioè l'operatore del *secondo* ordine D_r rispetto a r si è trasformato in un operatore del *primo* ordine rispetto a z . Perciò:

$$D_r U = \int_L dz w(z) \Delta_z e^{zr}.$$

Per l'integrando vale l'identità:

$$\begin{aligned} w \Delta_z e^{zr} &= e^{zr} \left\{ (\delta_1 z + \epsilon_1) w - \frac{d}{dz} \left[(z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0) w \right] \right\} \\ &\quad + \frac{d}{dz} \left[(z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0) e^{zr} w \right]. \end{aligned}$$

Allora la (7') di Schrödinger è soddisfatta se la funzione $w(z)$ soddisfa la seguente equazione differenziale del primo ordine:

$$\frac{d}{dz} \left[(z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0) w \right] - (\delta_1 z + \epsilon_1) w = 0, \quad (1)$$

e il cammino di integrazione L nella trasformata di Laplace è scelto in modo che sia:

$$\int_L \frac{d}{dz} \left[(z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0) e^{zr} w(z) \right] dz = 0. \quad (2)$$

L'equazione

$$\frac{d}{dz} [q(z)w(z)] = p(z)w(z),$$

con

$$q(z) = z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0, \quad p(z) = \delta_1 z + \epsilon_1,$$

può scriversi anche nella forma:

$$\frac{d \log(qw)}{dz} = \frac{p}{q},$$

che ammette l'integrale:

$$w = \text{cost.} \frac{1}{q} e^{\int dz p/q}.$$

I punti singolari dell'equazione (1) per w sono le radici c_1 e c_2 dell'equazione:

$$q(z) = 0,$$

cioè

$$z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0 = (z - c_1)(z - c_2) = 0.$$

Ricordando la (11) di Schrödinger, ciò significa:

$$c_{1,2} = \pm \sqrt{-\frac{2mE}{K^2}},$$

in accordo con la (14'') di Schrödinger. Allora:

$$\frac{p}{q} = \frac{\delta_1 z + \epsilon_1}{(z - c_1)(z - c_2)} = \frac{\alpha_1}{z - c_1} + \frac{\alpha_2}{z - c_2},$$

dove

$$\alpha_1 = \frac{\delta_1 c_1 + \epsilon_1}{c_1 - c_2}, \quad \alpha_2 = \frac{\delta_1 c_2 + \epsilon_1}{c_2 - c_1},$$

in accordo con la (14') di Schrödinger. Per Schrödinger, con la sua equazione (11) e la sua scelta (10) per α , ciò comporta:

$$\alpha_{1,2} = \pm \frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} + n + 1,$$

in accordo con la (14'').

Perciò la soluzione w , scegliendo opportunamente le costanti di integrazione, può scriversi nella forma:

$$\begin{aligned} w(z) &= \frac{1}{q} (z - c_1)^{\alpha_1} (z - c_2)^{\alpha_2} \\ &= (z - c_1)^{\alpha_1 - 1} (z - c_2)^{\alpha_2 - 1}, \end{aligned}$$

che implica per U la soluzione (12) scritta da Schrödinger e per il cammino di integrazione L la sua condizione (13).

Per soddisfare la condizione (13) di Schrödinger basta prendere un cammino tale che la primitiva dell'integrando si azzeri agli estremi. Lo scopo si raggiunge scegliendo un cammino chiuso che corre nel piano complesso di z parallelamente all'asse z reale, provenendo dal punto $z \rightarrow -\infty$ e ritornandovi. In questo modo è garantita la condizione (16) di Schrödinger e quindi anche la sua condizione (13).

Se però il cammino chiuso L così costruito non racchiude alcuno dei due punti di singolarità, c_1 e c_2 , per il teorema di Cauchy l'integrale su L della (12) di Schrödinger si azzerà e la soluzione U risulta identicamente nulla. Per evitare ciò occorre che L aggiri almeno o c_1 o c_2 . Siano L_1 e L_2 i corrispondenti cammini e U_1 e U_2 le corrispondenti soluzioni:

$$U_{1,2}(r) = \int_{L_1, L_2} dz e^{zr} (z - c_1)^{\alpha_1 - 1} (z - c_2)^{\alpha_2 - 1}. \quad (3)$$

Queste due soluzioni costituiscono il sistema fondamentale di soluzioni dell'equazione (7') di Schrödinger. La più generale soluzione è una sovrapposizione delle due, che corrisponde a un cammino L che aggira sia c_1 sia c_2 .

Il comportamento asintotico per grandi r delle funzioni U_1 e U_2 è studiato nel testo di Schlesinger ricorrendo alla rappresentazione asintotica di una serie divergente, introdotta da Jules Henry Poincaré (1854–1912)³⁹ e utilizzata da Jakob Horn (1867–1946)⁴⁰, ma già considerata anche da Gauss⁴¹ per lo studio della funzione speciale $\Gamma(\alpha)$.

³⁹ H. Poincaré: *Sur les Équations Linéaires aux Différentielles ordinaires et aux Différences finies* [Equazioni lineari alle derivate ordinarie e alle differenze finite], American Journal of Mathematics **7** (1885) 203–258; *Sur les intégrales irrégulières des équations linéaires* [Sugli integrali irregolari delle equazioni lineari], Acta Mathematica **8** (1896) 295–344. Poincaré riporta nel primo di questi lavori alcuni risultati, rimasti inediti, che aveva già presentato il primo giugno 1880 in occasione del concorso per il Gran Premio delle Scienze Matematiche dell'Accademia delle Scienze di Francia.

⁴⁰ J. Horn: *Verwendung asymptotischen Darstellungen zur Untersuchung der Integrale einer speciellen linearen Differentialgleichung. I. & II.* [Applicazione delle rappresentazioni asintotiche alla ricerca degli integrali di una speciale equazione differenziale lineare. I. & II.], Mathematische Annalen **49** (1897) 453–472, 473–496.

⁴¹ “Ceterum negari nequit, theoriam talium serierum divergentium adhuc quibusdam difficultatibus premi, de quibus forsitan alia occasione pluribus commentabimur” [Del resto non si può negare che la teoria di tali serie divergenti sia finora afflitta da alcune difficoltà di cui forse in altra occasione daremo maggiori commenti]. Come fa notare Schlesinger nel citare

Sia $f(x)$ una funzione, definita nell'intorno del punto $x = \infty$, che perde di definizione in $x = \infty$ in modo però che per $|x|$ che diventa grande secondo una determinata direzione nel piano complesso, per esempio per x reale positivo, sia:

$$\lim_{x \rightarrow +\infty} x^n \left\{ f(x) - \sum_{s=0}^n a_s x^{-s} \right\} = 0$$

per ogni intero positivo n . Allora la serie divergente $\sum_{s=0}^{\infty} a_s x^{-s}$ secondo Poincaré rappresenta asintoticamente la funzione $f(x)$:

$$f(x) \sim \sum_{s=0}^{\infty} a_s x^{-s}.$$

Applicando questa definizione di rappresentazione asintotica alla funzione U_1 nella (3), Schlesinger riesce a dimostrare la seguente relazione:

$$\lim_{r \rightarrow +\infty} r^n \left\{ U_1(r) e^{-c_1 r} r^{\alpha_1} - (-)^{\alpha_1} \left(e^{2\pi i \alpha_1} - 1 \right) \Gamma(\alpha_1) \cdot \sum_{k=0}^n (-)^k f_k \alpha_1 (\alpha_1 + 1) \dots (\alpha_1 + k - 1) r^{-k} \right\} = 0,$$

dove i coefficienti f_k risultano dallo sviluppo in serie (valido per $|z - c_1| < |c_1 - c_2|$):

$$(z - c_2)^{\alpha_2 - 1} \equiv (t + c_1 - c_2)^{\alpha_2 - 1} = \sum_{k=0}^{\infty} f_k t^k,$$

cioè

$$f_k = (c_1 - c_2)^{\alpha_2 - 1 - k} \frac{(\alpha_2 - 1)(\alpha_2 - 2) \dots (\alpha_2 - k)}{k!}.$$

Perciò, nel senso di Poincaré, la rappresentazione asintotica di U_1 risulta:

$$U_1(r) \sim e^{c_1 r} r^{-\alpha_1} (-)^{\alpha_1} \left(e^{2\pi i \alpha_1} - 1 \right) \Gamma(\alpha_1) \sum_{k=0}^{\infty} (-)^k f_k \alpha_1 (\alpha_1 + 1) \dots (\alpha_1 + k - 1) r^{-k}. \quad (4)$$

Similmente:

Gauss nel cap. V, Gauss non ritornò più su queste difficoltà che però ora dovrebbero essere superate dalle considerazioni di Poincaré.

$$\begin{aligned}
U_2(r) &\sim e^{c_2 r} r^{-\alpha_2} (-)^{\alpha_2} \left(e^{2\pi i \alpha_2} - 1 \right) \Gamma(\alpha_2) \\
&\sum_{k=0}^{\infty} (-)^k g_k \alpha_2 (\alpha_2 + 1) \dots (\alpha_2 + k - 1) r^{-k}, \quad (5)
\end{aligned}$$

dove i coefficienti g_k derivano da un analogo sviluppo di $(z - c_1)^{\alpha_1 - 1} = (t + c_2 - c_1)^{\alpha_1 - 1}$ in serie di potenze di t .

Schrödinger nel riprendere queste rappresentazioni asintotiche nella sua equazione (17), limita la serie su k al termine $k = 0$.

Quantizzazione come problema agli autovalori (prima comunicazione) [†]

§ 1. In questa comunicazione vorrei mostrare, innanzi tutto nel caso più semplice dell'atomo di idrogeno (non relativistico e non perturbato), che è possibile sostituire l'usuale regola di quantizzazione con un altro requisito in cui non compare più alcun riferimento a "numeri interi". Piuttosto la presenza di numeri interi si rivela dello stesso tipo di quella associata al *numero di modi* di una corda vibrante. La nuova trattazione è suscettibile di generalizzazioni e tocca, come credo, molto profondamente la vera natura delle regole di quantizzazione.

La forma usuale di queste regole è legata all'equazione alle derivate parziali di Hamilton ⁴²:

[†] di Erwin Schrödinger: *Annalen der Physik* **79** (1926) 361–376, ricevuto il 27 gennaio 1926.

⁴² Le equazioni del moto della formulazione della meccanica classica secondo William Rowan Hamilton (1805–1865) (cfr. n. 78 a p. 45) sono equivalenti alla (1) che è la forma usata da Karl Gustav Jacobi (1804–1851) nelle sue lezioni sulla dinamica (*Vorlesungen über Dynamik*, 1843, pubblicate postume da Alfred Clebsch (1833–1872) (Reiner, Berlino, 1866). Nella (1) la hamiltoniana H è scritta in funzione delle coordinate canoniche di posizione q e di impulso $p = \partial S / \partial q$. La funzione S è l'azione e costituisce l'incognita del problema. Per una particella essa rappresenta l'integrale d'azione:

$$\int_{t_0}^t (E - V) dt = \int_{P_0}^P \sqrt{E - V} ds,$$

preso lungo la traiettoria fisica, effettivamente percorsa dalla particella per andare, nell'intervallo di tempo $t - t_0$, dal punto iniziale P_0 a quello finale P , a energia E costante sotto l'azione del potenziale V .

Per un moto periodico (a traiettoria chiusa, come nel caso dell'elettrone in un atomo) le condizioni di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld attribuiscono a S , come possibili, solo valori multipli interi della costante di Planck h : in questa forma associata all'integrale d'azione, le condizioni di quantizzazione erano state studiate anche da Paul Sophus Epstein (1883–1966), uno studente di Arnold Sommerfeld (1868–1951), per cui talvolta nella letteratura dell'epoca venivano chiamate condizioni di Sommerfeld–Epstein.

N. Bohr: *On the constitution of atoms and molecules* [Sulla struttura degli atomi e delle molecole], *Philosophical Magazine* **26** (1913) 1–25, 476–502, 857–875.

A. Sommerfeld: *Zur Quantentheorie der Spektrallinien* [Teoria quantistica delle righe spettrali], *Annalen der Physik* **51** (1916) 1–94, 125–167.

P.S. Epstein: *Zur Quantentheorie* [La teoria dei quanti], *Annalen der Physik* **51** (1916) 168–188.

Il collegamento tra le condizioni di quantizzazione e l'equazione di Hamilton–Jacobi era stato messo in evidenza da Karl Schwarzschild (1873–1916) e ripreso nel fondamentale testo di Sommerfeld sugli spettri atomici, che lo stesso Schrödinger ben conosceva nella sua quarta edizione del 1922 e continuamente cita in questa serie di lavori.

$$(1) \quad H\left(q, \frac{\partial S}{\partial q}\right) = E.$$

Di questa equazione viene ricercata una soluzione rappresentabile come *somma* di funzioni, ciascuna di un'unica variabile indipendente q ⁴³.

Introduciamo ora per S una nuova funzione incognita ψ , tale che ψ risulti *prodotto* delle suddette funzioni di coordinata singola. Cioè poniamo ⁴⁴:

$$(2) \quad S = K \log \psi.$$

La costante K deve essere introdotta per ragioni dimensionali: essa ha le dimensioni di un'azione. Con ciò si ottiene ⁴⁵:

$$(1') \quad H\left(q, \frac{K}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = E.$$

Adesso *non* cerchiamo una soluzione dell'equazione (1'); piuttosto imponiamo la seguente condizione. Sempre, se si trascura la variabilità della massa, un po'

K. Schwarzschild: *Zur Quantenipothese [Ipotesi dei quanti]*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften (Berlino, 1916), 548–568.

A. Sommerfeld: *Atombau und Spektrallinien*, F. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1919.

⁴³ Questa ipotesi corrisponde ad assumere moti indipendenti per le varie q .

⁴⁴ La (2) trasforma una somma di contributi indipendenti relativi alle varie q nella S in un prodotto nella ψ . Altrimenti scritta,

$$\psi = e^{S/K},$$

acquista l'aspetto di un'onda, l'onda di de Broglie, che, sintonizzata alla lunghezza dell'orbita descritta dall'elettrone, impone la quantizzazione della fase S/K , in accordo con le regole di Bohr–Sommerfeld. Comunque la (2), come riconosce lo stesso Schrödinger all'inizio della sua seconda comunicazione (v. p. 45), è una trasformazione “di per sé incomprensibile”.

⁴⁵ Esplicitamente, per una particella con hamiltoniana $H = p^2/(2m) + V$, la (1') può scriversi come una forma quadratica della ψ e delle sue derivate prime, uguagliata a zero (cfr. la (1'') successiva):

$$\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z}\right)^2 + \frac{2m}{K^2}(V - E)\psi^2 = 0.$$

In questa forma la (1') è uguale all'equazione dell'iconale in ottica se si identifica il termine $(2m/K^2)(V - E)$ con il quadrato dell'indice di rifrazione n . Per una discussione delle analogie tra ottica geometrica e meccanica della particella, sintetizzabili nell'equazione dell'iconale, cfr. S. Boffi: *Onde di materia e onde di probabilità*, loc. cit., 1989, p. 17 e segg.

meno se si tratta il problema di un elettrone ⁴⁶, l'eq. (1') può essere posta nella forma seguente: una forma quadratica di ψ e delle sue derivate prime = 0. Nell'intero spazio delle configurazioni ricerchiamo quelle funzioni reali ψ a un solo valore, finite e continue fino alle loro derivate seconde, che rendono *estremo* l'integrale della suddetta forma quadratica esteso a tutto lo spazio delle configurazioni [†]. *Tramite questo problema variazionale stabiliamo le condizioni di quantizzazione* ⁴⁷.

Prima di tutto prenderemo per H la funzione di Hamilton del moto kepleriano e mostreremo che il requisito che viene stabilito può essere soddisfatto da tutti i valori positivi di E , ma solo da un insieme discreto di valori negativi di E . Ciò significa che il suddetto problema variazionale ammette uno spettro di autovalori discreto e uno continuo. Lo spettro discreto corrisponde ai termini di Balmer, quello continuo alle energie delle traiettorie iperboliche. Per ottenere la corrispondenza numerica occorre che K assuma il valore $h/2\pi$ ⁴⁸.

Dato che la scelta delle coordinate non è vincolante per stabilire le equazioni variazionali, scegliamo le coordinate cartesiane ortogonali. Allora la (1') nel nostro caso (e , m sono la carica e la massa dell'elettrone) risulta:

$$(1'') \quad \left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi^2 = 0.$$

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}.$$

E il nostro problema variazionale diventa

$$(3) \quad \delta J = \delta \int \int \int dx dy dz \left[\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\psi}{\partial z}\right)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r}\right) \psi^2 \right] = 0,$$

⁴⁶ Riaffiora qui l'approssimazione non relativistica adottata ora da Schrödinger, che prima si era cimentato, senza successo, con l'atomo di idrogeno relativistico.

[†] Non mi sfugge il fatto che questa formulazione non è completamente univoca.

⁴⁷ L'idea di collegare una forma quadratica di una funzione e delle sue derivate prime con un principio variazionale è di David Hilbert, che la utilizzò nello studio delle equazioni integrali lineari e nell'analisi dello spettro di autovalori di una forma quadratica. I risultati, presentati in più occasioni tra il 1904 e il 1910, sono illustrati sistematicamente nel testo dello stesso Hilbert: *Grundzüge einer allgemeinen Theorie der linearen Integralgleichungen*, Teubner, Lipsia, 1912.

⁴⁸ Questo capoverso riassume i risultati fondamentali di questo lavoro. Tutto è basato sul metodo variazionale, genialmente proposto, in accordo col metodo di Hilbert, per trovare la soluzione di un'equazione quadratica nella ψ e nelle sue derivate prime, che viene così ricondotta a un'equazione lineare, sia pure con derivate seconde (cfr. eq. (5) successiva) e opportune condizioni al contorno (cfr. eq. (6) successiva).

in cui l'integrale si estende su tutto lo spazio. Da ciò si trova nel modo consueto ⁴⁹:

$$(4) \quad \frac{1}{2} \delta J = \int df \delta \psi \frac{\partial \psi}{\partial n} - \int \int \int dx dy dz \delta \psi \left[\nabla^2 \psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi \right] = 0.$$

Deve dunque essere in primo luogo ⁵⁰:

$$(5) \quad \nabla^2 \psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0$$

e in secondo luogo l'integrale esteso alla superficie chiusa infinitamente lontana deve azzerarsi:

$$(6) \quad \int df \delta \psi \frac{\partial \psi}{\partial n} = 0.$$

(Sarà messo in evidenza che a causa di quest'ultimo requisito dovremo completare il nostro problema variazionale con una condizione sul comportamento all'infinito di $\delta \psi$, grazie alla quale esista davvero lo spettro *continuo* di autovalori di cui s'è detto sopra. Ma di ciò più tardi.)

La soluzione della (5) si può attuare (*per esempio*) in coordinate spaziali polari r, θ, ϕ , ponendo la ψ come un prodotto di funzioni, una di r , una di θ e una di ϕ . Il metodo è abbastanza noto ⁵¹. Per la dipendenza dagli angoli

⁴⁹ Per arrivare alla (4) si deve eseguire la variazione sul gradiente quadrato di ψ e poi integrare per parti; df rappresenta l'elemento di superficie relativo alla superficie di raggio infinito che racchiude il volume spaziale di integrazione nella (3).

⁵⁰ La (5) è quella che oggi chiamiamo equazione agli autovalori per la hamiltoniana $H = p^2/(2m) - e^2/r$ dell'elettrone nell'atomo di idrogeno.

⁵¹ Fino alla fine del § 1 il lavoro procede secondo le ben note regole di risoluzione di un'equazione differenziale lineare omogenea del secondo ordine e rappresenta il prototipo esemplare di calcolo della soluzione di un'equazione agli autovalori per la hamiltoniana quantistica. In particolare, l'uso delle coordinate polari nel caso di un potenziale a simmetria sferica, come nel moto kepleriano, permette la separazione delle variabili, perché così la parte radiale e la parte angolare dell'operatore sono additive. Infatti il laplaciano in coordinate polari risulta:

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right\}.$$

polari risulta una *funzione sferica di superficie*⁵²; per la dipendenza da r – chiamiamo χ questa funzione – si ottiene facilmente l’equazione differenziale:

$$(7) \quad \frac{d^2\chi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\chi}{dr} + \left(\frac{2mE}{K^2} + \frac{2me^2}{K^2 r} - \frac{n(n+1)}{r^2} \right) \chi = 0.$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

La limitazione di n a numero intero è notoriamente *necessaria* affinché la dipendenza dagli angoli polari sia *univoca*. – Abbiamo bisogno di soluzioni della (7) che restino finite per tutti i valori di r reali non negativi. Ora †⁵³ l’equazione (7) ha nel piano complesso di r due singolarità, in $r = 0$ e in $r = \infty$, di cui la seconda è un “punto di non definizione” (in realtà punto singolare) per *tutti* gli integrali, mentre la prima no (per nessun integrale)⁵⁴.

⁵² Oggi viene chiamata *armonica sferica* e viene indicata usualmente col simbolo $Y_{lm}(\theta, \phi)$, dove l è l’ordine (che Schrödinger indicherà con n), legato all’autovalore del quadrato del momento angolare (numero quantico orbitale), e m è il numero quantico azimutale, legato all’autovalore dell’operatore corrispondente alla componente del momento angolare lungo l’asse z . Le armoniche sferiche $Y_{nm}(\theta, \phi)$ (nella notazione di Schrödinger) soddisfano all’equazione:

$$\left\{ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \right\} Y_{nm}(\theta, \phi) = -n(n+1)Y_{nm}(\theta, \phi),$$

dove $n = 0, 1, 2, \dots, |m| \leq n$ e nel primo membro si riconosce la parte angolare del laplaciano. Ponendo quindi

$$\psi = \chi(r)Y(\theta, \phi)$$

nella (5) si ottiene la (7).

† Per la guida alla trattazione dell’equazione (7) sono molto obbligato nei confronti di Hermann Weyl. In quanto segue, per le affermazioni non dimostrate rimando a L. Schlesinger, *Differentialgleichungen* (Sammlung Schubert n. 13, Göschen 1900, in particolare capp. 3 e 5).

⁵³ All’epoca in cui Schrödinger scrive, il testo citato era già giunto alla terza edizione, ma Schrödinger si riferisce alla prima, che probabilmente era in suo possesso. Ciò proverebbe, secondo Mehra e Rechenberg (*loc. cit.*, § III.2), che Schrödinger aveva studiato i metodi di risoluzione delle equazioni differenziali già molto tempo prima, quando era studente di Hasenöhrl, in accordo con quanto viene ricordato da Schrödinger stesso in occasione del suo discorso Nobel. Certamente il fisico e matematico Hermann Weyl, all’epoca suo collega a Zurigo, sarà stato di aiuto a Schrödinger su alcuni punti di dettaglio tecnico nella risoluzione dell’equazione differenziale.

⁵⁴ Il punto $r = 0$ è una singolarità fuchsiana, così chiamata dal nome del matematico Immanuel Lazarus Fuchs (1833–1902) e caratterizzata dal fatto che in $r = 0$ il coefficiente della derivata prima che compare nella (7) ha un polo del primo ordine e quello della funzione ha un polo del secondo ordine. La condizione di singolarità fuchsiana è necessaria e sufficiente per l’esistenza di un sistema fondamentale di due integrali rappresentabili nell’intorno del punto non regolare r_0 mediante il prodotto di una funzione analitica per una potenza di $r - r_0$, dove l’esponente ρ di questa potenza deriva dall’equazione (8) scritta più avanti. Invece il punto $r = \infty$ è una singolarità essenziale e richiede tecniche di integrazione specifiche (cfr. eq. (9) successiva).

Entrambe queste singolarità costituiscono proprio i *punti al contorno del nostro intervallo reale*. In tal caso si sa ora che il requisito della *finitzza* nei punti al contorno per la funzione χ diventa uguale a una *condizione al contorno*. In generale l'equazione non ha affatto alcun integrale che rimanga finito in *entrambi* i punti al contorno, mentre un tale integrale esiste solo per certi valori selezionati delle costanti che entrano nell'equazione. Si tratta di determinare questi valori selezionati.

Questa circostanza che è stata evidenziata è proprio il *punto saliente* di tutta la ricerca.

Consideriamo anzitutto il punto singolare $r = 0$. La cosiddetta *equazione fondamentale determinante*, che specifica il comportamento dell'integrale in questo punto, è ⁵⁵:

$$(8) \quad \rho(\rho - 1) + 2\rho - n(n + 1) = 0,$$

con radici:

$$(8') \quad \rho_1 = n, \quad \rho_2 = -(n + 1).$$

Entrambi gli integrali canonici in questo punto appartengono dunque agli esponenti n e $-(n + 1)$. Dato che n è non negativo, solo il primo di questi integrali è per noi utilizzabile. Siccome appartiene all'esponente *più grande*, esso viene rappresentato con una usuale serie di potenze che inizia con r^n (l'altro integrale, che non ci interessa, può contenere un logaritmo, a causa della differenza intera tra gli esponenti ⁵⁶). Dato che il punto singolare più vicino si trova all'infinito, la detta serie di potenze converge uniformemente e rappresenta una *trascendente intera* ⁵⁷. Perciò stabiliamo:

La soluzione ricercata è (a meno di un fattore costante senza importanza) una determinata trascendente intera univoca che in $r = 0$ appartiene all'esponente n .

⁵⁵ È l'equazione determinante associata al punto di singolarità fuchsiano $r = 0$ dell'equazione differenziale lineare (7), le cui radici forniscono gli esponenti per l'integrale. Essa si ottiene considerando la (7) nel limite $r \rightarrow 0$ e sostituendo per χ una serie di potenze del tipo $r^\rho \sum_s a_s r^s$ e azzerando il coefficiente di a_0 . In corrispondenza delle due radici si possono quindi costruire i due integrali linearmente indipendenti della (7), determinando tutti i coefficienti dello sviluppo in serie per ricorrenza a partire dai primi due coefficienti a_0 e a_1 .

⁵⁶ Quando le due radici dell'equazione determinante coincidono o differiscono per un intero, una volta costruita una prima soluzione per $\rho = \rho_1$ nella forma $f_1(r) = r^{\rho_1} \phi(r)$, con $\phi(r)$ sviluppabile in serie di potenze nell'intorno di $r = 0$, l'altra soluzione è del tipo: $f_2(r) = f_1(r)[A \log r + v(r)]$; cfr. p. es. Francesco Giacomo Tricomi (1897–1978): *Equazioni differenziali*, Einaudi, Torino, 1953.

⁵⁷ Una funzione è chiamata *trascendente intera* se il suo sviluppo in serie di potenze converge assolutamente (e uniformemente) in ogni cerchio di raggio finito.

Si tratta ora di esaminare il comportamento di questa funzione *nel punto all'infinito* dell'asse reale positivo. A tale scopo semplifichiamo l'equazione (7) mediante la sostituzione:

$$(9) \quad \chi = r^\alpha U,$$

in cui α è scelto in modo che il termine in $1/r^2$ sparisca. Perciò α deve assumere uno dei due valori n , $-(n+1)$, come facilmente si può calcolare⁵⁸. L'equazione (7) allora prende la forma:

$$(7') \quad \frac{d^2U}{dr^2} + \frac{2(\alpha+1)}{r} \frac{dU}{dr} + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) U = 0.$$

I suoi integrali appartengono in $r = 0$ agli esponenti 0 e $-2\alpha - 1$. Per il primo valore di α , $\alpha = n$, è il *primo*, mentre per il secondo valore di α , $\alpha = -(n+1)$, è il *secondo* di questi integrali una trascendente intera e porta per la (9) alla soluzione *ricercata*, che è proprio univoca⁵⁹. Perciò non perdiamo nulla se ci limitiamo a *uno* dei due valori di α . Scegliamo:

$$(10) \quad \alpha = n.$$

La nostra soluzione U allora appartiene in $r = 0$ all'esponente 0. L'equazione (7') viene indicata dai matematici come equazione di Laplace⁶⁰. Il tipo generale è:

⁵⁸ La sostituzione (9) nella (7) produce:

$$r^\alpha \frac{d^2U}{dr^2} + r^{\alpha-1} 2(\alpha+1) \frac{dU}{dr} + \left(\frac{2mE}{K^2} + \frac{2me^2}{K^2 r} - \frac{n(n+1)}{r^2} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{r^2} \right) r^\alpha U = 0.$$

Il coefficiente della U si semplifica se si sceglie $\alpha = n$ oppure $\alpha = -(n+1)$. Dividendo quindi per r^α si ottiene la (7').

⁵⁹ In $r = 0$, l'equazione determinante per la (7') è:

$$\rho(\rho-1) + 2\rho(\alpha+1) = 0,$$

da cui seguono gli esponenti $\rho = 0$ e $\rho = -2\alpha - 1$. Per $\alpha = n$, è la soluzione $\rho = 0$ che porta a una funzione U regolare in $r = 0$, mentre per $\alpha = -(n+1)$ è la soluzione $\rho = -2\alpha - 1 = 2n + 1$ quella accettabile in $r = 0$.

⁶⁰ Laplace l'aveva studiata nel suo trattato sulla teoria delle probabilità: *Théorie analytique des probabilités*, Livre I, première partie, 1812.

$$(7'') \quad U'' + \left(\delta_0 + \frac{\delta_1}{r} \right) U' + \left(\epsilon_0 + \frac{\epsilon_1}{r} \right) U = 0.$$

Per noi le costanti hanno i seguenti valori:

$$(11) \quad \delta_0 = 0, \quad \delta_1 = 2(\alpha + 1), \quad \epsilon_0 = \frac{2mE}{K^2}, \quad \epsilon_1 = \frac{2me^2}{K^2}.$$

Questo tipo di equazioni è in fondo relativamente facile da trattarsi, perché la cosiddetta trasformazione di Laplace, che in generale fornisce *di nuovo* un'equazione di *secondo* ordine, *qui* porta a una del *primo* ordine che è solubile mediante quadratura. Ciò permette una rappresentazione delle soluzioni della (7'') stessa mediante integrali nel campo complesso. Qui riporto solo il risultato finale ^{† 61}. L'integrale

$$(12) \quad U = \int_L e^{zr} (z - c_1)^{\alpha_1 - 1} (z - c_2)^{\alpha_2 - 1} dz$$

è una soluzione della (7'') per un cammino di integrazione L , per il quale ⁶²

$$(13) \quad \int_L \frac{d}{dz} \left[e^{zr} (z - c_1)^{\alpha_1} (z - c_2)^{\alpha_2} \right] dz = 0.$$

Le costanti c_1 , c_2 , α_1 , α_2 hanno i valori seguenti. c_1 e c_2 sono le radici dell'equazione quadratica

$$(14) \quad z^2 + \delta_0 z + \epsilon_0 = 0$$

e

$$(14') \quad \alpha_1 = \frac{\epsilon_1 + \delta_1 c_1}{c_1 - c_2}, \quad \alpha_2 = \frac{\epsilon_1 + \delta_1 c_2}{c_2 - c_1}.$$

Nel caso dell'equazione (7') si ha per la (11) e la (10):

[†] Cfr. L. Schlesinger, *loc. cit.* La teoria è dovuta a H. Poincaré e a J. Horn.

⁶¹ Per capire quanto segue fino all'equazione (17), può essere utile tenere presenti le considerazioni esposte al § 3, tratte dal testo di Schlesinger.

⁶² Il cammino di integrazione L nel piano complesso di z è un doppio circuito intorno ai punti c_1 e c_2 .

$$(14'') \quad \begin{aligned} c_1 &= +\sqrt{\frac{-2mE}{K^2}}, & c_2 &= -\sqrt{\frac{-2mE}{K^2}}; \\ \alpha_1 &= \frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} + n + 1, & \alpha_2 &= -\frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} + n + 1. \end{aligned}$$

La rappresentazione integrale (12) permette non solo di valutare il comportamento asintotico del complesso delle soluzioni quando r va all'infinito in un certo modo, ma anche di fornire questo comportamento per una *specificata* soluzione, cosa che è sempre più difficile.

Vogliamo ora innanzi tutto *escludere* il caso in cui α_1 e α_2 siano numeri reali interi. Quando succede, il caso si verifica sempre simultaneamente per entrambe le quantità, e cioè se e solo se:

$$(15) \quad \frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} = \text{numero intero reale.}$$

Perciò ora assumiamo che la (15) non sia soddisfatta.

Il comportamento globale delle soluzioni per r che diventa infinito in un certo modo – vogliamo sempre pensare che diventi infinito per valori reali positivi – sarà allora [†] caratterizzato dal comportamento di entrambe le soluzioni linearmente indipendenti che si ottengono mediante le *due specializzazioni* seguenti del cammino di integrazione, e che vogliamo chiamare U_1 e U_2 . *Entrambe* le volte z venga dall'infinito e vi ritorni lungo lo stesso cammino in direzione tale che sia

$$(16) \quad \lim_{z \rightarrow \infty} e^{zr} = 0,$$

cioè la parte reale di zr debba diventare infinitamente negativa. Con ciò viene soddisfatta la condizione (13). *Allo stesso tempo* in un caso (soluzione U_1) viene aggirato una volta il punto c_1 , nell'*altro* caso (soluzione U_2) il punto c_2 .

Entrambe queste soluzioni, per valori di r positivi e molto grandi, vengono ora rappresentate *asintoticamente* (nel senso di Poincaré):

$$(17) \quad \begin{aligned} U_1 &\sim e^{c_1 r} r^{-\alpha_1} (-1)^{\alpha_1} (e^{2\pi i \alpha_1} - 1) \Gamma(\alpha_1) (c_1 - c_2)^{\alpha_2 - 1}, \\ U_2 &\sim e^{c_2 r} r^{-\alpha_2} (-1)^{\alpha_2} (e^{2\pi i \alpha_2} - 1) \Gamma(\alpha_2) (c_2 - c_1)^{\alpha_1 - 1}, \end{aligned}$$

[†] Quando la (15) è soddisfatta, almeno uno dei due cammini di integrazione descritti nel testo diventa inutilizzabile, in quanto porta a un risultato che si annulla.

dove qui ci accontentiamo del primo termine della serie asintotica che deriva dalle potenze negative intere di r .

Dobbiamo ora distinguere i due casi $E \geq 0$. Sia dapprima:

1. $E > 0$. Notiamo in primo luogo che in questo caso è garantito *eo ipso* il non verificarsi della (15) perché questa quantità diventa puramente immaginaria. Inoltre per la (14'') anche c_1 e c_2 diventano puramente immaginari. Le funzioni esponenziali nella (17) perciò, dato che r è reale, sono funzioni periodiche che restano finite⁶³. I valori di α_1 e α_2 per la (14'') indicano che U_1 e U_2 *entrambe* vanno a zero come r^{-n-1} . *Perciò lo stesso deve valere per la nostra soluzione trascendente intera U* , di cui stiamo cercando il comportamento, *dal momento che essa può essere sempre una combinazione lineare di U_1 e U_2* . Inoltre la (9), prendendo in considerazione la (10), insegna che la funzione χ , cioè la soluzione trascendente intera dell'equazione *originaria* (7), va a zero sempre come $1/r$, in quanto risulta dalla U mediante moltiplicazione per r^n . Perciò possiamo affermare:

L'equazione differenziale di Eulero (5) del nostro problema variazionale per ogni E positivo ha soluzioni che su tutto lo spazio sono univoche, finite e continue e che all'infinito vanno a zero come $1/r$ con continue oscillazioni. – Della condizione di superficie (6) si dovrà ancora parlare.

2. $E < 0$. In questo caso la possibilità (15) non è esclusa *eo ipso*, ma provvisoriamente atteniamoci all'ipotesi di una sua esclusione. Allora, per la (14'') e la (17), U_1 cresce oltre ogni limite per $r = \infty$, mentre U_2 si annulla in modo *esponenziale*. La nostra trascendente intera U (e lo stesso vale per χ) rimarrà finita se e solo se U è identica a U_1 a meno di un fattore numerico. *Ma ciò non è il caso*. Lo si riconosce così: se nella (12) si sceglie per cammino di integrazione L un circuito *chiuso* intorno a *entrambi* i punti c_1 e c_2 , il quale circuito è *davvero chiuso* sulla superficie di Riemann dell'integrando perché la *somma* $\alpha_1 + \alpha_2$ è un numero intero, per cui *eo ipso* soddisfa la condizione (13), allora si dimostra facilmente che l'integrale (12) rappresenta la *nostra trascendente intera U* . Essa si può cioè sviluppare in serie di potenze positive, che in ogni caso converge per r sufficientemente piccolo e quindi soddisfa all'equazione differenziale (7') e deve coincidere con lo sviluppo in serie per U . Dunque: U viene rappresentata mediante la (12), con L che è un circuito chiuso intorno a entrambi i punti c_1 e c_2 . Questo circuito chiuso si può però deformare in modo tale da apparire una *combinazione additiva* dei cammini di integrazione considerati prima e appartenenti a U_1 e U_2 , attraverso *fattori non nulli*, e precisamente 1 e $e^{2\pi i \alpha_1}$. Da ciò segue che U non può coincidere con U_2 , ma deve contenere anche U_1 . Q.e.d.

⁶³ Posto $c_{1,2} = \pm ik$, si ottiene:

$$U_{1,2} \sim e^{\pm ikr} r^{-\alpha_{1,2}}.$$

La nostra trascendente intera U , che è la sola tra le soluzioni della (7') che viene presa in considerazione per la soluzione del problema, sotto le ipotesi fatte *non* rimane finita per grandi r . – Eccettuata la prova di *completezza*, cioè la dimostrazione che il nostro procedimento permette di trovare *tutte* le soluzioni del problema linearmente indipendenti, possiamo dunque affermare:

Per E negative, che non soddisfano alla condizione (15), il nostro problema variazionale non ha alcuna soluzione.

Adesso dobbiamo ancora studiare solo l'insieme discreto di valori di E negativi che *soddisfano alla condizione* (15). Perciò α_1 e α_2 sono allora entrambi numeri interi. Dei due cammini di integrazione che prima ci hanno portato al sistema fondamentale U_1, U_2 , il primo deve essere sicuramente modificato per produrre un risultato diverso da zero. Siccome $\alpha_1 - 1$ è sicuramente positivo, il punto c_1 non è ora né un punto di diramazione né un polo dell'integrando, ma piuttosto è un punto di zero ordinario. Anche il punto c_2 può diventare un punto regolare se anche $\alpha_2 - 1$ è non negativo. In *ogni* caso però ci possono essere due opportuni cammini di integrazione lungo i quali si possa eseguire l'integrazione in forma chiusa mediante funzioni note, in modo da valutare perfettamente il comportamento delle soluzioni.

Sia infatti:

$$(15') \quad \frac{me^2}{K\sqrt{-2mE}} = l, \quad l = 1, 2, 3, 4 \dots$$

Allora dalla (14'') è:

$$(14''') \quad \alpha_1 - 1 = l + n, \quad \alpha_2 - 1 = -l + n.$$

Si devono dunque distinguere i due casi $l \leq n$ e $l > n$. Sia dapprima:

a) $l \leq n$. Allora sia c_1 che c_2 perdono il carattere di singolarità e acquistano la qualifica di punto iniziale o finale del cammino di integrazione, grazie al soddisfacimento della condizione (13). Un terzo punto adatto a questo scopo è il punto all'infinito negativo. Ogni cammino tra due di questi tre punti fornisce una soluzione e di queste tre soluzioni ce ne sono due linearmente indipendenti, come si trova facilmente, per le quali l'integrale viene calcolato in forma chiusa. In particolare, la *soluzione trascendente intera* viene data dal cammino di integrazione da c_1 a c_2 . Che *questo* integrale resti regolare per $r = 0$, lo si riconosce subito, senza calcolarlo. Sottolineo ciò perché il computo reale è fatto piuttosto per mascherare questa circostanza. Per contro, *esso* mostra che l'integrale cresce oltre ogni limite per r positivi infinitamente grandi. *Finito* rimane per grandi r uno degli *altri* due integrali, che però per questo diventa infinito per $r = 0$.

Dunque nel caso $l \leq n$ non otteniamo alcuna soluzione.

b) $l > n$. Allora per la (14''') c_1 è un punto di zero e c_2 un polo dell'integrando almeno del primo ordine. Quindi si ottengono due integrali indipendenti: uno mediante il cammino che da $z = -\infty$, evitando per precauzione il polo, porta al punto di zero; l'altro mediante il *residuo* nel polo. *Quest'ultimo* è la trascendente intera. Vogliamo dare il suo valore calcolato, ma moltiplicato proprio per r^n , con cui ottenere secondo la (9) e la (10) la soluzione χ dell'equazione (7) originariamente posta. (La costante moltiplicativa senza significato è aggiustata in modo arbitrario.) Si trova:

$$(18) \quad \chi = f\left(r \frac{\sqrt{-2mE}}{K}\right); \quad f(x) = x^n e^{-x} \sum_{k=0}^{l-n-1} \frac{(-2x)^k}{k!} \binom{l+n}{l-n-1-k}.$$

Si riconosce che questa è davvero la soluzione utilizzabile, in quanto resta finita per tutti gli r reali non negativi⁶⁴. Grazie al suo azzerarsi in modo esponenziale all'infinito viene inoltre garantita la condizione di superficie (6). Riassumiamo i risultati per E negative:

Per E negative il nostro problema variazionale ha soluzioni se e solo se E soddisfa la condizione (15). Al numero intero n , che dà l'ordine della funzione sferica di superficie che entra nella soluzione, possono essere attribuiti allora solo valori più piccoli di l (di cui sempre almeno uno è disponibile). La parte della soluzione che dipende da r è data dalla (18).

Mediante la conta delle costanti che compaiono nelle funzioni sferiche di superficie (notoriamente $2n + 1$)⁶⁵ si trova inoltre:

Per ogni combinazione (n, l) accettabile la soluzione trovata contiene esattamente $2n + 1$ costanti arbitrarie; per un valore di l preassegnato perciò ci sono l^2 costanti arbitrarie.

Con ciò abbiamo convalidato nelle linee principali le affermazioni fatte all'inizio sullo spettro degli autovalori del nostro problema variazionale; tuttavia rimangono ancora delle lacune.

In primo luogo la dimostrazione della completezza dell'intero sistema di autofunzioni dimostrato. Di ciò non voglio occuparmi in questa nota. In base all'esperienza in altri casi si può supporre che non ci è sfuggito alcun autovalore.

In secondo luogo occorre ora ricordarsi che le autofunzioni dimostrate per E positive non risolvono senz'altro il problema variazionale nella forma in cui era stato posto all'inizio, perché vanno a zero all'infinito come $1/r$ e quindi $\partial\psi/\partial r$ su una sfera di grande raggio va a zero come $1/r^2$. L'integrale

⁶⁴ Siccome l'intero l parte da 1 e $n < l$, lo stato fondamentale è descritto, secondo la (15'), dalla condizione ($l = 1, n = 0$) e quindi dalla funzione $f(x) = e^{-x}$.

⁶⁵ Sono i possibili valori del numero quantico azimutale m .

di superficie (6) quindi all'infinito resta proprio dell'ordine di $\delta\psi$. Se allora si desidera davvero ottenere lo spettro continuo, si deve aggiungere al *problema* ancora una condizione: e cioè che $\delta\psi$ si azzeri all'infinito, o almeno che debba tendere a un valore costante, indipendente dalla direzione spaziale secondo cui si va all'infinito; nell'ultimo caso le funzioni sferiche di superficie portano all'azzeramento dell'integrale di superficie.

§ 2. La condizione (15) fornisce:

$$(19) \quad -E_l = \frac{me^4}{2K^2l^2}.$$

Si ottengono dunque i ben noti livelli energetici di Bohr, che corrispondono ai termini di Balmer⁶⁶ se alla costante K , che abbiamo dovuto introdurre nella (2) per motivi dimensionali, si attribuisce il valore:

$$(20) \quad K = \frac{h}{2\pi}.$$

⁶⁶ La formula, proposta dal matematico svizzero Johann Jakob Balmer (1825–1962) (*Notiz über die Spektrallinien des Wasserstoffs [Nota sulle righe spettrali dell'idrogeno]*, Verhandlungen der Naturforschenden Gesellschaft in Basel **7** (1885) 548–560), individua il numero d'onda $1/\lambda$ della radiazione emessa o assorbita dall'atomo di idrogeno:

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right),$$

dove $R = 109737.31 \pm 0.03 \text{ cm}^{-1}$ è la costante di Rydberg e i numeri interi positivi m e n assumono i valori $m = 2$ e $n = 3, 4, 5, \dots$ per classificare le righe della parte visibile dello spettro dell'atomo d'idrogeno.

Johannes Robert Rydberg (1854–1919): *Recherches sur la constitution des spectres d'émission des éléments chimiques [Ricerche sulla struttura degli spettri di emissione degli elementi chimici]*, Kungliga Vetenskaps Akademiens Handlingar **23** (1890) n. 11; *On the structure of the line-spectra in the chemical elements [Struttura degli spettri a righe degli elementi chimici]*, Philosophical Magazine **29** (1890) 331–337.

La descrizione degli spettri atomici mediante il numero d'onda fu introdotta da George Johnstone Stoney (1826–1911) nel 1871 (*On the advantage of referring the position of lines in the spectrum to a scale of wave-numbers [Vantaggio di riferire la posizione delle righe spettrali a una scala di numeri d'onda]*, British Association Reports, Edinburgh, **41** (1871) 42–43), migliorando la classificazione introdotta da Anders Jonas Ångström (1814–1872): *Recherches sur le spectre solaire [Ricerche sullo spettro solare]*, Uppsala.

Niels Bohr (*On the constitution of atoms and molecules [Struttura degli atomi e delle molecole]*, Philosophical Magazine **26** (1913) 1–25, 476–502, 857–875) la riformulò in termini di salti energetici subiti dall'elettrone durante il processo di emissione o di assorbimento:

$$\hbar\omega = Rhc \left(\frac{1}{m^2} - \frac{1}{n^2} \right) = E_n - E_m,$$

dove adesso n e m si possono identificare con i numeri quantici principali dei livelli energetici E_n e E_m , rispettivamente.

Allora si ha ⁶⁷

$$(19') \quad -E_l = \frac{2\pi^2 m e^4}{h^2 l^2}.$$

Il nostro l è il numero quantico principale. $n + 1$ è analogo al numero quantico azimutale, e la sua ulteriore divisione per una specificazione più precisa delle funzioni sferiche di superficie può essere fatta analogamente con la divisione del quanto azimutale in un quanto “equatoriale” e uno “polare”. Questi numeri specificano il sistema delle linee di nodi sulla sfera. Anche il “numero quantico radiale”, $l - n - 1$, specifica esattamente il “numero di nodi sulla sfera”, in quanto ci si può facilmente convincere che la funzione $f(x)$ nella (18) ha esattamente $l - n - 1$ radici reali positive. – I valori positivi di E corrispondono al continuo delle traiettorie iperboliche a cui si può in un certo senso attribuire il numero quantico radiale ∞ . A ciò corrisponde, come abbiamo visto, il fatto che le relative funzioni della soluzione vanno a finire all’infinito con *continue* oscillazioni.

È ancora interessante il fatto che il dominio, all’interno del quale le funzioni (18) sono sensibilmente diverse da zero e si verificano le loro oscillazioni, è in ogni caso dell’*ordine di grandezza generale* dell’asse maggiore dell’ellisse associata. Il fattore, con cui compare moltiplicato il raggio vettore come argomento della funzione f priva di costanti, è – naturalmente – il reciproco di una lunghezza, e questa lunghezza è:

$$(21) \quad \frac{K}{\sqrt{-2mE}} = \frac{K^2 l}{m e^2} = \frac{h^2 l}{4\pi^2 m e^2} = \frac{a_l}{l},$$

dove a_l è il semiasse dell’ l -esima orbita ellittica ⁶⁸. (Le equazioni seguono dalla (19) insieme con la ben nota relazione $E_l = -e^2/2a_l$). La quantità (21) dà l’ordine di grandezza del dominio delle radici per valori piccoli di l e n , in

⁶⁷ Adesso Schrödinger è in grado di dare un’espressione esplicita alla costante di Rydberg in termini di costanti fondamentali atomiche. Scrivendo la (19’) nella forma di Bohr:

$$E_l = -\frac{Rhc}{l^2},$$

si ottiene:

$$R = \frac{e^4 m}{4\pi \hbar^3 c}.$$

⁶⁸ La distanza a_l per $l = 0$ è quella comunemente detta raggio di Bohr, corrispondente al raggio della circonferenza dell’orbita circolare relativa allo stato fondamentale dell’atomo d’idrogeno di Bohr.

quanto dovrebbe essere accettato il fatto che le radici di $f(x)$ sono dell'ordine di grandezza di uno. Ciò non è naturalmente più il caso quando i coefficienti del polinomio diventano numeri grandi. Io non vorrei addentrarmi ora nella stima più precisa delle radici, ma credo che la precedente affermazione si confermerà abbastanza precisa.

§ 3. È molto naturale riferire la funzione ψ a un *processo vibratorio* nell'atomo, cui spetta, in grado maggiore che non a loro, la realtà delle orbite elettroniche, oggi più volte messa in dubbio. In origine avevo anche l'intenzione di fondare la nuova formulazione della prescrizione quantistica in questo modo più intuitivo⁶⁹, ma poi ho preferito la forma matematica neutra di cui sopra, perché mette in luce più chiaramente ciò che è essenziale. Il punto essenziale mi sembra il fatto che nella prescrizione quantistica non interviene più la misteriosa "condizione di numeri interi", che invece è per così dire riagguantata un passo più avanti: essa ha la sua base nella finitezza e univocità di una certa funzione dello spazio.

Ora vorrei anche evitare di entrare nella discussione sulle possibilità di rappresentarsi questo processo vibratorio, prima che siano stati calcolati con successo nella nuova formulazione alcuni casi un po' complicati. Non è certo che nei loro risultati questi saranno una pura copia della usuale teoria dei quanti. Per esempio, il problema di Keplero relativistico, quando lo si calcoli esattamente secondo la prescrizione data all'inizio, porta stranamente a numeri quantici *parziali seminteri* (numeri quantici radiale e azimutale)⁷⁰.

Tuttavia siano permesse ancora alcune osservazioni sulla rappresentazione vibratoria. Sopra tutto non vorrei passare sotto silenzio il fatto che sono grato in primo luogo alla tesi geniale di Louis de Broglie[†]⁷¹ per lo stimolo a queste considerazioni e alla riflessione sulla distribuzione spaziale di quelle "onde di fase", di cui lui ha mostrato che, per ogni periodo o quasi-periodo dell'elettrone, compete loro sempre un *numero intero*, misurato lungo l'orbita. La differenza principale sta nel fatto che de Broglie pensa a onde che si propagano, mentre noi, se attribuiamo alle nostre formule una rappresentazione vibratoria, saremmo stati portati a vibrazioni proprie stazionarie. Ho mostrato brevemente[#]⁷² che si può basare la teoria dei gas di Einstein sulla consid-

⁶⁹ Così infatti aveva cominciato nei suoi quaderni di appunti: cfr. n. 35 a p. 18. Adesso in quest'ultimo paragrafo Schrödinger tenta una prima interpretazione fisica dei risultati.

⁷⁰ Questo era il motivo per cui Schrödinger aveva abbandonato l'approccio relativistico.

[†] L. de Broglie, *Ann. de Physique* (10) **3** p. 22, 1925 (Tesi, Parigi, 1924).

⁷¹ La citazione completa è: *Recherches sur la théorie des quanta*, *Annales de Physique* **3** (1925) 22–128. Era stato Debye ad attirare l'attenzione di Schrödinger su questo lavoro (cfr. J. Mehra e H. Rechenberg, *The Historical Development of Quantum Theory. Erwin Schrödinger and the Rise of Wave Mechanics*. Vol. 5, *loc. cit.*, pp. 419–422).

[#] Appare prossimamente in *Physik. Zeitschr.*

⁷² La citazione completa è: *Zur Einsteinschen Gastheorie [La teoria dei gas di Einstein]*,

erazione di tali vibrazioni proprie stazionarie, se si impone loro la legge di dispersione delle onde di fase di de Broglie. Le considerazioni fatte sopra per l'atomo costituirebbero una generalizzazione di quelle riflessioni sul modello di gas.

Se si prendono le singole funzioni (18) e le si moltiplicano per una funzione sferica di superficie di ordine n , in accordo con la descrizione dei processi di vibrazioni proprie, allora la quantità E deve avere a che fare con la *frequenza* del processo in questione. Ma solitamente nei problemi ondulatori il "parametro" (di solito chiamato λ) è proporzionale al *quadrato* della frequenza. Però in primo luogo una tale assunzione nel caso in discussione porterebbe a frequenze *immaginarie* per valori di E *negativi*; in secondo luogo al teorico quantistico l'istinto fa dire che l'energia deve essere proporzionale proprio alla frequenza e non al suo quadrato.

La contraddizione si risolve nel modo seguente. Per il momento per il "parametro" E dell'equazione variazionale (5) non è stabilito *alcun livello zero naturale*; dato però che la funzione incognita ψ , oltre che per E , compare moltiplicata per una funzione di r , essa può essere modificata per una costante, facendo variare corrispondentemente il livello zero di E . Di conseguenza, bisogna rettificare l'"aspettativa del teorico delle vibrazioni" nel senso che ci si deve aspettare proporzionale al quadrato della frequenza non E stessa – che finora così chiamavamo e così continueremo a chiamare – ma E maggiorata di una certa costante. Sia ora questa costante *molto grande* rispetto all'ammontare di tutti i valori di E negativi che si presentano [che comunque sono limitati per la (15)]. Allora in primo luogo le frequenze diventano *reali*, ma in secondo luogo i nostri valori di E , in quanto corrispondenti solo in modo relativo a *differenze* di frequenze piccole, di fatto diventano proporzionali a queste differenze di frequenze in modo molto ben approssimato. Di nuovo ciò è tutto quanto l'"istinto naturale" del teorico quantistico può pretendere finché non venga fissato il livello zero dell'*energia*.

Il punto di vista che la frequenza del processo ondulatorio sia data da

$$(22) \quad \nu = C' \sqrt{C + E} = C' \sqrt{C} + \frac{C'}{2\sqrt{C}} E + \dots,$$

dove C è una costante molto grande rispetto a tutte le E , ha però anche un altro privilegio molto prezioso. *Esso permette di comprendere la condizione sulle frequenze di Bohr*. Secondo quest'ultima sono le *frequenze di emissione* ad essere proporzionali alle *differenze di E* e quindi, per la (22), anche alle differenze delle autofrequenze ν di quei processi vibratorii ipotetici. E se le autofrequenze sono tutte molto grandi rispetto alle frequenze di emissione, manca

Physikalische Zeitschrift 27 (1926) 95–101. Per la teoria di Einstein, v. n. 87 a p. 53. A questo lavoro Schrödinger si riferirà anche nella seconda comunicazione (cfr. n. † a p. 78).

poco che coincidano tra di loro. Le frequenze di emissione perciò appaiono come bassi “toni differenziali” delle vibrazioni proprie che si presentano con frequenza molto più alta. Che nel passaggio dell’energia da una all’altra delle vibrazioni proprie faccia la sua comparsa *un qualche cosa* – intendo l’onda di luce –, cui spetti come *frequenza* quella *differenza* di frequenze, è molto comprensibile; ci si deve solo immaginare che l’onda di luce è causalmente collegata con i *battimenti* che si verificano necessariamente in ogni posto durante il trasferimento e che la frequenza della luce viene fissata dal numero di volte che il massimo di intensità del processo di interferenza si inverte in un secondo.

Si può sollevare l’obiezione che queste conclusioni si fondano sulla relazione (22) nella sua forma *approssimata* (secondo lo sviluppo della radice quadrata), per cui la stessa condizione sulle frequenze di Bohr apparentemente contiene un carattere di formula approssimata. Però ciò è solo apparente e viene completamente evitato se si sviluppa la teoria *relativistica*, la quale sola in genere fornisce una comprensione a livello più profondo. La grossa costante additiva C dipende naturalmente nel suo intimo dall’energia a riposo mc^2 dell’elettrone. Anche l’apparente comparsa *ripetuta e indipendente* nella condizione sulle frequenze della costante h [che per altro era stata introdotta già nella (20)] viene chiarita, oppure evitata, con la teoria relativistica. Ma purtroppo la sua derivazione accurata incontra temporaneamente ancora certe difficoltà, cui si è accennato più sopra.

È appena necessario mettere in evidenza quanto sarebbe simpatica la rappresentazione che durante una transizione quantica l’energia passa da una forma di vibrazione all’altra, come nella rappresentazione del salto elettronico. La variazione della forma di vibrazione può avvenire in modo continuo nello spazio e nel tempo, può durare a lungo quanto dura in pratica il processo di emissione (ricerche sui raggi canale di W. Wien⁷³): e tuttavia, se durante questa transizione l’atomo per un tempo proporzionatamente corto è sottoposto a un campo elettrico che manda fuori sintonia le frequenze proprie, subito anche le frequenze di battimento perdono l’accordo, e proprio solo per la durata dell’azione del campo. Questo fatto stabilito sperimentalmente procura, come è noto, le più grosse difficoltà di comprensione finora; si confronti infatti la

⁷³ Wilhelm Wien, dopo i suoi studi teorici sulla radiazione di corpo nero, si era dedicato a esperimenti sul tempo di decadimento della luminescenza prodotta dai raggi canale. Questi sono costituiti da un fascio di ioni positivi, che nel caso di Wien erano nuclei di atomi di idrogeno, osservabili in un tubo a scarica al di là del catodo, quando questo è forato. Il nome di raggi canale indica appunto la loro possibilità di identificazione solo se attraversano il catodo forato, altrimenti nell’urto col catodo stesso provocherebbero l’emissione di elettroni, cioè di raggi catodici.

W. Wien: *Über Messungen der Leuchtdauer der Atome und der Dämpfung der Spektrallinien* [Misura della durata della luminescenza atomica e dello smorzamento delle linee spettrali], *Annalen der Physik* **60** (1919) 597–637; **66** (1921) 229–236; **73** (1924) 483–504.

discussione sul noto tentativo di soluzione di Bohr–Kramers–Slater ⁷⁴.

Per il resto, nella gioia per il fatto che l'uomo riesce a penetrare tutte queste cose, non si deve dimenticare che la rappresentazione dell'atomo che, quando non sta irraggiando, vibra di volta in volta nella forma di *una* vibrazione propria, questa rappresentazione, dico io, *se* deve essere mantenuta ferma, si allontana pur sempre ancora fortemente dal quadro *naturale* di un sistema in vibrazione. Infatti è noto che un sistema macroscopico non si comporta così, ma presenta in generale una miscela ⁷⁵ delle sue vibrazioni proprie. Però non si deve congelare precipitosamente la propria opinione su questo punto. Anche una miscela di vibrazioni proprie per un singolo atomo non avrebbe alcuna importanza, fintanto che non compare alcuna delle altre frequenze di battimento che l'atomo in pratica è *eventualmente* capace di emettere. Anche la reale emissione simultanea di molte di queste linee spettrali da parte dello stesso atomo non contrasta con alcuna esperienza. Si potrebbe parimente pensare che solamente nello stato normale (e in modo approssimato in certi stati "metastabili") l'atomo vibra con *una* frequenza propria e proprio per questo motivo *non* irraggia, e cioè perché non compaiono battimenti. Lo *stimolo* avverrebbe per una simultanea eccitazione di una o più frequenze proprie, per cui poi si originano battimenti che provocano l'emissione di luce.

In ogni caso penserei che le autofunzioni appartenenti alla *stessa* frequenza sono in generale eccitate tutte simultaneamente. La molteplicità degli autovalori corrisponde infatti alla *degenerazione* nel linguaggio della teoria esistente finora. Alla riduzione della quantizzazione di un sistema degenerare dovrebbe corrispondere la distribuzione dell'energia nelle autofunzioni appartenenti a *un* autovalore.

Aggiunta durante la correzione delle bozze il 28. 2. 1926

Nel caso della meccanica classica dei sistemi conservativi si può formulare il problema variazionale in modo migliore di quanto fatto all'inizio, senza esplicito riferimento all'equazione alle derivate parziali di Hamilton, come segue. Siano $T(q, p)$ l'energia cinetica in funzione delle coordinate e degli impulsi, V l'energia potenziale, $d\tau$ l'elemento di volume dello spazio delle configurazioni "misurato razionalmente", cioè non semplicemente il prodotto $dq_1 dq_2 \dots dq_n$, ma questo diviso ancora per la radice quadrata del discrimi-

⁷⁴ Niels Bohr con Hendrik Antoon Kramers (1894–1952) e John Clarke Slater (1900–1976) aveva tentato di estendere la teoria classica della dispersione della luce sulla base del principio di corrispondenza, introducendo concetti statistici e negando il principio di conservazione dell'energia nei processi elementari.

N. Bohr, H.A. Kramers e J.C. Slater: *The quantum theory of radiation [Teoria quantistica della radiazione]*, Philosophical Magazine **47** (1924) 785–822.

⁷⁵ Schrödinger usa il termine francese *potpourri*.

nante della forma quadratica $T(q, p)$ (cfr. Gibbs, *Statistische Mechanik* ⁷⁶). Allora ψ deve rendere *stazionario* l'“integrale di Hamilton”:

$$(23) \quad \int d\tau \left\{ K^2 T \left(q, \frac{\partial \psi}{\partial q} \right) + \psi^2 V \right\},$$

sotto la *condizione ausiliaria di normalizzazione*:

$$(24) \quad \int \psi^2 d\tau = 1.$$

Gli *autovalori* di questo problema variazionale sono notoriamente *i valori stazionari* dell'integrale (23) e forniscono, secondo la nostra tesi, *i livelli quantici di energia*.

Riguardo alla (14'') si osservi inoltre che nella quantità α_2 in realtà si ha dinanzi a sé la nota espressione di Sommerfeld $-B/\sqrt{A} + \sqrt{C}$ (cfr. “*Atombau*”, 4 ed., p. 775 ⁷⁷).

Zurigo, Istituto di Fisica dell'Università.

⁷⁶ Si tratta del testo, che Schrödinger conosceva nella traduzione tedesca, di Josiah Willard Gibbs (1839–1903): *Elementary Principles in Statistical Mechanics, Developed with Especial Reference in the Rational Foundations of Thermodynamics*, Yale University Press, New Haven, 1902.

A p. 52 e segg., Gibbs dimostra che l'integrale

$$\int_{\Delta_q^{1/2}} dq_1 \dots dq_n$$

è indipendente dal sistema di coordinate q_i scelto nello spazio delle fasi. Nella dimostrazione, partendo dal riconoscimento che l'energia cinetica è una forma quadratica delle p_i e le p_i sono lineari nelle q_i , costruisce lo Hessiano Δ_q , come determinante formato dai coefficienti differenziali secondi dell'energia cinetica rispetto a q_i .

⁷⁷ Si tratta della quarta edizione del 1924 del già citato testo di A. Sommerfeld (*Atombau und Spektrallinien*, F. Vieweg & Sohn, Braunschweig, 1919) nel quale veniva calcolata la condizione quantica radiale per il moto kepleriano mediante l'integrale:

$$\begin{aligned} J_3 &= \oint \sqrt{A + 2\frac{B}{r} + \frac{C}{r^2}} dr \\ &= -2\pi i \left(\sqrt{C} - \frac{B}{\sqrt{A}} \right). \end{aligned}$$

Quantizzazione come problema agli autovalori †
(seconda comunicazione) #

§ 1. L'analogia di Hamilton tra la meccanica e l'ottica.

Prima di accingerci a trattare il problema agli autovalori della teoria quantistica per altri sistemi speciali, vogliamo chiarire meglio la relazione *generale* esistente tra l'equazione alle derivate parziali di Hamilton (P.H.) di un problema meccanico e l'"associata" *equazione d'onda*, cioè nel caso del problema di Keplero l'equazione (5) della prima comunicazione. Provvisoriamente avevamo descritto questa relazione solo brevemente secondo la sua struttura analitica esteriore mediante la trasformazione (2), di per sé incomprendibile, e il passaggio altrettanto incomprendibile di *porre uguale a zero* un'espressione per la condizione che l'*integrale spaziale* della stessa espressione debba essere *stazionario* §. Il legame *intimo* della teoria di Hamilton con il processo di propagazione ondulatoria non è per nulla nuovo. Lo stesso Hamilton non solo ne era consapevole, ma anche lo costituì come punto di avvio della sua teoria della meccanica, che si è sviluppata dalla sua *ottica dei mezzi non omogenei* § 78. Se il principio variazionale di Hamilton può essere

† di Erwin Schrödinger: *Annalen der Physik* **79** (1926) 489–527, ricevuto il 23 febbraio 1926.

Vedi questi *Annalen* **79**, p. 361, 1926. Per la comprensione *non* è affatto assolutamente necessario leggere la prima comunicazione *prima* della seconda.

§ Questo procedimento di calcolo *non viene più seguito* nella presente comunicazione. Dovrebbe solo servire per un orientamento rapido e temporaneo riguardo alla relazione esteriore tra l'equazione d'onda e la P.H. In realtà la ψ non sta all'azione di un determinato moto nella relazione sostenuta dall'equazione (2) della prima comunicazione. – Invece il legame dell'equazione d'onda e del problema variazionale è ovviamente estremamente reale: l'integrando dell'integrale stazionario è la lagrangiana del processo ondulatorio.

§ Cfr. p. es. E.T. Whittaker, *Analytische Dynamik* (edizione tedesca della Springer, 1924), cap. 11, p. 306 e segg.

⁷⁸ La citazione completa riguarda il testo di Edmund Taylor Whittaker (1873–1956): *A Treatise on the Analytical Dynamics of Particles and Rigid Bodies*, Cambridge University Press, 1904. Hamilton in una comunicazione letta all'Accademia Reale Irlandese il 3 dicembre 1824 (*Theory of Systems of Rays [Teoria dei sistemi di raggi]*, *Transactions of the Royal Irish Academy* **15** (1828) 69–176), aveva riconosciuto forti analogie formali tra la descrizione matematica del moto di una particella in meccanica analitica e la propagazione di un'onda in ottica geometrica (cfr. il testo di Jagdish Mehra e Helmut Rechenberg: *The Historical Development of Quantum Theory*, vol. 5, *Erwin Schrödinger and the Rise of Wave Mechanics*, *loc. cit.*, p. 506). A questa comunicazione seguì una serie di lavori che sono il fondamento

considerato come un *principio* di Fermat per una propagazione ondulatoria nello spazio delle configurazioni (spazio delle q), la P.H. esprime il *principio* di Huyghens per questa propagazione ondulatoria ⁷⁹. Purtroppo nella maggior parte delle moderne riproduzioni questo complesso di idee, efficace e denso di conseguenze, è stato spogliato del suo bell'abito intuitivo come di un accessorio inutile, a favore di una rappresentazione più incolore delle connessioni analitiche ^{† 80}.

Consideriamo il problema generale della meccanica classica dei sistemi conservativi. La P.H. esplicitamente risulta:

$$(1) \quad \frac{\partial W}{\partial t} + T\left(q_k, \frac{\partial W}{\partial q_k}\right) + V(q_k) = 0.$$

W è l'azione, cioè l'integrale temporale della lagrangiana $T - V$ lungo una traiettoria del sistema in funzione della posizione finale e del tempo. q_k sta

dell'odierna meccanica analitica: *Essay on the theory of systems of rays* [Saggio sulla teoria dei sistemi di raggi], Transactions of the Royal Irish Academy **15** (1928) 69–174; **16** (1830) 1–61; **16** (1831) 93–125; **17** (1837) 1–144.

⁷⁹ Secondo il principio variazionale enunciato da Pierre de Fermat (1601–1665), il raggio di luce attraversa il mezzo percorrendo un cammino che deriva dalla stazionarietà del corrispondente tempo di percorrenza:

$$\delta \int \frac{n}{c} ds = 0,$$

dove n è l'indice di rifrazione del mezzo e c è la velocità della luce. Come aveva già rilevato de Broglie nel corso degli studi per la sua tesi, il principio di Fermat ha piuttosto come corrispettivo in meccanica il principio di minima azione, che Pierre Louis Moreau de Maupertuis (1698–1759) enunciò nel 1744 e che impone la stazionarietà dell'azione $W = \int p ds$ lungo la linea, tra le infinite possibili, corrispondente alla traiettoria davvero percorsa dalla particella di impulso p .

Secondo il principio di Christian Huyghens (1629–1695), ogni punto del fronte d'onda diventa a sua volta sorgente di luce per il mezzo circostante, emettendo onde in tutte le direzioni; il fronte d'onda successivo risulta dall'involuppo di tutte queste onde. Volendo parlare di raggio di luce, e quindi di traiettoria della particella nell'analogia meccanica, il raggio di luce è sempre perpendicolare al fronte d'onda e l'impulso della particella si ottiene come gradiente dell'azione W .

Tutto il § 1 di questo lavoro è uno sviluppo di queste analogie.

[†] Fin dall'estate 1891 nelle sue lezioni sulla meccanica Felix Klein, nel ricapitolare la teoria di Jacobi, l'ha sviluppata a partire da considerazioni quasi-ottiche in spazi non euclidei più ampi. Cfr. F. Klein, Jahresber. d. Deutsch. Math. Verh. **1**, 1891 e Ztschr. f. Math. u. Phys. **46**, 1901 (Ges.-Abh. II, p. 601 e 603). Nella seconda nota Klein afferma con gentile biasimo che il suo discorso all'assemblea dei ricercatori delle scienze naturali, nella sala da cui dieci anni prima aveva presentato queste connessioni e sottolineato il grosso significato delle dissertazioni di Hamilton sull'ottica, "non ha trovato la generale attenzione che io mi ero riproposta con esso". – Ringrazio il prof. Sommerfeld per il richiamo a F. Klein in una amichevole comunicazione epistolare. V. "Atombau", 4. ed., p. 803.

⁸⁰ Felix Klein (1849–1925): *Über neuere englische Arbeiten zur Mechanik* [Nuovi lavori inglesi sulla meccanica], Jahresberichte der Deutschen Mathematischer-Vereinigung **1** (1890/91) 35–36; *Über das Brunsche Eikonale* [L'iconale di Bruns], Zeitschrift für Mathematik und Physik **46** (1901) 372–382.

a rappresentare le coordinate di posizione, T è l'energia cinetica in funzione delle coordinate di posizione e di impulso, una forma quadratica di queste ultime, per le quali sono inserite, secondo prescrizione, le derivate parziali di W rispetto a q_k . V è l'energia potenziale. Per risolvere l'equazione si pone:

$$(2) \quad W = -Et + S(q_k),$$

con cui la stessa diventa:

$$(1') \quad 2T\left(q_k, \frac{\partial W}{\partial q_k}\right) = 2(E - V).$$

E è una prima costante di integrazione arbitraria e ha il noto significato di energia del sistema. Contrariamente alla solita abitudine, nella (1') abbiamo lasciato la stessa funzione W , invece che come al solito iscrivervi la funzione delle coordinate S indipendente dal tempo. Questa è una pura formalità.

Si può ora esprimere in modo estremamente facile l'enunciato dell'equazione (1'), se si utilizza la terminologia di Heinrich Hertz ⁸¹. Essa diventa particolarmente semplice e intuitiva, come tutte le affermazioni nello spazio delle configurazioni (spazio delle variabili q_k), se in questo spazio si introduce una metrica non euclidea per mezzo dell'energia cinetica. Sia \bar{T} l'energia cinetica in funzione delle *velocità* \dot{q}_k , e non come sopra degli *impulsi*, per cui si ponga per l'elemento di linea:

$$(3) \quad ds^2 = 2\bar{T}(q_k, \dot{q}_k) dt^2.$$

Il membro di destra contiene dt solo formalmente in quanto va inteso come forma quadratica dei dq_k (mediante la relazione $\dot{q}_k dt = dq_k$).

Con questa posizione si può, come è noto, fare proprio lo stesso uso semplice di concetti, quali angolo tra due elementi di linea, perpendicolarità, divergenza e rotore di un vettore, gradiente di uno scalare, laplaciano (= div grad) di uno scalare, ecc., come nello spazio tridimensionale euclideo; ci si può impunemente servire del concetto di rappresentazione tridimensionale euclidea, solo che le espressioni analitiche per questi concetti diventano un po'

⁸¹ Heinrich Rudolf Hertz (1857–1894), oltre ad avere scoperto le onde elettromagnetiche, aveva studiato le connessioni tra inerzia e gravitazione nel tentativo di eliminare il concetto di forza in dinamica, sostituendolo con l'idea che le leggi di moto derivassero dal principio che la particella percorre una geodetica in un opportuno spazio non euclideo: in questo modo la dinamica è racchiusa nella metrica dello spazio. L'idea è simile a quella usata poi da Einstein nella sua formulazione della teoria della relatività generale.
H. Hertz: *Die Principien der Mechanik, in neuem Zusammenhange dargestellt*, J.A. Barth, Lipsia, 1894.

più complicate, in quanto al posto dell'elemento di linea euclideo deve intervenire l'elemento di linea (3). *Stabiliamo che nel seguito tutte le espressioni geometriche nello spazio q sono da intendersi in questo senso non euclideo.*

Una delle variazioni più importanti per il calcolo è il fatto che si deve distinguere accuratamente tra componenti covarianti e controvarianti di un vettore o di un tensore. Ma questa complicazione non è maggiore di quella già presente nel caso di un sistema di assi cartesiani obliqui.

I dq_k sono il prototipo di un vettore controvariante. I coefficienti della forma $2\bar{T}$, dipendenti dalle q_k , perciò hanno carattere covariante e costituiscono il tensore fondamentale covariante. $2T$ è la forma controvariante appartenente a $2\bar{T}$, in quanto notoriamente le coordinate di impulso costituiscono il vettore covariante appartenente al vettore velocità \dot{q}_k e l'impulso è il vettore velocità in forma covariante. Il membro di sinistra della (1') è quindi nulla più che la forma fondamentale controvariante in cui sono state inserite come variabili le $\partial W/\partial q_k$. Queste ultime costituiscono le componenti del vettore, per sua natura covariante,

$$\text{grad } W.$$

(Questo è il senso della conversione dell'energia cinetica dalle velocità agli impulsi, e cioè che si possono introdurre componenti vettoriali covarianti solo in una forma controvariante, se deve risultare qualcosa di sensato, cioè un invariante.)

L'equazione (1') coincide perciò con la semplice posizione:

$$(1'') \quad (\text{grad } W)^2 = 2(E - V)$$

oppure:

$$(1''') \quad |\text{grad } W| = \sqrt{2(E - V)}.$$

Questo requisito si analizza facilmente, ammesso che si sia trovata una funzione W [della forma (2)] che soddisfa a questo requisito. Allora si può in ogni caso rappresentare intuitivamente questa funzione a un certo t , tracciando nello spazio q l'insieme delle superfici $W = \text{cost.}$ e attribuendo a ciascuna di esse il suo valore W .

Ora da un lato l'equazione (1'''), come mostreremo subito, fornisce una precisa ricetta per costruire tutte le altre superfici successive a partire da una qualsiasi di questo insieme, *se essa è nota col suo valore W* . D'altro lato, l'unico dato necessario per questa costruzione, e cioè quello di *una* superficie e del suo valore W , può essere *fornito in modo del tutto arbitrario* e successivamente completato, in un modo che secondo la ricetta di costruzione è

proprio *ambiguo*, per ottenere una funzione W che soddisfa al requisito. In tutto ciò pensiamo per il momento il tempo costante. – La ricetta di costruzione *esaurisce* perciò il contenuto dell'equazione differenziale, in quanto *ciascuna* delle sue soluzioni è ottenuta da una superficie scelta convenientemente col suo valore W .



Fig. 1.

Ora riguardo alla ricetta di costruzione. Sia dunque assegnato (fig. 1) il valore W_0 a una superficie arbitraria. Per trovare la superficie cui appartiene il valore $W_0 + dW_0$, si indichi arbitrariamente *una* faccia della data superficie come quella positiva, si eriga la perpendicolare in ogni punto della superficie e vi si riporti (in rispetto del segno di dW_0) il *tratto*:

$$(4) \quad ds = \frac{dW}{\sqrt{2(E - V)}}.$$

I punti finali delle perpendicolari corrispondono alla superficie $W_0 + dW_0$. Proseguendo in questo modo si può costruire successivamente la sequenza di superfici da entrambe le facce.

La costruzione è *ambigua* perché nel primo passo si sarebbe potuto indicare come positiva anche l'*altra* superficie. Per i passi successivi però non c'è più ambiguità, vale a dire non si può cambiare arbitrariamente, a un qualunque stadio successivo del processo, la specificazione della faccia della superficie alla quale si è giusto arrivati, in quanto ciò in generale coinvolgerebbe una discontinuità della derivata prima di W . Del resto le due sequenze di superfici, cui si giunge in entrambi i casi, sono chiaramente identiche, mentre solo i valori di W loro ascritti corrono in direzione opposta.

Consideriamo ora la dipendenza dal tempo estremamente semplice, come indica l'equazione (2): anche a un qualunque istante successivo (o precedente) $t + t'$ essa illustra la distribuzione di valori W per la *stessa* sequenza di superfici, solo che ora vanno attribuiti altri valori W alle singole superfici, e precisamente si deve sottrarre Et' ad ogni valore di W ascritto all'istante t . I valori di W viaggiano per così dire da una superficie all'altra secondo una certa

legge semplice, e cioè per E positive nella direzione di valori di W crescenti. A causa di ciò ci si può figurare che ciascuna *superficie* avanza assumendo la forma e la posizione della successiva, mentre *si porta con sé* il suo valore di W . La legge di avanzamento delle superfici è data dal fatto che per esempio la superficie W_0 all'istante $t + dt$ deve avere raggiunto la posizione che all'istante t aveva la superficie $W_0 + E dt$. Ciò si realizza dalla (4) facendo avanzare di

$$(5) \quad ds = \frac{E dt}{\sqrt{2(E - V)}}$$

ogni punto della superficie W_0 nella direzione della normale positiva. Ciò significa che le superfici si spostano con una *velocità normale*:

$$(6) \quad u = \frac{ds}{dt} = \frac{E}{\sqrt{2(E - V)}},$$

che, assegnata la costante E , è una funzione della sola posizione.

Si riconosce ora che il nostro sistema di superfici $W = \text{cost.}$ può essere concepito come il sistema di fronti d'onda di un moto ondulatorio che si propaga nello spazio q , ma in modo stazionario, e per il quale l'ammontare della velocità di fase in ogni punto dello spazio è dato dalla (6). Perciò la costruzione delle perpendicolari può essere chiaramente sostituita dalla costruzione delle onde elementari di Huyghens [di raggio (5)] e dal loro involuppo. L'“indice di rifrazione” è proporzionale al reciproco della (6), dipende dalla posizione, ma non dalla direzione. Lo spazio q è quindi otticamente non omogeneo, ma isotropo. Le onde elementari sono sferiche, in ogni caso – come qui ancora una volta va detto esplicitamente – sferiche nel senso dell'elemento di linea (3).

L'azione W per il nostro sistema di onde gioca il ruolo della *fase*. La P.H. è l'espressione del principio di Huyghens. Se si formula il principio di Fermat:

$$(7) \quad 0 = \delta \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds}{u} = \delta \int_{P_1}^{P_2} \frac{ds \sqrt{2(E - V)}}{E} = \delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{2T}{E} dt = \frac{1}{E} \delta \int_{t_1}^{t_2} 2T dt,$$

si è direttamente riportati al principio di Hamilton nella forma di Maupertuis (dove l'integrale sul tempo va inteso di solito *cum grano salis*, cioè deve essere $T + V = E = \text{cost.}$ anche durante la variazione). I “raggi”, cioè le traiettorie ortogonali dei fronti d'onda, sono dunque le *traiettorie* del sistema per il valore di energia E , in accordo con il ben noto sistema di equazioni:

$$(8) \quad p_k = \frac{\partial W}{\partial q_k},$$

che dice che da ogni azione speciale può essere ricavato un insieme di traiettorie del sistema, allo stesso modo di una corrente dal suo potenziale di velocità [†] ⁸². (Gli impulsi p_k costituiscono infatti semplicemente il vettore velocità covariante e le equazioni (8) dicono che esso eguaglia il gradiente dell'azione.)

Ciononostante nelle riflessioni precedenti sui fronti d'onda, sulla velocità di avanzamento, sul principio di Huyghens, la discussione riguarda il fatto se esse debbano essere prese davvero come un'analogia della meccanica con l'ottica *ondulatoria* o non piuttosto con l'ottica *geometrica*. Infatti il concetto di *raggio*, che si incontra allora in modo particolare in meccanica, appartiene all'ottica *geometrica* ed è solo *lì* che il concetto è preciso ⁸³. Anche il principio di Fermat può essere trattato in modo puramente ottico-geometrico, con la sola utilizzazione del concetto di indice di rifrazione. E il sistema di superfici W , considerato come fronti d'onda, sta al moto della meccanica in una relazione per il momento un po' lasca, in quanto il punto rappresentativo del sistema meccanico non avanza affatto lungo il raggio con la velocità dell'onda u , ma al contrario la sua velocità è proporzionale (a E costante) a $1/u$. Essa si ricava proprio direttamente dalla (3):

$$(9) \quad v = \frac{ds}{dt} = \sqrt{2T} = \sqrt{2(E - V)}.$$

[†] Cfr. specialmente A. Einstein, Verh. d. D. Physik. Ges. **19**, p. 77, 82, 1917. La trattazione delle condizioni di quantizzazione data in questo posto è la più vicina alla presente di tutte le altre trattazioni precedenti. Anche de Broglie si è riferito ad essa.

⁸² Albert Einstein: *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein [L'enunciato quantistico di Sommerfeld e Epstein]*, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **19** (1917) 82—92.

In questo lavoro Einstein discuteva le regole di quantizzazione per un sistema a molti gradi di libertà, ottenute da Sommerfeld, Epstein e Schwarzschild (cfr. n. 42 a p. 25) sulla base della teoria di Hamilton–Jacobi, riconoscendo che gli impulsi p_k sono sempre perpendicolari alla superficie d'azione W costante, in accordo con l'eq. (8) di Schrödinger, quasi l'azione W fosse un potenziale per le p_k . Nonostante la (8) coincida con la formula della guida di de Broglie (cfr. S. Boffi: *Le onde di de Broglie, loc. cit.*), va rilevata la profonda differenza tra le onde di fase di de Broglie, che per lui accompagnerebbero realmente la particella nel suo moto nello spazio tridimensionale, e le onde di Schrödinger che si propagano nello spazio delle configurazioni.

⁸³ Il limite dell'ottica geometrica è quello di piccole lunghezze d'onda, descritto dall'equazione dell'iconale. Il nome *iconale* deriva dal greco $\epsilon\iota\kappa\omega\nu$ = *immagine* ed è stato coniato da Heinrich Bruns (1848–1919) nello stabilire i criteri generali per la formazione delle immagini nei sistemi ottici nell'ambito dell'ottica geometrica.

H. Bruns: *Das Eikonale*, Abhandlungen der math.-phys. Classe der Kgl. Sächsischen Gesellschaft der Wissenschaften (Lipsia) **35** (1895) 325–435.

Questa non corrispondenza è illuminante. In primo luogo secondo la (8) la velocità del punto del sistema è *grande* dove lo è $\text{grad } W$, cioè dove le superfici W si addensano e u è piccola. In secondo luogo dal significato di W come integrale sul tempo della lagrangiana segue che naturalmente questa *varia* durante il moto [durante dt varia di $(T - V)dt$] e quindi il punto rappresentativo non può rimanere costantemente in contatto con lo stesso fronte d'onda W ⁸⁴.

E così allora nell'analogia non entrano in scena affatto importanti concetti della teoria delle onde, come ampiezza, lunghezza d'onda, frequenza, – o, detto in generale, la *forma* d'onda – dato che manca loro un parallelo meccanico; della funzione d'onda stessa non si parla affatto, W ha per le onde solo il significato – alquanto nebuloso, data la mancanza di definizione della *forma* d'onda – di *fase*.

Se si guarda a tutto il parallelismo come a nulla più che un modo piacevole di farsi un'idea, allora questo difetto non disturba affatto e si percepirà il tentativo di eliminarlo come un inutile passatempo: l'analogia esiste per l'appunto con l'ottica *geometrica* o, se lo si vuole assolutamente, con un'ottica ondulatoria molto primitiva, e non con l'ottica ondulatoria pienamente costruita. Che l'ottica geometrica per la *luce* sia solo una grossolana approssimazione, non cambia perciò nulla. Nell'elaborazione ulteriore dell'ottica nello spazio q nel senso della teoria ondulatoria, per *conservare* l'analogia, ci si dovrebbe preoccupare proprio di non allontanarsi sensibilmente dal caso limite dell'ottica geometrica, e cioè scegliendo la *lunghezza d'onda* sufficientemente piccola^{† 85}, piccola rispetto alle dimensioni della traiettoria. Allora però la scoperta non insegna nulla di nuovo e adorna il quadro con del superfluo.

Così si potrebbe pensare in un primo momento. Ma già il primo tentativo di una costruzione di teoria ondulatoria porta a cose così impressionanti, che sorge un tutt'altro pensiero: *oggi noi sappiamo che la nostra meccanica classica fallisce per dimensioni della traiettoria molto piccole e per sue curvature molto forti*. Forse questo fallimento è in completa analogia col fallimento dell'ottica geometrica, cioè dell'“ottica con lunghezze d'onda infinitamente piccole”, che notoriamente interviene non appena gli “ostacoli” o le “aperture”

⁸⁴ In queste poche parole è contenuto l'argomento principale che smentisce l'idea di de Broglie di un'onda reale che accompagna il moto della particella.

[†] Cfr. per il caso ottico A. Sommerfeld e Iris Runge, Ann. d. Phys. **35**, p. 290, 1911. Lì viene mostrato (realizzando un'osservazione orale di P. Debye) come si possa derivare esattamente l'equazione del *primo* ordine e di *secondo* grado per la *fase* (“equazione di Hamilton”) dall'equazione del *secondo* ordine e di *primo* grado per la *funzione d'onda* (“equazione d'onda”) nel caso limite di lunghezze d'onda che tendono a zero.

⁸⁵ A. Sommerfeld e I. Runge: *Anwendung der Vektorrechnung auf die Grundlagen der geometrischen Optik [Applicazione del calcolo vettoriale ai fondamenti dell'ottica geometrica]*, Annalen der Physik **35** (1911) 277–298.

In questo lavoro Iris Anna Runge (1888–1966), figlia del matematico Carl David Tolmé Runge (1856–1927), aveva ricavato con Sommerfeld l'equazione dell'iconale dalla teoria di Hamilton.

non sono più grandi rispetto alla vera lunghezza d'onda finita ⁸⁶. Forse la nostra meccanica classica è l'analogo *completo* dell'ottica geometrica e come tale sbagliata, in disaccordo con la realtà, in quanto fallisce non appena i raggi di curvatura e le dimensioni della traiettoria non sono più grandi rispetto a una certa lunghezza d'onda alla quale spetta il reale significato nello spazio q . Allora ha valore il cercare una “meccanica ondulatoria” # ⁸⁷ – e la via più prossima per ciò è la costruzione della teoria ondulatoria della descrizione di Hamilton.

§ 2. Meccanica “geometrica” e “ondulatoria”.

In un primo momento facciamo l'ipotesi che intendere come funzioni *seno* i sistemi di onde sopra considerati sia un'appropriata elaborazione dell'analogia. Questa è la cosa più semplice e naturale, ma occorre sottolineare la sua intrinseca *arbitrarietà*, a causa del *significato fondamentale* di questa ipotesi. Perciò la funzione d'onda deve contenere il tempo solo nella forma di un fattore $\sin(\dots)$, il cui argomento è una funzione lineare di W . Il coefficiente di W deve avere le dimensioni di un reciproco dell'azione, dato che W è un'azione, mentre la fase di un seno è un numero indefinito. Assumiamo che sia una costante universale, cioè non meramente indipendente da E , ma anche dalla natura del sistema meccanico. Potremmo proprio indicarla subito con $2\pi/h$. Il fattore temporale perciò è:

$$(10) \quad \sin\left(\frac{2\pi W}{h} + \text{cost}\right) = \sin\left(-\frac{2\pi Et}{h} + \frac{2\pi S(q_k)}{h} + \text{cost}\right).$$

Con ciò la *frequenza* ν delle onde risulta:

$$(11) \quad \nu = \frac{E}{h}.$$

⁸⁶ In tali condizioni si manifestano i fenomeni di diffrazione, tipici della natura ondulatoria, e si perde il significato di raggio di luce (o di traiettoria). Schrödinger sta focalizzando con molta lucidità i limiti della descrizione della meccanica classica.

Cfr. A. Einstein, Berl. Ber. p. 9 e segg., 1925.

⁸⁷ Il lavoro citato di Einstein è il secondo di un gruppo di tre sul gas perfetto, comparsi tra il 1924 e il 1925 sulla stessa rivista. In esso aderisce all'ipotesi di de Broglie di un impulso p della particella associato a una lunghezza d'onda λ , responsabile per esempio di fenomeni di diffrazione per le molecole del gas quando attraversino fenditure di dimensioni confrontabili con λ .

A. Einstein: *Quantentheorie des einatomigen idealen Gases [Teoria quantistica del gas perfetto monoatomico]*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften (Berlino) (1924) 261–267; (1925) 3–14; *Zur Quantentheorie des idealen Gases [Teoria quantistica del gas perfetto]*, *ibid.* (1925) 18–25.

Perciò senza evidente artificio la frequenza delle onde nello spazio q risulta proporzionale all'energia del sistema [†]. Questa ha certo senso se E è determinata in modo assoluto e non, come nella meccanica classica, a meno di una costante additiva. *Indipendente* da questa costante additiva è la *lunghezza d'onda* secondo la (6) e la (11):

$$(12) \quad \lambda = \frac{u}{\nu} = \frac{h}{\sqrt{2(E - V)}},$$

in quanto il radicando è il doppio dell'energia cinetica. Se facciamo un confronto grossolano e del tutto momentaneo di questa lunghezza d'onda con le dimensioni dell'orbita di un elettrone dell'atomo d'idrogeno, come fornite dalla meccanica classica, allora occorre fare attenzione che per la (3) un "segmento" nel nostro spazio q non ha le dimensioni di una lunghezza, ma piuttosto di una lunghezza moltiplicata per la radice quadrata di una massa. Le stesse dimensioni ha λ . Dobbiamo perciò dividere λ (come facilmente ci si rende conto) per la dimensione dell'orbita, diciamo a (cm), moltiplicata per la radice quadrata della massa m dell'elettrone. Il rapporto è dell'ordine di

$$\frac{h}{mva},$$

dove v per il momento è la velocità dell'elettrone (cm/sec). Il denominatore mva è dell'ordine di grandezza del momento della quantità di moto. Che per le orbite kepleriane delle dimensioni atomiche questo raggiunga almeno l'ordine di grandezza di 10^{-27} segue, prima di ogni teoria dei quanti, dai noti valori della carica e della massa dell'elettrone. Otteniamo dunque in effetti il corretto ordine di grandezza per il *limite del dominio approssimato di validità della meccanica classica* se identifichiamo la nostra costante h col quanto d'azione di Planck. – Ciò solo per un orientamento provvisorio.

Se nella (6) si esprime E mediante ν secondo la (11), si ottiene:

$$(6') \quad u = \frac{h\nu}{\sqrt{2(h\nu - V)}}.$$

La dipendenza della velocità dell'onda dall'energia del sistema si trasforma dunque in una dipendenza caratteristica dalla *frequenza*, cioè in una *legge di dispersione* per le onde. Questa legge di dispersione offre un grande interesse. Nel § 1 abbiamo dimostrato che i fronti d'onda in moto hanno solo un legame lasco col movimento del punto rappresentativo del sistema, in quanto le loro

[†] Nella prima comunicazione questa relazione appariva purtroppo come un'equazione approssimata nell'ambito di una pura discussione speculativa.

velocità non sono né possono essere uguali. Secondo la (9), la (11) e la (6') la velocità v del sistema ha comunque un significato molto concreto anche per le onde. Si accerta subito che è ⁸⁸:

$$(13) \quad v = \frac{d\nu}{d\left(\frac{\nu}{u}\right)},$$

cioè la velocità del punto rappresentativo del sistema è quella di una *velocità di gruppo*, che riempie un piccolo intervallo di frequenze (velocità del segnale). Si ritrova qui un enunciato che de Broglie aveva derivato nelle belle ricerche [†], cui sono grato per lo stimolo a questo lavoro, per le “onde di fase” dell’elettrone e precisamente con riferimento sostanziale alla teoria della relatività. Si vede che si tratta di un teorema della maggiore generalità che non scaturisce dalla teoria della relatività, ma piuttosto ha validità anche per ogni sistema conservativo dell’ordinaria meccanica.

Questo fatto può essere ora utilizzato per stabilire un legame, molto più profondo di quanto fatto finora, tra la propagazione ondulatoria e il moto del punto rappresentativo. Si può cercare di costruire un gruppo di onde che abbia dimensioni relativamente piccole in tutte le direzioni. Un tale gruppo di onde seguirà allora presumibilmente le stesse leggi di moto di un singolo punto rappresentativo del sistema meccanico. Esso potrà fornire per così dire un *surrogato* del punto rappresentativo fintanto che possa essere riguardato approssimativamente puntiforme, cioè fintanto che si possa trascurare la sua espansione rispetto alle dimensioni della traiettoria del sistema. In ogni caso questo si verifica solo se le dimensioni della traiettoria, e in particolare i raggi di curvatura dell’orbita, sono molto grandi rispetto alla lunghezza d’onda. Infatti, per l’analogia con l’ottica ordinaria, da quanto detto risulta chiaro che le dimensioni del gruppo di onde non si lasciano ridurre al di sotto dell’ordine di grandezza della lunghezza d’onda, ma al contrario il gruppo deve estendersi in tutte le direzioni su un numero grande di lunghezze d’onda, se deve essere *approssimativamente monocromatico*. Ma questo è quanto dobbiamo richiedere,

⁸⁸ Dalla (6'), si ha:

$$\frac{\nu}{u} = \frac{1}{h} \sqrt{2(h\nu - V)},$$

da cui, per la (9) e la (11):

$$d\left(\frac{\nu}{u}\right) = \frac{d\nu}{\sqrt{2(h\nu - V)}} = \frac{d\nu}{v}$$

e quindi la (13). Tenendo presente che ν/u è l’inverso della lunghezza d’onda, cioè il numero d’onda, la (13) è proprio la definizione della velocità di gruppo v , in accordo con quanto proposto da John William Strutt (Lord Rayleigh, 1842–1919) nel suo trattato: *The Theory of Sound*, Macmillan, Londra, 1877; II ed. rist. Dover Publ., New York, 1945.

[†] L. de Broglie, *Annales de Physique* (10) **3**, p. 22, 1925 (Tesi, Parigi, 1924).

dato che il gruppo di onde si propaga come un tutto con una determinata velocità e deve corrispondere a un sistema meccanico di *determinata energia* (v. eq. (11)).

Per quanto vedo, è possibile costruire tali gruppi di onde e proprio secondo lo stesso principio con cui Debye § e von Laue # ⁸⁹ hanno risolto il problema nell'ottica ordinaria dando l'esatta rappresentazione analitica di un cono di raggi o di un fascio di raggi. Inoltre c'è una relazione molto interessante con una parte della teoria di Hamilton–Jacobi non ancora menzionata nel §1, e cioè con la ben nota deduzione delle equazioni di moto in forma integrata mediante derivazione di un integrale completo della P.H. rispetto alle costanti di integrazione. Vedremo subito che il detto sistema di equazioni di Jacobi si identifica con l'enunciato: il punto rappresentativo del sistema meccanico coincide sempre con *quel* punto in cui un certo continuo di treni di onde concorre con *uguale fase*.

In ottica la rappresentazione rigorosa della teoria ondulatoria di un “fascio di raggi” di sezione finita a bordi “nitidi”, che viaggia verso un punto di fuoco e poi di nuovo si estende, si ottiene secondo Debye nel modo seguente: si sovrappongono onde *piane*, di cui ognuna riempirebbe da sola l'*intero* spazio, e precisamente si sovrappone un *continuo* di tali treni di onde, mentre la normale all'onda viene fatta variare all'interno dell'angolo spaziale assegnato. Allora all'esterno di un certo doppio cono le onde si distruggono quasi completamente per interferenza e rappresentano in modo esatto secondo la teoria ondulatoria il desiderato fascio di raggi delimitato, con tutte le manifestazioni di diffrazione necessariamente richieste dalla delimitazione. – Parimente a quello *finito* si può in questo modo rappresentare anche un fascio di raggi infinitesimo con la normale alle onde dell'insieme che può variare solo all'interno di un angolo spaziale infinitesimo. Questo è il metodo utilizzato da v. Laue nella sua famosa trattazione dei gradi di libertà dei fasci di raggi †. Infine si può, anziché lavorare con un'onda puramente monocromatica, come si è tacitamente assunto finora, far variare anche la *frequenza* all'interno di un intervallo infinitesimo e, mediante un'opportuna distribuzione di ampiezza e di

§ P. Debye, Ann. d. Phys. **30**, p. 755, 1909.

M. v. Laue, *ibidem* **44**, p. 1197 (§2), 1914.

⁸⁹ Debye aveva mostrato che una sovrapposizione continua di onde piane può propagarsi spazialmente concentrata se i vettori d'onda delle varie onde si mantengono all'interno di uno stretto angolo solido: all'esterno di tale cono le varie onde interferiscono distruttivamente. Von Laue aveva esteso questo risultato al caso di un'apertura angolare infinitesima del fascio per studiare i gradi di libertà del fascio stesso all'interno di una cavità.

P. Debye: *Das Verhalten der Lichtwellen in der Nähe eines Brennpunktes oder einer Brennlinie [Comportamento delle onde di luce in vicinanza di un punto di fuoco o di una linea di fuoco]*, Annalen der Physik **30** (1909) 755–776.

M. von Laue: *Die Freiheitsgrade von Strahlenbündeln [I gradi di libertà di fasci di raggi]*, Annalen der Physik **44** (1914) 1197–1212.

† *Loc. cit.*

fase, limitare l'eccitazione a una regione che sia relativamente piccola anche nella direzione longitudinale. Così si ottiene la rappresentazione analitica di un "pacchetto di energia", di dimensioni relativamente piccole, che si propaga con la velocità della luce oppure, se c'è dispersione, con la velocità di gruppo. Inoltre la *posizione* del pacchetto di energia – se non si arriva a una sua struttura di dettaglio – in modo molto plausibile è data di volta in volta dal punto spaziale nel quale *tutte* le onde piane sovrapposte si incontrano in concordanza *esatta* di fase.

Vogliamo adesso trasferire queste considerazioni alle onde nello spazio q . Scegliamo a un certo istante t un certo punto P dello spazio q dove deve passare il pacchetto di onde all'istante t in una data direzione. Inoltre sia assegnata la frequenza media ν o il valor medio dell'energia E per il pacchetto di onde. Per il sistema meccanico queste assegnazioni corrispondono esattamente al fatto che a un dato istante esso deve partire da una data configurazione con date componenti di velocità (energia più direzione uguali alle componenti della velocità).

Per trasferire ora la costruzione dell'ottica abbiamo ora bisogno inoltre di *una* famiglia di fronti d'onda della richiesta frequenza, cioè *una* soluzione della P.H. (1') per il dato valore di E , diciamo W , che ha la seguente proprietà: la superficie dell'insieme che passa da P all'istante t , diciamo

$$(14) \quad W = W_0,$$

deve essere perpendicolare nel punto P alla direzione R assegnata. Ma ciò non basta ancora. Ora dobbiamo piuttosto poter variare infinitamente di poco l'insieme di onde W ancora in n modi (n = numero di gradi di libertà) così che la normale all'onda nel punto P spazii una regione angolare a $n - 1$ dimensioni infinitamente piccola e la frequenza E/ν una regione *monodimensionale* infinitamente piccola, con la preoccupazione che tutti i membri di questo continuo formato dalla famiglia di onde, infinitamente piccolo e a n dimensioni, si incontrino all'istante t nel punto P esattamente in concordanza di fase. E poi bisognerà dimostrare *dove* si trova il punto a un qualunque altro istante si verifichi questa concordanza di fase.

Per provvedere a ciò basterà disporre di una soluzione della P.H., quella che dipende, oltre che dalla costante E che vogliamo provvisoriamente indicare con α_1 , anche da altre $n - 1$ costanti $\alpha_2, \alpha_3, \dots \alpha_n$, in modo tale che non si possa scrivere come una funzione di meno di n combinazioni di queste n costanti. Allora possiamo in primo luogo attribuire α_1 al valore assegnato di E ; e in secondo luogo possiamo determinare $\alpha_2, \alpha_3, \dots \alpha_n$ in modo che il fronte dell'insieme che transita dal punto P abbia nel punto P l'assegnata direzione normale R . D'ora in avanti intendiamo con $\alpha_2, \alpha_3, \dots \alpha_n$ *questi* valori e la (14) sia la superficie di *questo* insieme che transita dal punto P

all'istante t . Quindi consideriamo il *continuo di insiemi* che appartiene ai valori α_k di un adiacente intervallo infinitesimo di α_k . Un membro di questo continuo, cioè *un insieme*, è dato dalla relazione:

$$(15) \quad W + \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} d\alpha_1 + \frac{\partial W}{\partial \alpha_2} d\alpha_2 + \dots + \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} d\alpha_n = \text{cost.}$$

al variare della costante per una *fissata* serie di valori $d\alpha_1, d\alpha_2, \dots, d\alpha_n$. Il membro di *questo insieme*, cioè l'unica superficie che all'istante t passa dal punto P , viene fissato dalla seguente scelta della costante:

$$(15') \quad \begin{aligned} W + \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} d\alpha_1 + \dots + \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} d\alpha_n &= \\ &= W_0 + \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \right)_0 d\alpha_1 + \dots + \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_n} \right)_0 d\alpha_n, \end{aligned}$$

dove $(\partial W / \partial \alpha_1)_0$ ecc. sono quelle *costanti* che si ottengono quando si introducono nelle derivate parziali in questione le coordinate del punto P e il valore dell'istante t (il quale ultimo del resto interviene realmente solo in $\partial W / \partial \alpha_1$).

Le superfici (15') per tutte le serie di valori possibili di $d\alpha_1, d\alpha_2, \dots, d\alpha_n$ costituiscono da parte loro *un insieme*. All'istante t esse passano tutte dal punto P , le loro normali all'onda riempiono continuamente un piccolo angolo spaziale (a $n - 1$ dimensioni) e inoltre il loro parametro E varia in un piccolo intervallo. L'insieme di superfici (15') risulta dal fatto che ogni insieme di superfici (15) contribuisce alla (15') con *un rappresentante*, cioè quel componente che passa dal punto P all'istante t .

Vogliamo ora fare l'ipotesi che gli angoli di fase delle funzioni d'onda che appartengono agli insiemi (15) siano in concordanza proprio con questi rappresentanti delegati secondo la (15'). Perciò sono in concordanza di fase all'istante t nel punto P .

Ci chiediamo ora: c'è anche un punto *a un istante arbitrario*, in cui tutte le superfici dell'insieme (15') si intersecano *e in cui perciò* tutte le funzioni d'onda appartenenti all'insieme (15) sono in concordanza di fase? La risposta suona: *esiste* il punto della fase in concordanza, ma esso *non* è il punto di intersezione comune delle superfici dell'insieme (15'), perché un tale punto *non esiste più* a un istante arbitrario. Piuttosto il punto della fase in concordanza si presenta *in modo che* gli insiemi (15) *ricambiano continuamente* il loro rappresentante delegato nella (15').

Ciò si riconosce così. Per il punto di intersezione comune di tutti i componenti della (15') a un istante qualsiasi dovrebbero valere contemporaneamente:

$$(16) \quad \begin{aligned} W = W_0, \quad \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} &= \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \right)_0, \quad \frac{\partial W}{\partial \alpha_2} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_2} \right)_0, \\ \dots, \quad \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} &= \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_n} \right)_0, \end{aligned}$$

perché $d\alpha_1$ è arbitrario all'interno di un piccolo intervallo. In queste $n + 1$ equazioni i membri di destra sono costanti, i membri di sinistra sono funzioni delle $n + 1$ quantità q_1, q_2, \dots, q_n, t . Le equazioni sono soddisfatte per il sistema di valori d'uscita, cioè per le coordinate del punto P e l'istante d'uscita t . Per un altro valore arbitrario di t esse *non hanno alcuna* soluzione in $q_1 \dots q_n$, perché invece il sistema sovradetermina queste n quantità.

Si può però procedere nel modo seguente. Per il momento si lascia da parte la prima equazione, $W = W_0$, e si determinano le q_k in funzione del tempo e delle costanti conformemente alle rimanenti n equazioni. Si chiami Q questo punto. Per lui ora la *prima* equazione *non* è naturalmente soddisfatta, ma il suo membro di sinistra differirà da quello di destra per un certo ammontare. Se si torna alla genesi del sistema di equazioni (16) a partire dalla (15'), acquista significato l'affermazione fatta che Q non è il punto comune per l'insieme di superfici (15'), ma piuttosto per l'insieme di superfici che discende dalla (15') con la condizione che il membro di destra dell'equazione (15') cambia di un ammontare costante per tutte le superfici dell'insieme. Si chiami (15'') l'insieme così ottenuto. Per questo è dunque Q il punto comune. Esso si ricava dall'insieme (15'), come affermato sopra in anticipo, per il fatto che ognuno degli insiemi (15) cambia il suo rappresentante delegato secondo la (15'). Questo ricambio avviene per la variazione della costante nella (15) per tutti i rappresentanti *dello stesso ammontare*. Con ciò però viene variato l'*angolo di fase* per tutti i rappresentanti dello stesso ammontare. Come i vecchi, anche i nuovi rappresentanti, cioè i componenti dell'insieme che abbiamo chiamato (15'') e che si intersecano nel punto Q , sono dunque in concordanza di fase. Ciò dunque significa:

Il punto Q determinato in funzione del tempo attraverso le n equazioni:

$$(17) \quad \frac{\partial W}{\partial \alpha_1} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_1} \right)_0, \dots, \frac{\partial W}{\partial \alpha_n} = \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_n} \right)_0,$$

continua a essere un punto di concordanza di fase per l'intero insieme di famiglie di onde (15).

Delle n superfici, di cui Q per la (17) appare il punto di intersezione, solo la prima è mobile, mentre le altre stanno ferme [solo la prima delle equazioni (17) contiene il tempo]. Le $n - 1$ superfici ferme determinano la *traiettoria* del punto Q come loro intersezione. Si può facilmente mostrare che questa linea

di intersezione è una traiettoria ortogonale all'insieme $W = \text{cost.}$ Infatti per ipotesi W soddisfa identicamente la P.H. in $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$. Se ora si deriva la P.H. rispetto a α_k ($k = 2, 3, \dots, n$), si ottiene l'enunciato che la perpendicolare a una superficie $\partial W / \partial \alpha_k = \text{cost.}$ è *perpendicolare* in ogni punto di questa superficie alla normale alla superficie $W = \text{cost.}$ che passa da questo stesso punto, cioè che ognuna delle due superfici contiene la normale all'altra. Se la linea di intersezione delle $n - 1$ superfici ferme (17) non si dirama, cosa che sicuramente succede in generale, allora ogni elemento di linea della curva di intersezione, come *unico* elemento di linea *comune* delle $n - 1$ superfici, deve coincidere con la normale della superficie W che passa per lo stesso punto, cioè la curva di intersezione è la traiettoria ortogonale delle superfici W , come si doveva dimostrare.

In modo molto più breve, per così dire stenografico, le considerazioni alquanto dettagliate che ci hanno portato alle equazioni (17) si possono riassumere come segue: W indica, a meno di una costante universale $1/h$, l'angolo di fase della funzione d'onda. Se ora non c'è *una sola*, ma una varietà continua di sistemi di onde, ordinata secondo un parametro continuo qualunque α_i , allora le equazioni $\partial W / \partial \alpha_i = \text{cost.}$ portano all'enunciato che tutti gli elementi individuali infinitamente vicini (sistemi di onde) di questa varietà sono in concordanza di fase. Queste equazioni determinano dunque il luogo geometrico dei punti in concordanza di fase. Se queste equazioni sono sufficienti, questo luogo si contrae a un punto e le equazioni determinano allora *il punto* di concordanza di fase in funzione del tempo.

Dato che il sistema di equazioni (17) coincide con il noto secondo sistema di equazioni di Jacobi, abbiamo così mostrato che:

Il punto di concordanza di fase per determinate varietà infinitesime a n parametri di sistemi di onde si muove secondo le stesse leggi del punto rappresentativo del sistema meccanico.

Ora ritengo un compito molto difficile quello di dimostrare esattamente che la sovrapposizione di questo sistema di onde dia realmente una apprezzabile eccitazione solo in un intorno relativamente piccolo del punto di concordanza di fase, mentre altrimenti le onde si distruggono sensibilmente per interferenza, oppure che quanto detto si verifichi almeno per un'opportuna scelta delle ampiezze ed eventualmente per una scelta speciale della *forma* dei fronti d'onda. Lo porrò come ipotesi fisica che voglio collegare a ciò che va dimostrato, senza addentrarmi in questo compito. Varrà la pena di farlo solo se l'ipotesi si realizza e se la sua applicazione esigesse quell'analisi.

Per contro, bisogna essere sicuri che la regione, in cui l'eccitazione può essere limitata, manca ancora almeno di un gran numero di lunghezze d'onda in ogni direzione. Ciò è in primo luogo senza dubbio evidente in quanto, finché ci si allontana dal punto di concordanza di fase solo di *poche* lunghezze d'onda, la concordanza di fase viene appena intaccata, essendo l'interferenza ancora quasi altrettanto favorevole quanto nel punto stesso. In secondo luogo il

richiamo al caso euclideo tridimensionale dell'ottica ordinaria basta per essere sicuri che il suo comportamento in generale sia almeno di questo tipo.

Ciò che ora credo con grande convinzione è quanto segue.

L'evento meccanico reale viene appropriatamente compreso o rappresentato mediante i *processi ondulatori* nello spazio q e non mediante il moto dei *punti rappresentativi* in questo spazio. Lo studio del moto del punto rappresentativo, che costituisce l'oggetto della meccanica classica, è solo un procedimento approssimato e come tale ha esattamente la stessa giustificazione dell'ottica geometrica o dei raggi rispetto ai processi ottici reali. Un processo meccanico macroscopico sarà rappresentato come segnale ondulatorio del tipo descritto sopra, che con sufficiente approssimazione può essere considerato puntiforme in confronto con la struttura geometrica della traiettoria. Abbiamo visto che allora per un tale segnale o gruppo di onde davvero valgono esattamente le stesse leggi di moto che la meccanica classica stabilisce per il punto rappresentativo⁹⁰. Questo tipo di trattazione perde però senso se la struttura della traiettoria non è più molto grossa rispetto alla lunghezza d'onda oppure diventa del tutto confrontabile con essa. In questo caso *deve* intervenire la rigorosa trattazione ondulatoria, cioè per farsi un quadro della varietà dei possibili processi si deve partire dall'*equazione d'onda* e non dalle equazioni

⁹⁰ Qualche mese più tardi, Schrödinger sviluppa meglio questa idea utilizzando le autofunzioni dell'oscillatore armonico lineare che qui ricava nel § 3.1. Sovrapponendo le onde ψ_n corrispondenti ai vari livelli energetici, Schrödinger costruisce un pacchetto di onde,

$$\psi = \sum_n \left(\frac{A}{2}\right)^n \frac{\psi_n}{n!},$$

con $A \gg 1$, che risulta concentrato spazialmente e privo di sparpagliamento durante il suo moto; il baricentro di tale pacchetto si trova in corrispondenza di $n = A^2/2$ e oscilla armonicamente con la stessa frequenza e con un'energia pari al valor medio delle energie relative alle singole onde del pacchetto. Il risultato è in accordo col principio di corrispondenza della teoria dei quanti di Bohr, secondo il quale nel limite di grandi numeri quantici si deve recuperare la descrizione classica del moto.

E. Schrödinger: *Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik [Il passaggio continuo dalla micro- alla macromeccanica]*, Die Naturwissenschaften **14** (1926) 664–666, ricevuto dalla rivista il 9 luglio 1926.

L'esempio di Schrödinger era fuorviante per Werner Heisenberg (1901–1976), che lo critica nel lavoro in cui enuncia il principio di indeterminazione (*Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik [Il contenuto intuitivo della cinematica e della meccanica nella teoria quantistica]*, Zeitschrift für Physik **43** (1927) 172–198; cfr. S.Boffi: *Il principio di indeterminazione*, Quaderni di Fisica Teorica, n. 3, Università di Pavia, 1990, p. 60) in quanto potrebbe indurre nella tentazione di dare significato reale alle onde della meccanica quantistica pretendendo di recuperare il concetto di traiettoria della meccanica classica. In realtà il pacchetto di onde di Schrödinger è molto particolare e rappresenta uno stato che solo molti anni più tardi viene riconosciuto come uno stato a minima indeterminazione, appartenente all'insieme degli stati cosiddetti coerenti, che Roy Jay Glauber (n. 1925) introdusse per descrivere le proprietà statistiche della radiazione elettromagnetica.

R.J. Glauber: *Coherent and Incoherent States of the Radiation Field [Stati coerenti e stati incoerenti del campo di radiazione]*, Physical Review **131** (1963) 2766–2788.

fondamentali della meccanica. Queste ultime sono inutilizzabili per la spiegazione della microstruttura dell'evento meccanico, allo stesso modo in cui l'ottica geometrica lo è per la spiegazione dei *fenomeni di diffrazione*.

Se è vero che, certamente sotto ipotesi supplementari molto artificiali, una certa interpretazione di questa microstruttura in connessione con la meccanica classica è riuscita in generale e ha messo in mostra risultati pratici della massima importanza, mi sembra molto significativo che questa teoria – intendo la teoria dei quanti nella forma prediletta da Sommerfeld, Schwarzschild, Epstein e altri – si trovi in connessione intima proprio con la P.H. e la teoria della risoluzione di Hamilton–Jacobi, cioè con quella forma della meccanica classica che contiene già il richiamo chiarissimo al vero carattere ondulatorio dell'evento meccanico. La P.H. corrisponde proprio al principio di Huyghens (nella sua vecchia forma ingenua, non in quella rigorosa di Kirchhoff ⁹¹). E come questo, integrato con alcune prescrizioni completamente incomprensibili per l'ottica geometrica (la costruzione delle zone di Fresnel ⁹²), giustifica in larga misura i fenomeni di diffrazione, così la teoria dell'azione potrebbe gettare luce sui processi atomici. Al contrario ci si dovrebbe imbarcare in contraddizioni insolubili, se anche per i processi atomici si cercasse di mantenere in piedi – cosa che certamente era molto naturale – il concetto di *traiettorie del sistema*; allo stesso modo ci si perderebbe nell'incomprensibilità se si cercasse di correre dietro ai *raggi di luce* nel dominio dei fenomeni di diffrazione.

Si pensi un po' alla cosa seguente. Con ciò non voglio ancora dare un quadro appropriato dell'evento reale, che non va in ogni modo ottenuto da questo aspetto, ma va ottenuto solo mediante l'esame dell'equazione d'onda; voglio semplicemente illustrare la situazione in modo puramente qualitativo. Perciò si immagini che un gruppo di onde con le caratteristiche descritte sopra incida in qualche modo su una piccola "traiettoria" quasi chiusa, le cui dimensioni siano solo dell'ordine di grandezza della lunghezza d'onda, e quindi

⁹¹ Gustav Robert Kirchhoff (1824–1887) era riuscito a derivare dall'equazione d'onda di d'Alembert una formula che consente di ottenere in un punto una qualsiasi componente del campo elettrico o del campo magnetico associato alla propagazione della luce, in cui il ruolo della sorgente viene assunto da una superficie che separa la sorgente dal punto in cui si vuole conoscere il campo: non necessariamente questa superficie è un fronte d'onda come nel principio di Huyghens, che così viene ritrovato come caso particolare.

⁹² Augustin–Jean Fresnel (1788–1827) divulgò i risultati di Thomas Young (1773–1829) in favore della natura ondulatoria della luce, dedicandosi in modo particolare ai fenomeni di diffrazione. Tra questi si possono distinguere i cosiddetti fenomeni di Fresnel che si verificano quando si osserva la diffrazione in punti posti a distanza finita dai diaframmi o dagli ostacoli che provocano la diffrazione. Nel calcolo, in generale molto laborioso, dell'intensità della luce diffratta si considera l'interferenza delle onde elementari che partono dai vari punti raggiunti per esempio in corrispondenza dell'apertura di un diaframma: è comodo allora suddividere la sezione del diaframma in zone anulari, le zone di Fresnel, ottenute facendo intersecare il piano dello schermo col diaframma da parte di sfere concentriche al punto nel quale si vuole calcolare l'intensità diffratta. I raggi di queste sfere differiscono tra di loro di mezza lunghezza d'onda così che il contributo delle zone successive è alternativamente in opposizione di fase.

piccole in proporzione al gruppo di onde. È chiaro che allora la “traiettorie del sistema” nel senso della meccanica classica, cioè la traiettoria del punto in esatta concordanza di fase, perderà completamente il suo ruolo privilegiato, perché davanti, dietro e di fianco a questo punto si estende un intero continuo di punti in cui esiste ancora una concordanza di fase perfetta quasi allo stesso modo e che descrivono tutt’altre “traiettorie”. Detto altrimenti: il gruppo di onde non riempie solo l’intera regione della traiettoria in una volta, ma le va ancora ben oltre in tutte le direzioni.

In *questo* senso mi raffiguro le “onde di fase” che secondo de Broglie accompagnano la traiettoria dell’elettrone, nel senso cioè che, in ogni caso in ambito atomico, non viene attribuito in alcun modo un significato privilegiato alla traiettoria stessa dell’elettrone e ancora meno alla posizione dell’elettrone sulla sua traiettoria⁹³. E in questo senso interpreto la convinzione, che oggi sempre più si fa strada, che *in primo luogo*: debba essere negato un significato di realtà alla *fase* dei moti dell’elettrone in un atomo; *in secondo luogo*: non si possa affatto sostenere che l’elettrone si trovi in un determinato istante *su una determinata* traiettoria quantistica scelta in base alle condizioni di quantizzazione; *in terzo luogo*: le vere leggi della meccanica quantistica non consisterebbero in determinate prescrizioni per la *singola* traiettoria, ma in queste leggi vere gli elementi dell’intera varietà di traiettorie di un sistema sarebbero collegati mediante equazioni in modo che apparentemente esiste una certa azione di scambio tra le diverse traiettorie^{† 94}.

Non è incomprendibile che un’accurata analisi del dato sperimentale debba portare ad affermazioni di questo genere, se il dato sperimentale è lo sbocco di una tale struttura della realtà, come sosteniamo qui. Tutte queste affermazioni contribuiscono sistematicamente alla dissoluzione dei concetti di “posizione dell’elettrone” e di “traiettorie dell’elettrone” e, se non si decide per questa dissoluzione, essi rimangono pieni di contraddizioni. Queste contraddizioni sono percepite così forti che si dubita sulla possibilità di incorporare in generale l’evento atomico nelle forme spazio-temporali del pensiero. Dal punto di vista filosofico giudicherei la decisione finale in questo senso pari a una resa completa, in quanto non possiamo davvero cambiare le forme del pensiero e ciò che non possiamo capire al loro interno, non possiamo capirlo del tutto. Ci sono cose del genere – ma non penso che la struttura atomica

⁹³ Si prefigura qui l’elemento che caratterizza la meccanica quantistica e che verrà poi formalizzato nel principio di indeterminazione di Heisenberg.

[†] Cfr. specialmente i lavori citati più tardi di Heisenberg, Born, Jordan, Dirac, inoltre N. Bohr, *Die Naturwissenschaften*, gennaio 1926.

⁹⁴ Queste idee sulla rinuncia alla descrizione spazio-temporale dell’evento fisico si stavano facendo strada, alla luce della meccanica delle matrici di Heisenberg, Born e Jordan e della formulazione equivalente di Dirac (cfr. n. 96 a p. 67), ed erano state illustrate nell’articolo di Niels Bohr: *Atomtheorie und Mechanik [Teoria atomica e meccanica]*, *Die Naturwissenschaften* **14** (1926) 1–10, traduzione tedesca di un articolo originariamente pubblicato in inglese: *Atomic Theory and Mechanics*, *Nature* **116** (1925) 845–852.

vi appartenga. – Dal nostro punto di vista però non c'è affatto alcun motivo di un dubbio tale, sebbene, o detto meglio, *perché* il suo emergere è straordinariamente comprensibile. Anche un ottico geometrico, che invariabilmente fallisce nei suoi continui tentativi di affrontare i fenomeni di diffrazione per mezzo del concetto di raggio che ha dato buoni risultati nell'ottica macroscopica, una tale persona potrebbe essere portata, dico io, a concludere che le *leggi della geometria* sui fenomeni di diffrazione non sono applicabili, in quanto è portato continuamente a pensare che i raggi di luce, che gli sono noti come *rettilinei e indipendenti* uno dall'altro, ora presentano anche in un mezzo omogeneo notevolissime *curvature* e visibilmente si influenzano reciprocamente. Considero questa analogia *molto* stretta. Non manca perfino l'analogo atomico delle *curvature* ingiustificate – si pensi al “vincolo non meccanico” escogitato per l'interpretazione dell'effetto Zeeman anomalo⁹⁵.

In che modo si deve dunque procedere nello sviluppo ondulatorio della meccanica nei casi in cui esso si dimostra necessario? Si deve partire, invece che dalle equazioni fondamentali della meccanica, da un'equazione d'onda per lo spazio q e considerare la varietà dei processi che *essa* rende possibili. L'equazione d'onda non è stata ancora esplicitamente utilizzata in questa comunicazione e in generale non è stata ancora costruita. L'unico dato per la sua costruzione è la *velocità dell'onda* fornita dalla (6) o dalla (6') in funzione del parametro meccanico di energia ovvero della frequenza e mediante questo dato l'equazione d'onda naturalmente non è fissata in modo univoco. Non è affatto deciso che debba essere proprio del secondo ordine, solo il proposito della semplicità è motivo per ora di provarci una volta. Si porrà allora per la funzione d'onda:

$$(18) \quad \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi - \frac{1}{u^2} \ddot{\psi} = 0,$$

valida per processi che dipendono dal tempo solo attraverso un fattore $e^{2\pi i \nu t}$. Tenendo presenti la (6), la (6') e la (11), ciò significa dunque:

$$(18') \quad \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (h\nu - V)\psi = 0,$$

⁹⁵ P. Zeeman: *On the Influence of Magnetism on the Nature of the Light Emitted by a Substance* [Influenza del campo magnetico sulla natura della luce emessa da una sostanza], Philosophical Magazine **43** (1897) 226–239.

L'effetto messo in luce da Pieter Zeeman (1865–1943) consiste nello sdoppiamento delle righe spettrali provocato da un campo magnetico: mentre il cosiddetto effetto Zeeman normale era interpretabile anche alla luce dell'elettromagnetismo classico, quello anomalo si riferisce a doppietti di righe che si possono spiegare solo ricorrendo all'ipotesi dello spin dell'elettrone. È proprio contro l'ipotesi di un “vincolo non meccanico” che si intitola il lavoro di Uhlenbeck e Goudsmit, che Schrödinger citerà nella quarta comunicazione (cfr. n. 126 a p. 90).

ovvero

$$(18'') \quad \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi + \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V)\psi = 0.$$

Le derivazioni sono naturalmente da intendersi in riferimento all'elemento di linea (3). – Ma anche sotto le ipotesi di secondo ordine questa non è l'unica compatibile con la (6), essendo possibile la generalizzazione con la sostituzione di $\operatorname{div} \operatorname{grad} \psi$ con

$$(19) \quad f(q_k) \operatorname{div} \left(\frac{1}{f(q_k)} \operatorname{grad} \psi \right),$$

in cui f può essere un'arbitraria funzione delle q_k , che certo dovrebbe dipendere in qualche modo plausibile da E , da $V(q_k)$ e dai coefficienti dell'elemento di linea (3) (si potrebbe p. es. pensare $f = u$). La nostra ipotesi è di nuovo dettata dal proposito di semplicità, ma ciononostante non ritengo esclusa una confusione in questo caso [†].

La sostituzione di un'equazione differenziale alle *derivate parziali*, in alternativa alle equazioni fondamentali della dinamica per il problema atomico, appare ora a prima vista estremamente imbarazzante a causa dell'enorme varietà di soluzioni che appartengono a tale equazione. Già la dinamica classica aveva portato non a una varietà ristretta di soluzioni, ma a una molto vasta, cioè a un *insieme continuo*, mentre secondo ogni esperienza sembra che si possa avverare solo una quantità discontinua di queste soluzioni. Secondo l'interpretazione dominante il compito della teoria dei quanti è proprio quello di selezionare, attraverso le “condizioni di quantizzazione”, dall'insieme continuo delle traiettorie possibili secondo la meccanica classica, l'insieme discreto delle traiettorie che si verificano realmente. Sembra un inizio disastroso per un nuovo tentativo in questa direzione, se esso comincia a *elevare*, invece che a *diminuire*, il numero delle soluzioni secondo il suo ordine di grandezza trascendente.

È vero che anche il problema della dinamica classica si lascia rivestire di un'equazione alle *derivate parziali*, e cioè appunto la P.H., ma la varietà delle soluzioni del problema non corrisponde alla varietà delle soluzioni della P.H. Una qualsiasi soluzione “completa” della P.H. risolve il problema meccanico *interamente*, ogni *altra* soluzione completa produce le stesse traiettorie, solo in altra connessione con la varietà delle traiettorie.

Per quanto riguarda ora il timore esternato di fronte all'equazione (18), come fondamento della dinamica atomica, non voglio assolutamente sostenere

[†] L'introduzione di $f(q_k)$ significa che non solo la “densità”, ma anche l’“elasticità” cambia con la posizione.

che non si debbano aggiungere ulteriori condizioni per questa equazione. È presumibile però che non abbiano un carattere così totalmente estraneo e incompreso come finora le “condizioni quantiche”, ma siano dello stesso tipo cui siamo abituati in fisica di fronte a un’equazione differenziale alle derivate parziali: cioè come condizioni iniziali o al contorno. E non saranno anche in alcun modo *analoghe* alle condizioni quantiche, perché in tutti i casi della dinamica che ho studiato finora si dimostra che l’equazione (18) *include le condizioni quantiche*. Essa seleziona *spontaneamente* in certi casi, e precisamente in quelli in cui l’esperienza parla a loro favore, certe frequenze o livelli di energia come quelli soli possibili per processi stazionari, senza altre ipotesi aggiuntive oltre alla pretesa sulla funzione ψ , quasi ovvia per una grandezza fisica: la ψ deve essere una funzione univoca, finita e continua nell’intero spazio delle configurazioni.

Il timore esternato si trasforma dunque nel suo opposto, il che riguarda in ogni caso i livelli di energia o, diciamo con maggiore cautela, le frequenze. (Ciò che significa “energia delle vibrazioni” è una domanda di per sé e non bisogna dimenticare che proprio solo in un problema a un corpo si tratta di qualche cosa che permette immediatamente l’interpretazione come vibrazioni nello spazio tridimensionale reale.) La definizione dei livelli quantici *non risulta più* da due tappe intrinsecamente separate: 1. definizione di tutte le traiettorie dinamicamente possibili; 2. *rigetto* della stragrande parte delle soluzioni ottenute con 1. e selezione di alcune poche mediante requisiti speciali; piuttosto i livelli quantici sono definiti *in una sola volta* come gli *autovalori dell’equazione (18)*, che *include le sue condizioni al contorno*.

Come si possa raggiungere in questo modo una facilitazione analitica nei casi complicati, sfugge per ora alla mia valutazione. Però vorrei fare questa congettura. La maggior parte degli analisti hanno certo la sensazione che, nello stadio 1 del procedimento a tappe descritto sopra, la soluzione di un problema complicato deve essere effettuata come se richiedesse veramente come risultato finale l’energia in funzione, per lo più razionale molto semplice, dei numeri quantici. Già l’applicazione del metodo di Hamilton–Jacobi è noto che porta una grossa semplificazione perché aggira l’esecuzione reale del calcolo della soluzione meccanica. Basta valutare gli integrali che rappresentano gli impulsi solo lungo un cammino di integrazione chiuso nel piano complesso, invece che con un limite superiore variabile, e ciò richiede una fatica molto minore. Tuttavia la soluzione completa della P.H. deve essere nota, cioè rappresentata da quadrature, e quindi si deve effettuare l’integrazione del problema meccanico in linea di principio per valori iniziali qualsiasi. – Certo in pratica nella ricerca degli autovalori di un’equazione differenziale si procede per lo più ricercando dapprima la soluzione senza riguardo alle condizioni al contorno o di continuità, cogliendo dall’aspetto della soluzione quei valori dei parametri per cui la soluzione soddisfa alle dette condizioni. Un esempio di ciò è dato dalla nostra prima comunicazione. Però anche in questo esempio si riconosce – cosa

che è tipica per un problema agli autovalori – che la soluzione, che *in generale* era stata data in una forma analitica solo molto difficilmente accessibile (eq. (12), *loc. cit.*), si semplifica in modo completamente straordinario per gli autovalori che appartengono alle “condizioni al contorno naturali”. Non sono abbastanza informato al riguardo se siano già stati elaborati metodi *diretti* per il calcolo degli autovalori. È noto che ciò è stato fatto nel caso della distribuzione degli autovalori di *ordine superiore*. Ma questo caso limite *non* interessa proprio qui, perché corrisponde alla meccanica classica macroscopica. Per la spettroscopia e la fisica atomica sono interessanti in generale i *primi 5* o *10* autovalori, già *il primo da solo* sarebbe un grosso successo in quanto definisce la *tensione di ionizzazione*. Nella formulazione delineata in modo preciso che si può dare di ogni problema agli autovalori, come problema di massimo–minimo senza diretta relazione all’equazione differenziale, mi sembra molto verosimile che si possano trovare metodi diretti per un calcolo almeno approssimato degli autovalori non appena ne esiste l’esigenza *pressante*. Almeno dovrebbe essere possibile studiare in singoli casi se risolvono o no il problema gli autovalori *noti* numericamente dalla spettroscopia con ogni precisione augurabile.

A questo punto non vorrei sorvolare in silenzio il fatto che attualmente da parte di Heisenberg, Born, Jordan e alcuni altri eminenti ricercatori † è in corso il tentativo di rimuovere la difficoltà quantistica, con la dimostrazione di un così considerevole successo che diventa difficile avere dubbi sul fatto che esso contenga in ogni caso una parte di verità⁹⁶. Come *linea di tendenza*, il tentativo di Heisenberg è straordinariamente vicino a quello presente e di ciò abbiamo già detto sopra. Nel metodo è così *toto genere* diverso che non mi è riuscito finora trovare il legame⁹⁷. Nutro la ben precisa speranza che questi

† W. Heisenberg, *Ztschr. f. Phys.* **33**, p. 879, 1925; M. Born e P. Jordan, *ibid.* **34**, p. 858, 1925; M. Born, W. Heisenberg e P. Jordan, *ibid.* **35**, p. 557, 1926; P. Dirac, *Proc. Roy. Soc. London* **109**, p. 642, 1925.

⁹⁶ La meccanica delle matrici è stata avviata col lavoro di W. Heisenberg: *Über die quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen [Reinterpretazione di relazioni cinematiche e meccaniche secondo la teoria dei quanti]*, *Zeitschrift für Physik* **33** (1925) 879–893, ricevuto dalla rivista il 29 luglio 1925.

Heisenberg, dopo un seminario tenuto il giorno prima a Cambridge sull’effetto Zeeman e prima di andare in vacanza, ne parlò con Ralph Howard Fowler (1889–1944), supervisore dell’attività del giovane Dirac, lasciandogli copia del manoscritto. Mentre Dirac, venuto in possesso del manoscritto di Heisenberg, vi lavorava indipendentemente, Max Born (1882–1970) e Ernst Pascual Jordan (1902–1980) ne perfezionavano il contenuto durante le vacanze di Heisenberg, per poi arrivare alla stesura di un lavoro di collaborazione a tre.

M. Born e P. Jordan: *Zur Quantenmechanik [Meccanica quantistica]*, *Zeitschrift für Physik* **34** (1925) 858–888, ricevuto dalla rivista il 27 settembre 1925; P.A.M. Dirac: *The fundamental equations of quantum mechanics [Le equazioni fondamentali della meccanica quantistica]*, *Proceedings of the Royal Society of London* **A109** (1925) 642–653, ricevuto dalla rivista il 7 novembre 1925; M. Born, W. Heisenberg e P. Jordan: *Zur Quantenmechanik. II [Meccanica quantistica. II]*, *Zeitschrift für Physik* **35** (1926) 557–615, ricevuto dalla rivista il 16 novembre 1925.

⁹⁷ Lo troverà poco dopo: *Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen [Relazione tra la meccanica quantistica di Heisenberg-Born-Jordan]*

due tentativi non si contrastino, ma piuttosto, proprio a causa della straordinaria differenza dei punti di partenza e del metodo, si completeranno a vicenda nel senso che uno aiuterà a procedere dove l'altro fallisce. Il punto di forza del programma di Heisenberg sta nel fatto che si ripromette di dare le *intensità di riga*, una richiesta da cui finora qui ci siamo tenuti lontani ⁹⁸. Il punto di forza del presente tentativo – se mi è concesso esprimere un giudizio – sta nel punto di vista fisico conduttore che getta un ponte tra l'evento meccanico macroscopico e quello microscopico e che rende comprensibile i modi di trattazione per altro diversi che essi richiedono. Personalmente trovo un fascino particolare nell'idea, menzionata alla fine della precedente comunicazione, che le frequenze emesse siano “battimenti”, per cui io credo anche che permetterà una comprensione intuitiva delle formule di intensità.

§ 3. Esempi di applicazione.

Vogliamo ora aggiungere ancora alcuni esempi ulteriori al problema di Keplero trattato nella prima comunicazione. Sono solo quelli più semplici di tutti, in quanto per il momento ci limitiamo alla meccanica *classica* senza campo magnetico [†].

1. L'oscillatore di Planck. Il problema della degenerazione.

Trattiamo dapprima l'oscillatore monodimensionale. La coordinata q sia l'elongazione moltiplicata per la radice quadrata della massa. Le due forme dell'energia cinetica sono allora:

$$(20) \quad \overline{T} = \frac{1}{2}\dot{q}^2, \quad T = \frac{1}{2}p^2.$$

L'energia potenziale sia:

$$(21) \quad V(q) = 2\pi^2\nu_0^2 q^2,$$

e la mia], Annalen der Physik **79** (1926) 734–756, ricevuto dalla rivista il 18 marzo 1926.

⁹⁸ Nel primo lavoro di Heisenberg l'idea fondamentale era il recupero alla teoria del significato di quantità osservabili, quali le intensità delle righe spettrali, in contrasto con altre, come i raggi delle orbite elettroniche, che caratterizzavano la vecchia teoria dei quanti di Bohr e Sommerfeld, ma che non erano direttamente osservabili. Nella meccanica delle matrici le intensità delle righe derivavano direttamente dagli elementi delle matrici associate alle variabili di posizione.

[†] Nella meccanica relativistica e in relazione a un campo magnetico l'enunciazione della P.H. diventa più complicata. Nel caso di un singolo elettrone essa afferma che si mantiene costante il gradiente *tetradimensionale* dell'azione *diminuito* di un vettore assegnato (il tetrapotenziale). La traduzione nella teoria ondulatoria di questo enunciato presenta notevoli difficoltà.

dove ν_0 è l'autofrequenza nel senso della meccanica. Allora l'equazione (18) diventa in questo caso:

$$(22) \quad \frac{d^2\psi}{dq^2} + \frac{8\pi^2}{h^2}(E - 2\pi^2\nu_0^2q^2)\psi = 0.$$

Per brevità, siano

$$(23) \quad a = \frac{8\pi^2 E}{h^2}, \quad b = \frac{16\pi^4\nu_0^2}{h^2},$$

per cui

$$(22') \quad \frac{d^2\psi}{dq^2} + (a - bq^2)\psi = 0.$$

Introduciamo la variabile indipendente

$$(24) \quad x = q\sqrt[4]{b}$$

e otteniamo

$$(22'') \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \left(\frac{a}{\sqrt{b}} - x^2\right)\psi = 0.$$

Gli autovalori e le autofunzioni di questa equazione sono *noti* ^{† 99}. Nelle notazioni usate qui gli autovalori sono:

$$(25) \quad \frac{a}{\sqrt{b}} = 1, 3, 5 \dots (2n + 1) \dots$$

[†] Cfr. Courant–Hilbert, *Methoden der mathematischen Physik I* (Berlino, Springer, 1924) V, § 9, p. 261, eq. 43, inoltre II, § 10, 4, p. 76.

⁹⁹ La citata equazione (43) del testo di Courant e Hilbert è la seguente:

$$y'' + (1 - x^2)y + \lambda y = 0,$$

che ammette come soluzione le funzioni ortogonali di Hermite (26), con autovalori $\lambda = 0, 2, 4, \dots$. Il capitolo V del primo volume del testo citato è interamente dedicato ai problemi agli autovalori della fisica matematica, mentre i polinomi di Hermite, di cui Schrödinger ricorda qui solo gli aspetti più utili per il seguito, sono discussi nel capitolo II a p. 76.

Le autofunzioni sono le *funzioni ortogonali di Hermite*:

$$(26) \quad e^{-x^2/2} H_n(x).$$

$H_n(x)$ indica il polinomio di Hermite di ordine n che può essere definito come:

$$(27) \quad H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n e^{-x^2}}{dx^n}$$

oppure esplicitamente:

$$(27') \quad H_n(x) = (2x)^n - \frac{n(n-1)}{1!} (2x)^{n-2} + \frac{n(n-1)(n-2)(n-3)}{2!} (2x)^{n-4} - \dots$$

I primi polinomi di questo tipo sono:

$$(27'') \quad \begin{aligned} H_0(x) &= 1, & H_1(x) &= 2x, \\ H_2(x) &= 4x^2 - 2, & H_3(x) &= 8x^3 - 12x, \\ H_4(x) &= 16x^4 - 48x^2 + 12, \dots \end{aligned}$$

Consideriamo dapprima gli autovalori; dalla (25) e dalla (23) si ottiene:

$$(25') \quad E_n = \frac{2n+1}{2} h\nu_0; \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

Come livelli quantistici compaiono quindi i cosiddetti multipli “seminteri” dei “quanti di energia” caratteristici dell’oscillatore, cioè i multipli *dispari* di $h\nu_0/2$. La spaziatura dei livelli, che è la sola cosa importante per la radiazione, è la stessa della teoria proposta finora ¹⁰⁰. Strano a dirsi, i nostri livelli quantici sono *esattamente* gli stessi della teoria di Heisenberg! – Per la teoria del *calore specifico* questa differenza con la teoria proposta finora non è senza significato; essa infatti entra in gioco solo quando la frequenza propria ν_0 *varia* in conseguenza della dilatazione termica. Formalmente si tratta del vecchio problema dell’“energia di punto zero” che si era già verificato in connessione

¹⁰⁰ Però adesso il valore di energia più basso non è zero! E ciò succedeva anche nell’approccio di Heisenberg: è quella che tra poco Schrödinger chiama “energia di punto zero”.

con il dilemma: prima o seconda trattazione della teoria di Planck ¹⁰¹. – Il termine aggiuntivo $h\nu_0/2$ influenza anche la legge dei bordi di banda ¹⁰².

Se si introducono di nuovo le quantità originali q secondo la (24) e la (23), le *autofunzioni* (26) diventano:

$$(26') \quad \psi_n(q) = e^{-2\pi^2\nu_0q^2/h} H_n\left(2\pi q\sqrt{\frac{\nu_0}{h}}\right).$$

L'esame della (27'') insegna che la prima autofunzione è una “curva degli errori gaussiana”, la seconda si azzerava nell'origine e corrisponde per x positive a una “distribuzione maxwelliana delle velocità” in due dimensioni, che viene proseguita dispari per x negative. La terza autofunzione è di nuovo pari, negativa nell'origine e ha due punti di zero simmetrici in $\pm 1/\sqrt{2}$; ecc. Si può facilmente abbracciare con lo sguardo e delineare l'andamento qualitativo, pur di fare attenzione al fatto che le radici dei polinomi successivi si separano l'un l'altra. Si riconosce dalla (26') che i punti caratteristici delle autofunzioni, come la larghezza a mezza altezza (per $n = 0$), i punti di zero, i massimi, si trovano come ordine di grandezza nel dominio delle vibrazioni classiche dell'oscillatore. Infatti per l'ampiezza classica della n -esima vibrazione si trova facilmente ¹⁰³:

$$(28) \quad q_n = \frac{\sqrt{E_n}}{2\pi\nu_0} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{h}{\nu_0}} \sqrt{\frac{2n+1}{2}}.$$

Però, per quanto posso vedere, in generale non viene attribuito alcun significato specifico al valore *esatto* dell'ascissa del *punto di inversione* classico. Lo si potrebbe lo stesso supporre, in quanto i punti di inversione per l'onda nello spazio delle fasi hanno il significato che il quadrato della velocità di propagazione lì diventa *infinito* e a maggiore distanza *negativo* ¹⁰⁴. Nell'equazione differenziale (22) però questo significa solo l'azzerarsi del coefficiente di ψ senza permettere affatto alcuna singolarità.

Non vorrei qui evitare di menzionare l'osservazione che, del tutto in generale, e non semplicemente per l'oscillatore, vale il fatto che tuttavia questo

¹⁰¹ L'energia di punto zero era stata introdotta da M. Planck: *Eine neue Strahlungshypothese [Una nuova ipotesi sulla radiazione]*, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **13** (1911) 138–148.

¹⁰² Come la dilatazione termica, introducendo termini non lineari nello spettro di frequenze del solido, altera anche l'energia di punto zero, così Schrödinger ritiene che anche la formula di Balmer possa essere influenzata da termini aggiuntivi nella hamiltoniana atomica.

¹⁰³ In realtà q_n rappresenta classicamente l'ampiezza della vibrazione raggiunta quando l'energia è tutta potenziale e il moto di oscillazione inverte la sua velocità. Perciò, identificando tale energia $V(q)$ con E_n , si dovrebbe avere piuttosto: $q_n = \sqrt{2E_n}/(2\pi\nu_0)$.

¹⁰⁴ Cfr. eq. (6'), in cui $h\nu$ è ora l'energia E_n dell'oscillatore.

azzersarsi e diventare immaginaria della velocità di propagazione è qualche cosa di molto caratteristico. Esso è il fondamento analitico della scelta di precisi autovalori mediante la semplice condizione di finitezza della funzione. Vorrei spiegare questo fatto più dettagliatamente. Un'equazione d'onda con velocità di propagazione *reale* significa notoriamente questo: il valore della funzione viene *accelerato* nel corso del tempo in misura crescente quando si trova ad essere *inferiore* alla media dei valori della funzione in un intorno del punto considerato, e viceversa. Anche se non istantaneamente e continuamente, come l'*equazione di conduzione del calore*, una tale equazione nel corso del tempo ha perciò per effetto un riequilibrio delle oscillazioni estreme e non permette una crescita smisurata della funzione in nessun punto. – Un'equazione d'onda con velocità di propagazione *immaginaria* significa ora l'esatto contrario: valori della funzione che si trovano al di sopra della media dell'intorno vengono *accelerati* (o anche non più rallentati) e viceversa. Si capisce quindi che una funzione, inserita in una tale equazione, incappa nel massimo pericolo di crescere oltre ogni limite. Bisogna molto abilmente fare in modo di proteggersi da questo pericolo e l'istituto che consente ciò sono appunto gli autovalori specificati in questo modo preciso. Infatti si può anche vedere nell'esempio trattato nella prima comunicazione che il requisito di autovalori discreti cessa di esistere nel momento in cui si sceglie *positivo* il valore locale di E , cosa per cui la velocità dell'onda diventa reale in tutto lo spazio ¹⁰⁵.

Dopo questa digressione torniamo all'oscillatore e chiediamoci se cambia qualche cosa se diamo due o più gradi di libertà all'oscillatore (oscillatore spaziale, corpo solido). Se alle singole coordinate appartengono *diverse* autofrequenze meccaniche (valori di ν_0), non cambia niente. Si ponga ψ come prodotto di funzioni, ciascuna di una coordinata, e il problema si spezza in tanti problemi singoli del tipo trattato sopra, quante sono le coordinate in gioco. Le autofunzioni sono un prodotto di funzioni ortogonali di Hermite, gli autovalori del problema complessivo sono proprio la somma degli autovalori dei singoli problemi, in tutte le combinazioni possibili. Nessun autovalore (del sistema complessivo) diventa molteplice, se si presuppone che non esista alcuna relazione razionale tra i valori di ν_0 .

In quest'ultimo caso invece è ancora possibile lo stesso tipo di trattazione, ma sicuramente non è l'*unico*. Intervengono autovalori ripetuti più volte e la "separazione" può essere sicuramente effettuata anche in altre coordinate, per esempio nel caso dell'oscillatore spaziale isotropo in coordinate polari †. Gli

¹⁰⁵ Schrödinger, senza dirlo esplicitamente, ha intuito qui la necessità di soluzioni a quadrato sommabile per il caso dello spettro discreto degli autovalori.

† Con ciò si è ricondotti a un'equazione in r che può essere trattata in tutto e per tutto con lo stesso metodo che è stato applicato nella prima comunicazione al problema di Keplero. Anche l'oscillatore *monodimensionale* del resto porta alla stessa equazione se si introduce q^2 come variabile. Originariamente avevo risolto il problema in *questo* modo. Ringrazio E. Fues per l'osservazione che si tratta dell'equazione differenziale dei polinomi di Hermite.

autovalori che si ottengono sono però sicuramente in ogni caso gli stessi, almeno fintanto che si è in possesso della “prova di completezza” per il sistema di autofunzioni ottenuto in *uno* dei procedimenti. Si riconosce in tutto ciò il perfetto parallelo delle ben note relazioni in cui si imbattono nel caso di *degenerazione* le condizioni quantiche utilizzate finora. Solo in un punto c’è una spiacevole differenza formale. Se si applicassero le condizioni di quantizzazione di Sommerfeld–Epstein *senza* riguardo a un’eventuale degenerazione, è noto che si otterrebbero sempre gli stessi livelli energetici, ma per quanto riguarda le traiettorie trascurate si arriverebbe ad affermazioni diverse a seconda della scelta delle coordinate. Ora qui *non* è il caso. Ma certamente si arriva a un sistema di *autofunzioni* completamente diverso se si tratta per esempio il problema vibrazionale corrispondente al moto kepleriano imperturbato in coordinate *paraboliche* invece che in coordinate polari, come abbiamo fatto nella prima comunicazione. Ma come *stato di vibrazione possibile* non deve valere precisamente *la singola vibrazione propria*, ma una loro *combinazione lineare* qualsiasi, finita o infinita. E come tali si possono sempre rappresentare le autofunzioni trovate con una seconda strada, cioè come combinazione lineari delle autofunzioni trovate con una strada qualsiasi, purché queste costituiscano un sistema *completo*.

Certamente non si può continuamente girare intorno alla domanda che finora qui non è stata ancora accolta, di come cioè in un determinato caso l’energia si distribuisca in realtà sulle vibrazioni proprie. Con riferimento alla teoria dei quanti in vigore finora, verrà negata la possibilità di assumere che solo l’energia del complesso di autovibrazioni appartenenti a un determinato autovalore debba avere nel caso degenerare un certo prescritto ammontare, che nel caso non degenerare appartiene appunto a una sola autovibrazione. Vorrei per il momento lasciare questa domanda completamente aperta – anche *nel* punto se in generale i “livelli energetici” trovati siano realmente salti energetici dei *processi vibratorii* oppure abbiano solo il significato di una frequenza. Per la realizzazione delle frequenze di emissione discrete, se si assume la teoria dei battimenti, non è più necessario il significato di livello energetico.

2. Il rotatore con asse fisso nello spazio.

Per l’assenza dell’energia potenziale nell’elemento di linea *euclideo* a tempi uguali, questo costituisce l’esempio in generale più facilmente immaginabile per la teoria vibrazionale. Sia A il momento d’inerzia, ϕ l’angolo di rotazione, allora chiaramente si ottiene per l’equazione vibrazionale:

$$(29) \quad \frac{1}{A} \frac{d^2 \psi}{d\phi^2} + \frac{8\pi^2 E}{h^2} \psi = 0.$$

– Il polinomio che interviene nel problema di Keplero (eq. (18) della prima comunicazione) è la derivata $(2n + 1)$ -esima del polinomio di Laguerre di ordine $n + l$, come riconobbi più tardi.

La sua soluzione è:

$$(30) \quad \psi = \frac{\sin \left[\sqrt{\frac{8\pi^2 EA}{h^2}} \cdot \phi \right]}{\cos \left[\sqrt{\frac{8\pi^2 EA}{h^2}} \cdot \phi \right]}.$$

Ora l'argomento deve essere qui un multiplo *intero* di ϕ , per il semplice motivo che altrimenti ψ nel dominio della coordinata ϕ non sarebbe né a un valore né a un valore continuo, in quanto $\phi + 2\pi$ significa la stessa ϕ . Questa condizione fornisce il risultato ben noto:

$$(31) \quad E_n = \frac{n^2 h^2}{8\pi^2 A},$$

in *completo* accordo con la quantizzazione usata finora.

Al risultato tuttavia non viene attribuito *alcun* significato per l'applicazione agli spettri a bande, in quanto verremo subito a conoscenza del fatto caratteristico che la nostra teoria per il rotatore con asse *libero* fornisce un *altro* risultato. *E ciò vale in generale*. Nell'applicazione della meccanica ondulatoria non è permesso pensare, per semplicità di calcolo, alla libertà di moto del sistema in modo più limitato di quanto *lo sia* realmente, anche se sulla base dell'integrale delle equazioni meccaniche si sa che il sistema non fa uso di un determinato grado di libertà in un singolo movimento. Il sistema delle equazioni fondamentali non è appunto assolutamente più appropriato per la micromeccanica e le singole traiettorie di cui esso parla non vi hanno alcuna esistenza particolare. Il processo ondulatorio riempie l'*intero* spazio delle fasi. Che per un processo ondulatorio perfino già il *numero* delle dimensioni in cui esso si svolge sia in qualche modo molto sostanziale, è un fatto ben noto.

3. Il rotatore rigido con asse libero.

Introducendo come coordinate gli angoli polari della retta congiungente i due nuclei ¹⁰⁶, θ , ϕ , l'energia cinetica in funzione dell'impulso risulta:

$$(32) \quad T = \frac{1}{2A} \left(p_\theta^2 + \frac{p_\phi^2}{\sin^2 \theta} \right).$$

Per l'aspetto che ha, questa è l'energia cinetica di una massa puntiforme vincolata a una superficie sferica. L'operatore di Laplace è perciò semplicemente

¹⁰⁶ Schrödinger ha in mente la molecola biatomica che tratterà al numero successivo; qui la molecola è pensata inizialmente come un manubrio rigido in rotazione intorno al proprio asse orientato liberamente nello spazio.

la parte dipendente dagli angoli polari dell'operatore di Laplace spaziale e l'equazione vibrazionale (18'') acquista la forma seguente:

$$(33) \quad \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} + \frac{8\pi^2 AE}{h^2} \psi = 0.$$

Il requisito che ψ debba essere a un valore e continua sulla superficie sferica porta notoriamente alla condizione per gli autovalori:

$$(34) \quad \frac{8\pi^2 A}{h^2} E = n(n+1); \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Le autofunzioni è noto che sono le funzioni sferiche di superficie. – I livelli energetici sono perciò:

$$(34') \quad E_n = \frac{n(n+1)h^2}{8\pi^2 A}; \quad n = 0, 1, 2, 3 \dots$$

Questa determinazione differisce da tutte le precedenti (eccetto forse quella di Heisenberg?). Tuttavia dall'esperimento si era stati indotti ad inserire per n nella formula (31) valori "seminteri" sulla base di diverse motivazioni¹⁰⁷. Si riconosce che la formula (34') in pratica dà lo stesso risultato della (31) con n semintero, in quanto è proprio:

$$n(n+1) = \left(n + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4}.$$

La differenza sta dunque semplicemente in una piccola costante aggiuntiva, mentre le *differenze* tra i livelli nella (34') sono le stesse della "quantizzazione

¹⁰⁷ Fin dal 1920 Heisenberg, quale allievo di Sommerfeld a Monaco, aveva intravisto la necessità di introdurre numeri quantici seminteri per la trattazione dell'effetto Zeeman anomalo, ma, dato lo sconcerto che tale idea provocava in Sommerfeld, riuscì a pubblicare i suoi risultati (e il suo primo lavoro scientifico) solo dopo la comparsa dei lavori di Alfred Landé (1888–1975) e dell'altro allievo di Sommerfeld, Adolf Kratzer (n.1893). L'elettrone orbitante nell'atomo poteva essere descritto classicamente da una hamiltoniana del tipo (32) qui studiato da Schrödinger.

A. Landé: *Über den anomalen Zeemaneffekt (Teil I)* [L'effetto Zeeman anomalo (Parte I)], *Zeitschrift für Physik* **5** (1921) 231–241; *Anomaler Zeemaneffekt und Seriensysteme bei Ne und Hg* [Effetto Zeeman anomalo e sistemi di serie in Ne e Hg], *Physikalische Zeitschrift* **22** (1921) 417–422; *Über den anomalen Zeemaneffekt (Teil II)* [L'effetto Zeeman anomalo (Parte II)], *Zeitschrift für Physik* **7** (1921) 398–405.

A. Kratzer: *Störungen und Kombinationsprinzip im System der violetten Cyanbanden* [Perturbazioni e principio di combinazione nel sistema di bande nel violetto del cianogeno], *Sitzungsberichte der Bayerischen Akademie der Wissenschaften* (Monaco, 1922) 107–118.

W. Heisenberg: *Zur Quantentheorie der Linienstruktur und der anomalen Zeemaneffekte* [Teoria dei quanti della struttura a righe e dell'effetto Zeeman anomalo], *Zeitschrift für Physik* **8** (1922) 273–297.

semintera”. Ciò vale anche per l’applicazione a righe di piccola lunghezza d’onda, per le quali il momento d’inerzia è diverso a causa dei “salti elettronici” nello stato iniziale e finale, in quanto tutt’al più si aggiunge a *tutte* le righe di una banda un piccolo termine costante addizionale che si perde nel grande “termine di elettrone” o anche nel “termine di vibrazione dei nuclei”. Inoltre la nostra precedente analisi non permette assolutamente di parlare in modo ben definito di questo piccolo termine addizionale come se fosse:

$$\frac{1}{4} \frac{h^2}{8\pi^2} \left(\frac{1}{A} - \frac{1}{A'} \right).$$

La rappresentazione del momento d’inerzia fissato dalle “condizioni di quantizzazione” per i moti elettronici e le oscillazioni dei nuclei emerge dall’intero complesso di idee qui perseguite. Nel prossimo paragrafo mostreremo come si possano trattare, almeno approssimativamente, le oscillazioni dei nuclei e le rotazioni di una molecola biatomica allo stesso tempo attraverso la sintesi dei casi trattati sotto 1 e 3[†]. – Vorrei ancora menzionare il fatto che il valore $n = 0$ non corrisponde all’*azzerarsi* della funzione d’onda ψ , ma piuttosto a un suo valore *costante* e con ciò a una vibrazione con ampiezza costante dell’intera superficie sferica¹⁰⁸.

4. Il rotatore non rigido (molecola biatomica).

Secondo le osservazioni fatte alla fine del § 3.2, per sua natura dobbiamo affrontare il problema con tutti i suoi sei gradi di libertà che realmente possiede. Scegliamo dapprima le coordinate cartesiane $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2$ delle due molecole di massa m_1 e m_2 e r sia la loro distanza. L’energia potenziale sia:

$$(35) \quad \begin{aligned} V &= 2\pi^2 \nu_0^2 \mu (r - r_0)^2; \\ r &= \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2}. \end{aligned}$$

Qui

$$(36) \quad \mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$$

è la “massa ridotta”. Allora ν_0 è l’autofrequenza meccanica dell’oscillazione dei nuclei lungo l’asse di congiunzione dei nuclei stessi e r_0 è la distanza alla quale l’energia potenziale è minima. Tutto ciò è immaginato nel senso dell’ordinaria meccanica.

[†] Cfr. A. Sommerfeld, *Atombau und Spektrallinien*, 4. ed., p. 833. Qui non prendiamo ancora in considerazione i termini addizionali anarmonici nell’energia potenziale.

¹⁰⁸ L’armonica sferica di ordine zero, Y_{00} , ha il valore costante $1/\sqrt{4\pi}$.

Per l'equazione d'onda (18'') si ottiene la seguente espressione:

$$(37) \quad \frac{1}{m_1} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_1^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_1^2} \right) + \frac{1}{m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z_2^2} \right) + \frac{8\pi^2}{h^2} [E - 2\pi^2 \nu_0^2 \mu (r - r_0)^2] \psi = 0.$$

Introduciamo come nuove variabili indipendenti $x, y, z, \xi, \eta, \zeta$:

$$(38) \quad \begin{aligned} x &= x_1 - x_2, & (m_1 + m_2)\xi &= m_1 x_1 + m_2 x_2, \\ y &= y_1 - y_2, & (m_1 + m_2)\eta &= m_1 y_1 + m_2 y_2, \\ z &= z_1 - z_2, & (m_1 + m_2)\zeta &= m_1 z_1 + m_2 z_2. \end{aligned}$$

La trasformazione produce:

$$(37') \quad \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + \frac{1}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \zeta^2} \right) + [a'' - b'(r - r_0)^2] \psi = 0,$$

dove per brevità

$$(29) \quad a'' = \frac{8\pi^2 E}{h^2}, \quad b' = \frac{16\pi^4 \nu_0^2 \mu}{h^2}.$$

Ora possiamo sostituire a ψ il prodotto di una funzione delle coordinate relative x, y, z con una funzione delle coordinate del baricentro ξ, η, ζ :

$$(40) \quad \psi = f(x, y, z)g(\xi, \eta, \zeta).$$

Per g si ottiene l'equazione di definizione:

$$(41) \quad \frac{1}{m_1 + m_2} \left(\frac{\partial^2 g}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial \eta^2} + \frac{\partial^2 g}{\partial \zeta^2} \right) + \text{cost} \cdot g = 0.$$

Questa è della stessa forma che si sarebbe ottenuta per il moto libero di una massa puntiforme di massa $m_1 + m_2$. Alla costante in questo caso verrebbe dato il significato:

$$(42) \quad \text{cost} = \frac{8\pi^2 E_t}{h^2},$$

dove E_t è l'energia traslazionale della detta massa puntiforme. Pensiamo di introdurre questo valore nella (41). Quali valori di E_t siano consentiti come autovalori dipende ora dal fatto se alle coordinate originali, e quindi anche a quelle del baricentro, è a disposizione oppure no l'intero spazio infinito, senza che compaiano nuovi termini di energia potenziale. Nel primo caso ogni valore non negativo è consentito, mentre ogni valore negativo non lo è, in quanto, se e *solo* se E_t è non negativa, la (41) possiede soluzioni che non si azzerano identicamente e pure restano finite sull'intero spazio. Ma se la molecola si trova in una "scatola", allora questa va considerata una condizione al contorno per la funzione g , o detto in modo conseguente: alla parete della scatola, a causa dell'instaurarsi di un'ulteriore energia potenziale, l'equazione (41) modificherà in modo molto discontinuo la sua forma. Con ciò viene selezionato un insieme discreto di valori E_t . Si tratta della "quantizzazione del moto di traslazione", di cui ho già parlato e mostrato recentemente i caratteri principali che portano alla teoria dei gas di Einstein ^{† 109}.

Per il fattore f della funzione vibrazionale ψ che dipende dalle coordinate relative x, y, z si ottiene ora l'equazione di definizione:

$$(43) \quad \frac{1}{\mu} \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2} \right) + [a' - b'(r - r_0)^2] f = 0,$$

dove per brevità

$$(39') \quad a' = \frac{8\pi^2(E - E_t)}{h^2}.$$

Introduciamo ora per x, y, z le coordinate polari r, θ, ϕ (cosa che è in sintonia con l'uso precedente del simbolo r). Moltiplicando per μ si ottiene:

$$(43') \quad \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left\{ \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right\} + [\mu a' - \mu b'(r - r_0)^2] f = 0.$$

[†] Physik. Ztschr. **27**, p. 95, 1926.

¹⁰⁹ Cfr. n. 72 a p. 39. Nel lavoro citato, nel ritrovare i risultati di Einstein per il gas perfetto, Schrödinger sostituisce le particelle del gas con onde di fase alla de Broglie: confinando il gas in un volume cubico finito, calcola i livelli energetici del gas dal computo delle autofrequenze delle onde stazionarie realizzabili nel cubo.

Nuova separazione di f . Il fattore dipendente dagli angoli polari è una funzione sferica di superficie. Di ordine n . La parentesi graffa è $-n(n+1)f$. Pensiamo di inserire ciò, lasciando stare per semplicità il simbolo f per il fattore che dipende da r . Quindi viene introdotta come nuova variabile *dipendente*:

$$(44) \quad \chi = r f$$

e quindi come nuova variabile *indipendente*:

$$(45) \quad \rho = r - r_0.$$

La trasformazione fornisce:

$$(46) \quad \frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho^2} + \left[\mu a' - \mu b' \rho^2 - \frac{n(n+1)}{(r_0 + \rho)^2} \right] \chi = 0.$$

Fin qui il calcolo si può fare in modo rigoroso. Ora facciamo l'approssimazione che, lo so bene, richiederebbe una giustificazione più rigorosa di quella che darò qui. Confrontiamo la (46) con l'equazione (22') trattata prima, che concorda in struttura, differenziandosi solo nel coefficiente della funzione incognita per un termine dell'ordine di grandezza relativo di ρ/r_0 . Lo si vede se si sviluppa:

$$(47) \quad \frac{n(n+1)}{(r_0 + \rho)^2} = \frac{n(n+1)}{r_0^2} \left(1 - \frac{2\rho}{r_0} + \frac{3\rho^2}{r_0^2} - \dots \right),$$

lo si inserisce nella (46), si ordina secondo le potenze di ρ/r_0 e si introduce per ρ la variabile, diversa solo per una costante:

$$(48) \quad \rho' = \rho - \frac{n(n+1)}{r_0^3 \left(\mu b' + \frac{3n(n+1)}{r_0^4} \right)}.$$

L'equazione (46) assume allora la forma:

$$(46') \quad \frac{\partial^2 \chi}{\partial \rho'^2} + \left(a - b \rho'^2 + \left[\frac{\rho'}{r_0} \right] \right) \chi = 0,$$

con le abbreviazioni

$$(49) \quad \begin{aligned} a &= \mu a' - \frac{n(n+1)}{r_0^2} \left(1 - \frac{n(n+1)}{r_0^4 \mu b' + 3n(n+1)} \right) \\ b &= \mu b' + \frac{3n(n+1)}{r_0^4}. \end{aligned}$$

Il simbolo $[\rho'/r_0]$ nella (46') indica termini che sono piccoli, dell'ordine di ρ'/r_0 , rispetto al termine più piccolo già preso in considerazione.

Ora noi sappiamo dall'equazione (22'), con cui adesso confrontiamo la (46'), che le sue *prime* autofunzioni sono sensibilmente diverse da zero solo in un piccolo dominio intorno all'origine. Solo per numeri d'ordine crescenti si estendono a poco a poco più in là. Per numeri d'ordine modesti il dominio per l'equazione (46') è di fatto piccolo rispetto a r_0 , se vi si trascura il termine $[\rho'/r_0]$ e si inserisce l'ordine di grandezza delle costanti molecolari. Da ciò traiamo la conclusione, lo ripeto, che in questo modo si ottiene un'utile approssimazione per le prime autofunzioni all'interno del dominio in cui sono in generale sensibilmente diverse da zero, e anche per i primi *autovalori*. Con un facile conto, in cui di nuovo si usano le abbreviazioni (49), (39') e (39) e si introduce la piccola quantità:

$$(50) \quad \epsilon = \frac{n(n+1)h^2}{16\pi^4\nu_0^2\mu^2r_0^4} = \frac{n(n+1)h^2}{16\pi^4\nu_0^2A^2},$$

dalla precedente condizione (25) per gli autovalori si derivano i seguenti *livelli d'energia*:

$$(51) \quad \begin{aligned} E &= E_t + \frac{n(n+1)h^2}{8\pi^2A} \left(1 - \frac{\epsilon}{1+3\epsilon} \right) + \frac{2l+1}{2} h\nu_0 \sqrt{1+3\epsilon} \\ &(n = 0, 1, 2 \dots; \quad l = 0, 1, 2 \dots), \end{aligned}$$

dove ancora si è scritto

$$(52) \quad A = \mu r_0^2$$

per il *momento d'inerzia*.

Nel linguaggio della meccanica classica, ϵ è il quadrato del rapporto della frequenza di rotazione con la frequenza ν_0 di vibrazione; nell'applicazione alla molecola perciò è realmente una quantità piccola e la formula (51) ha la solita struttura, a parte questa piccola correzione e le discrepanze accennate prima. Essa è la sintesi della (25') e della (34'), in cui E_t interviene

ancora in rappresentanza dell'energia traslazionale. È da rilevare che la bontà dell'approssimazione non va giudicata solo dalla piccolezza di ϵ : anche l non deve essere troppo grande. Però *in pratica* per l vengono presi in considerazione solo valori piccoli.

Le correzioni in ϵ nella (51) *non* riguardano *ancora* la deviazione delle oscillazioni tra i nuclei dal tipo puramente armonico. Perciò un confronto con la formula di Kratzer (v. Sommerfeld, *loc. cit.*) e con l'esperienza è ancora inattuabile ¹¹⁰. Ho voluto per il momento portare il caso solo come esempio del fatto e del modo in cui il concetto intuitivo della *configurazione di eguale peso* del sistema dei nuclei conservi il suo significato nella meccanica ondulatoria, mentre l'ampiezza dell'onda ψ in pratica è diversa da zero solo in una piccola regione della configurazione di uguale peso. La diretta interpretazione di questa funzione d'onda, dipendente da *sei* variabili nello spazio *tridimensionale*, certamente si scontra proprio con difficoltà di natura concettuale.

Al problema delle oscillazioni di rotazione delle molecole biatomiche, prendendo *in considerazione* i termini anarmonici nell'energia di legame, si tornerà prossimamente ¹¹¹. L'ipotesi di Kratzer, scelta con grande fortuna per la trattazione in meccanica classica, è adatta anche per la meccanica ondulatoria. Però, per spingere il conto fino a dove è necessario per la struttura fine delle bande, si deve fare uso della teoria delle *perturbazioni degli autovalori e delle autofunzioni*, cioè della variazione che subiscono un determinato autovalore e le autofunzioni di un'equazione differenziale che vi appartengono, se si in-

¹¹⁰ A. Kratzer: *Die ultraroten Rotationsbanden der Halogenwasserstoffe [Le bande di rotazione nell'infrarosso della molecola d'idrogeno]*, Zeitschrift für Physik **3** (1920) 289–307.

In questo lavoro Kratzer aveva considerato classicamente il moto della molecola biatomica, in cui i due ioni interagiscono con un'attrazione coulombiana e una repulsione inversamente proporzionale alla loro distanza e oscillano secondo un potenziale anarmonico. Nell'energia potenziale veniva anche introdotto un termine costante, in modo da azzerarla per distanze relative infinite e tenere conto dell'energia di dissociazione della molecola. In questo modo la formula di Kratzer era in buon accordo con i dati sperimentali.

¹¹¹ Stimolato dallo stesso Schrödinger, sarà Erwin Fues (n. 1893), in quegli anni anche lui a Zurigo e già ricordato da Schrödinger per avergli attirato l'attenzione sui polinomi di Hermite (cfr. n. † a p. 72), a presentare la prima applicazione delle nuove idee della meccanica ondulatoria. Fues riprende esattamente la trattazione di Schrödinger per il rotatore non rigido, inserendo nella (43) l'energia potenziale del modello classico di Kratzer. Per piccole vibrazioni dei due ioni della molecola biatomica Fues ritrova il risultato di Kratzer, salvo che deve sostituire numeri quantici seminteri a quelli interi di Kratzer. Risultati simili erano stati ottenuti a Göttingen un mese prima, sulla base della meccanica delle matrici, dall'unica donna che in quegli anni partecipa agli studi per una nuova meccanica, Lucie Mensing (n. 1901).

E. Fues: *Das Eigenschwingungsspektrum zweiatomiger Moleküle in der Undulationsmechanik [Lo spettro delle vibrazioni proprie di molecole biatomiche nella meccanica ondulatoria]*, Annalen der Physik **80** (1926) 367–396, ricevuto dalla rivista il 27 aprile 1926.

L. Mensing: *Die Rotations-Schwingungsbanden nach der Quantenmechanik [Le bande di rotazione-vibrazione secondo la meccanica quantistica]*, Zeitschrift für Physik **36** (1926) 814–823, ricevuto dalla rivista il 29 marzo 1926.

troduce nell'equazione differenziale un piccolo "termine di perturbazione" nel coefficiente della funzione incognita ¹¹². Questa "teoria delle perturbazioni" è l'esatto compagno di quello della meccanica classica: solo è più semplice per il motivo che nella meccanica ondulatoria ci muoviamo interamente nel campo delle relazioni *lineari*. In prima approssimazione vale l'enunciato che la perturbazione dell'autovalore è uguale al termine di perturbazione mediato "sul moto imperturbato".

La teoria delle perturbazioni amplia l'applicabilità analitica della nuova teoria in modo straordinario. Come risultato pratico importante vorrei qui riportare già il fatto che l'*effetto Stark* del primo ordine ¹¹³ viene a trovarsi davvero in perfetto accordo con la formula di Epstein che è divenuta intoccabile grazie alla conferma sperimentale.

Zurigo, Istituto di Fisica dell'Università.

¹¹² Sarà questo infatti l'argomento della sua terza comunicazione con lo stesso titolo, che la rivista riceverà solo il 10 maggio, perché prima Schrödinger si deve occupare dell'equivalenza tra la sua meccanica e quella di Heisenberg, Born e Jordan. È però chiaro dalle prossime righe che Schrödinger sapeva già che cosa dire in questa terza comunicazione.

¹¹³ L'effetto, prodotto sulle righe spettrali dall'applicazione di un campo elettrico e messo in luce da Johannes Stark (1874–1957) (*Beobachtung über den Effekt des elektrischen Feldes auf Spektrallinien [Osservazione dell'effetto del campo elettrico sulle righe spettrali]*, Sitzungsberichte der Preussischen Akademie der Wissenschaften (Berlin) (1913) 932–946; *Annalen der Physik* **43** (1914) 965–982) e da Antonino Lo Surdo (1880–1949) (*Sul fenomeno analogo a quello di Zeeman nel campo elettrico*, Atti della Reale Accademia dei Lincei **22** (1913) 664–666), veniva riprodotto da una formula che Epstein aveva ricavato sulla base della vecchia teoria dei quanti (*Zur Theorie des Starkeffektes [Teoria dell'effetto Stark]*, *Physikalische Zeitschrift* **17** (1916) 148–150; *Annalen der Physik* **50** (1916) 489–521). Il fatto che nella sua terza comunicazione Schrödinger fosse in grado di ritrovare in modo naturale questa formula costituì un grandissimo successo della meccanica ondulatoria che, unito alla provata equivalenza con la meccanica delle matrici, convinse il mondo scientifico della sua validità.

Quantizzazione come problema agli autovalori [†]
(terza [#] comunicazione: teoria delle perturbazioni, con applicazione
all'effetto Stark delle righe di Balmer.) ¹¹⁴

Introduzione. Riassunto del contenuto.

I. Teoria delle perturbazioni

- § 1. Un'unica variabile indipendente
- § 2. Più variabili indipendenti (equazione differenziale alle derivate parziali)

II. Applicazione all'effetto Stark

- § 3. Calcolo delle frequenze secondo il metodo corrispondente a quello di Epstein
- § 4. Tentativo di calcolo delle intensità e delle polarizzazioni di una figura di partizione
- § 5. Trattazione dell'effetto Stark secondo il metodo corrispondente a quello di Bohr

III. Appendice matematica

- 1. I polinomi generalizzati e le funzioni ortogonali di Laguerre
- 2. Integrali definiti di prodotti di due funzioni ortogonali di Laguerre
- 3. Integrali con le funzioni sferiche

[†] di Erwin Schrödinger: *Annalen der Physik* **80** (1926) 437–490, ricevuto il 10 maggio 1926.

[#] Cfr. *Ann. d. Phys.* **79**, p. 361, 489, 1926; inoltre anche *ibid.* p. 734.

¹¹⁴ Di questa lunga e tecnica relazione, che per altro, nel definire il metodo della teoria delle perturbazioni in meccanica quantistica, riveste la massima importanza per la risoluzione dell'equazione di Schrödinger quando risulta impossibile una soluzione esatta analitica, ci si limita qui a dare i titoli dei paragrafi.

Quantizzazione come problema agli autovalori †
(quarta comunicazione)^{# 115}

Sommario: § 1. Eliminazione del parametro energia dall'equazione d'onda. La vera equazione d'onda. Sistemi non conservativi. – § 2. Estensione della teoria delle perturbazioni a perturbazioni che contengono esplicitamente il tempo. Teoria della dispersione. – § 3. Integrazioni al § 2: atomi eccitati, sistemi degeneri, spettro a righe. – § 4. Discussione del caso di risonanza. – § 5. Generalizzazione a una perturbazione arbitraria. – § 6. Generalizzazione relativistico-magnetica delle equazioni fondamentali. – § 7. Sul significato fisico dello scalare di campo.

§ 1. Eliminazione del parametro energia
dall'equazione d'onda. La vera equazione d'onda.
Sistemi non conservativi

L'equazione d'onda (18), ovvero (18''), di p. 510¹¹⁶ della seconda comunicazione,

$$(1) \quad \nabla^2 \psi - \frac{2(E - V)}{E^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0$$

ovvero

$$(1') \quad \nabla^2 \psi - \frac{8\pi^2}{h^2} (E - V) \psi = 0,$$

che costituisce il *fondamento* della nuova fondazione della meccanica ricercata in questa serie di dissertazioni, soffre dell'inconveniente che non esprime *in*

† di Erwin Schrödinger: *Annalen der Physik* **81** (1926) 109–139, ricevuto il 21 giugno 1926.

Cfr. *Ann. d. Phys.* **79**, p. 361, 489; **80**, p. 437, 1926; inoltre sulla connessione con la teoria di Heisenberg: *ibidem* **79**, p. 734.

¹¹⁵ Si tratta delle tre precedenti comunicazioni con lo stesso titolo e del lavoro in cui Schrödinger mostra l'equivalenza tra il suo approccio ondulatorio e la meccanica delle matrici proposta da Heisenberg.

¹¹⁶ Qui di p. 64.

modo uniforme e generale la legge di variazione dello “scalare di campo meccanico” ψ . L’equazione (1) contiene infatti il parametro energia o frequenza E ed è valida per un *determinato* valore di E , come sottolineato esplicitamente nel luogo citato, per processi che dipendono dal tempo esclusivamente attraverso un fattore periodico *determinato*:

$$(2) \quad \psi \sim P \cdot R \cdot \left(e^{\pm 2\pi i E t / h} \right).$$

L’equazione (1) in realtà non è perciò affatto più generale dell’equazione (1') che comporta l’inconveniente citato e non contiene più del tutto il tempo ¹¹⁷.

Perciò quando abbiamo occasionalmente indicato l’equazione (1) o (1') come “equazione d’onda”, ciò avveniva in realtà a torto, in quanto essa sarebbe più correttamente da indicare come equazione di “vibrazione” o di “ampiezza”. Però lo trovavamo sufficiente, perché proprio a *questa*, e non alla *vera* equazione d’onda, si collega l’equazione agli autovalori di Sturm–Liouville ¹¹⁸ – proprio nello stesso modo del problema, completamente analogo dal punto di vista matematico, delle vibrazioni libere di corde e membrane.

Inoltre finora abbiamo sempre supposto che l’energia potenziale sia una funzione reale delle coordinate e *non* dipenda esplicitamente dal tempo. Esiste però la necessità pressante di estendere la teoria a sistemi *non conservativi*, perché solo in questo modo si può studiare il comportamento del sistema sotto l’azione di forze esterne assegnate, per esempio un’onda di luce oppure un atomo estraneo che transita davanti. Non appena però V contiene esplicitamente il tempo, è chiaramente *impossibile* soddisfare l’equazione (1) o (1') con una funzione ψ che dipenda dal tempo solo secondo la (2). Allora non basta più l’equazione d’ampiezza, ma si deve ricorrere alla vera equazione d’onda.

Per sistemi conservativi questa può essere data facilmente. La (2) è infatti equivalente a:

$$(3) \quad \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = - \frac{4\pi^2 E^2}{h^2} \psi.$$

¹¹⁷ E infatti è quella che oggi viene indicata come equazione di Schrödinger degli stati stazionari.

¹¹⁸ Jacques–Charles–François Sturm (1803–1855) e Joseph Liouville (1809–1882) hanno dato fondamentali contributi alla teoria delle equazioni differenziali. In particolare l’equazione agli autovalori, che porta il loro nome e a cui Schrödinger fa riferimento, interviene nei problemi sulle membrane vibranti ed è un’equazione del tipo:

$$\frac{d}{dx} \left(K(x) \frac{dy}{dx} \right) + \lambda G(x) y(x) = 0.$$

Dalla (1') e dalla (3) si può eliminare E per derivazione e si ottiene con una scrittura simbolica autoevidente ¹¹⁹:

$$(4) \quad \left(\nabla^2 - \frac{8\pi^2}{h^2} V \right)^2 + \frac{16\pi^2}{h^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0.$$

A questa equazione deve soddisfare ogni ψ che dipende dal tempo secondo la (2), ma *con arbitraria* E , e quindi anche ogni ψ che si possa sviluppare in serie di Fourier del tempo (naturalmente con funzioni delle coordinate come coefficienti). L'equazione (4) è perciò chiaramente l'*equazione d'onda uniforme e generale per lo scalare di campo* ψ .

Come si vede, essa non è più del tipo semplicissimo della membrana vibrante, ma piuttosto del quarto ordine nelle coordinate e di tipo molto simile a quello che si presenta in molti problemi della teoria dell'elasticità ^{† 120}. Tuttavia non si deve perciò temere alcuna complicazione eccessiva della teoria

¹¹⁹ Portando il termine contenente la E a secondo membro e quadrando poi ambo i membri della (1'), Schrödinger può sostituire E^2 con la derivata temporale seconda di ψ , secondo la (3). L'eliminazione del parametro costante E è pagata però con la comparsa del laplaciano quadrato e con la necessità di conoscere a un certo istante sia la ψ che la sua derivata temporale.

[†] Per esempio nel caso della lamina vibrante:

$$\nabla^2 \nabla^2 u + \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = 0.$$

Cfr. Courant–Hilbert, cap. V, § 8, p. 256.

¹²⁰ Nella dinamica dei sistemi continui deformabili, si definisce “membrana” un sistema bidimensionale continuo perfettamente flessibile, rappresentato geometricamente da una superficie: da un punto di vista dinamico, la membrana è la generalizzazione bidimensionale della corda vibrante. Attraverso un generico elemento di linea del contorno di una porzione interna della membrana le parti contigue esercitano uno sforzo (forza per unità di lunghezza), che dipende solo dal versore tangente alla superficie della membrana e normale all'elemento di linea considerato. L'equazione di movimento della membrana, che regola i piccoli spostamenti trasversali della membrana stessa, $s(x, y, t)$, è quindi la generalizzazione a due dimensioni spaziali della nota equazione della corda vibrante proposta da Jean-Baptiste le Rond d'Alembert (1717-1783):

$$\frac{\partial^2 s}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 s}{\partial y^2} - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 s}{\partial t^2} = 0,$$

dove v^2 è il rapporto tra la tensione e la densità di massa della corda. Una “lamina” è invece un sistema bidimensionale continuo *non* perfettamente flessibile: sull'elemento di linea del contorno di una porzione della lamina le altre parti della lamina esercitano, oltre allo sforzo presente anche nel caso della membrana, una coppia che dipende essa pure dalla normale all'elemento di linea. Se la membrana è elastica, generalizzando un'ipotesi formulata da Leonhard Euler (1707–1783) per il caso monodimensionale delle piccole vibrazioni di una verga elastica, questa coppia risulta proporzionale alla curvatura della superficie della lamina. Ciò implica un'equazione di moto della lamina con derivate spaziali quarte della funzione che descrive i piccoli spostamenti trasversali della lamina:

oppure la necessità di una revisione dei metodi connessi con l'equazione (1') dati finora. Se V non contiene il tempo ¹²¹, allora partendo dalla (4) si può fare l'ipotesi (2) e quindi spezzare l'operatore nella (4) nel modo seguente:

$$(4') \quad \left(\nabla^2 - \frac{8\pi^2}{h^2} V + \frac{8\pi^2}{h^2} E \right) \left(\nabla^2 - \frac{8\pi^2}{h^2} V - \frac{8\pi^2}{h^2} E \right) \psi = 0.$$

Si può spezzare *tentativamente* questa equazione in due, mediante equazioni legate tra di loro da una relazione di “o l'una – o l'altra”, cioè nell'equazione (1') o in un'altra che si distingue dalla (1') solo per il fatto che il parametro dell'autovalore in essa si *chiama* meno E , invece che più E , cosa che per la (2) non porta a nuove soluzioni. La partizione della (4') non è assolutamente necessaria, perché per gli operatori non vale l'affermazione che “un prodotto può azzerarsi solo se *almeno* uno dei fattori si annulla”. Questo difetto di necessità si incontra però nei metodi di soluzione passo a passo delle equazioni alle derivate parziali. Il procedimento trova la sua successiva giustificazione nella dimostrazione della *completezza* delle autofunzioni trovate come funzioni delle coordinate. Unitamente al fatto che non solo la parte reale, ma anche la parte immaginaria della (2) soddisfa all'equazione (4), essa permette di soddisfare arbitrarie condizioni iniziali per ψ e $\partial\psi/\partial t$.

Dunque vediamo che l'equazione d'onda (4), che comporta già la legge di dispersione, davvero può valere come fondamento della teoria sviluppata finora per i sistemi conservativi. La sua generalizzazione al caso di una funzione potenziale variabile nel tempo esige comunque cautela, in quanto possono presentarsi termini con derivata temporale di V sui quali naturalmente l'equazione (4), per come è stata ricavata, non ci può dare alcuna informazione. Di fatto, nel tentativo di trascrivere l'equazione (4) così come sta nel caso di sistemi non conservativi, ci si scontra con complicazioni che sembrano derivare da un termine con $\partial V/\partial t$. Perciò nel seguito ho intrapreso un cammino un po' diverso, che è dal punto di vista computazionale straordinariamente molto più semplice e che io reputo corretto in linea di principio.

Non si deve spingere l'ordine dell'equazione d'onda fino al quarto per rimuovere da essa il parametro energia. La dipendenza temporale della ψ

$$\frac{\partial^4 s}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 s}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 s}{\partial y^4} + \frac{1}{\Omega^4} \frac{\partial^2 s}{\partial t^2} = 0,$$

dove Ω^4 è il rapporto tra un coefficiente (positivo), dipendente dalla natura elastica e dallo spessore della lamina, e la densità superficiale della lamina stessa.

Il riferimento di Schrödinger al testo di Courant e Hilbert è ormai sistematico, a riprova che Schrödinger aveva assimilato perfettamente la tecnica di risoluzione delle equazioni differenziali nella versione più moderna rispetto al suo vecchio testo di Schlesinger.

¹²¹ In questo caso si ritorna alla situazione stazionaria rappresentata dalla (3) o, equivalentemente, dalla (2).

necessaria per la validità della (1'), invece che dalla (3), può anche essere espressa da ¹²²:

$$(3') \quad \frac{\partial \psi}{\partial t} = \pm \frac{2\pi i}{h} E \psi.$$

Si arriva allora a una delle due equazioni:

$$(4'') \quad \nabla^2 \psi - \frac{8\pi^2}{h^2} V \psi \mp \frac{4\pi i}{h} \frac{\partial \psi}{\partial t} = 0.$$

Pretenderemo che la funzione d'onda complessa ψ soddisfi una di queste due equazioni. Siccome allora la funzione complessa coniugata $\bar{\psi}$ soddisfa l'altra equazione, come funzione d'onda reale (quando necessaria) si deve riguardare la parte reale di ψ ¹²³. – Nel caso di un sistema conservativo la (4'') e la (4) sono in realtà equivalenti, perché quando V non contiene il tempo l'operatore reale si lascia spezzare nel prodotto di due complessi coniugati.

.....

§ 6. Generalizzazione relativistico-magnetica delle equazioni fondamentali

In connessione con i problemi fisici menzionati da ultimo, nei quali gioca un ruolo importante il *campo magnetico* che finora in questa serie di comunicazioni è stato completamente lasciato da parte ¹²⁴, vorrei ora esporre molto brevemente la presumibile generalizzazione relativistico-magnetica delle equazioni (4''), anche se per il momento lo posso fare per il problema a un elettrone e con la massima riserva. E ciò per due motivi. Primo, la generalizzazione riposa per ora su un'analogia puramente formale. In secondo luogo, come già

¹²² Oggi siamo abituati alla corrispondenza, qui proposta per la prima volta,

$$E \rightarrow i \hbar \frac{\partial}{\partial t}.$$

¹²³ Ecco dunque finalmente comparire l'equazione che oggi diciamo equazione di Schrödinger! Anzi, ne compaiono due contemporaneamente! Ma ciò non disturba Schrödinger, perché sa che la ψ è complessa e le due equazioni nella (4'') sono l'una la complessa coniugata dell'altra: perciò, "quando necessaria", basterà prendere la parte reale di ψ .

¹²⁴ Nei paragrafi qui saltati Schrödinger ha esteso al caso di perturbazioni dipendenti dal tempo la teoria delle perturbazioni da lui sviluppata nella terza comunicazione e applicata allo studio dell'effetto Stark. Tra gli esempi considerati si è occupato dell'interazione tra la radiazione e l'atomo, accennando alla fine del precedente paragrafo alla radiazione risonante in campo magnetico.

accennato nella prima comunicazione ^{† 125}, nel caso del problema di Keplero essa porta formalmente alla formula della struttura fine di Sommerfeld e cioè con il quanto azimutale e radiale “seminteri”, cosa che oggi in generale viene considerata corretta; solamente le *manca* ancora l'*integrazione*, necessaria alla produzione di uno schema di suddivisione delle righe dell'idrogeno numericamente corretto, che nello schema di Bohr viene fornita mediante lo spin dell'elettrone di Goudsmit e Uhlenbeck ¹²⁶.

L'equazione alle derivate parziali di Hamilton per l'elettrone di Lorentz si lascia facilmente mettere nella forma seguente ¹²⁷:

$$(34) \quad \left(\frac{1}{c} \frac{\partial W}{\partial t} + \frac{e}{c} V\right)^2 - \left(\frac{\partial W}{\partial x} - \frac{e}{c} \mathcal{A}_x\right)^2 - \left(\frac{\partial W}{\partial y} - \frac{e}{c} \mathcal{A}_y\right)^2 - \left(\frac{\partial W}{\partial z} - \frac{e}{c} \mathcal{A}_z\right)^2 - m^2 c^2 = 0.$$

Qui e , m , c sono la carica, la massa dell'elettrone e la velocità della luce; V , \mathcal{A} sono i potenziali elettromagnetici del campo elettromagnetico esterno nella posizione occupata dall'elettrone. W è l'azione.

Dall'equazione classica (relativistica) (34) cerco ora di derivare l'*equazione d'onda* per l'elettrone mediante il seguente procedimento *puramente*

[†] Un tentativo molto interessante e di successo, in cui l'azione di particelle cariche in movimento è paragonata all'azione delle onde di luce attraverso la decomposizione di Fourier del loro campo, si trova in E. Fermi, Ztschr. f. Phys. **29**, p. 315, 1924. Ann. d. Phys., **79**, p. 372, 1926.

¹²⁵ Enrico Fermi (1901–1954) aveva calcolato la probabilità di eccitazione o di ionizzazione di un atomo dovuta all'urto di una particella carica mediante la probabilità di eccitazione o di ionizzazione provocata dalla radiazione equivalente indotta dal campo elettrico generato al passaggio della particella carica stessa.

E. Fermi: *Über die Theorie des Stosses zwischen Atomen und elektrisch geladenen Teilchen [Teoria dell'urto tra atomi e particelle cariche elettricamente]*, Zeitschrift für Physik **29** (1924) 315–327.

¹²⁶ Nel 1925, cioè solo pochi mesi prima, George Eugene Uhlenbeck (1900–1988) e Samuel Abraham Goudsmit (1902–1978) postularono che l'elettrone possedesse un grado di libertà intrinseco addizionale, lo spin, responsabile dell'effetto Zeeman anomalo.

G.Uhlenbeck e S.Goudsmit: *Ersetzung der Hypothese vom unmechanischen Zwang durch eine Forderung bezüglich des inneren Verhaltens jedes einzelnen Elektrons [Sostituzione dell'ipotesi di un vincolo non meccanico con un postulato riguardante il comportamento intrinseco di ogni singolo elettrone]*, Die Naturwissenschaften **13** (1925) 953–954; *Spinning electrons and the structure of spectra [Elettroni rotanti e la struttura degli spettri]*, Nature **117** (1926) 264–265.

¹²⁷ L'elettrone di Lorentz è una particella puntiforme di massa m e carica elettrica e , soggetto alle leggi dell'elettromagnetismo classico e in grado di spiegare l'effetto Zeeman normale, ma non quello anomalo.

Hendrik Antoon Lorentz (1853–1928): *Über den Einfluss magnetischen Kräfte auf die Emission des Lichtes [Influenza della forza magnetica sull'emissione della luce]*, Annalen der Physik **63** (1897) 278–284.

Schrödinger nello scrivere l'equazione per l'elettrone di Lorentz ha usato qui la sostituzione minimale: $E \rightarrow E + eV$, $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathcal{A}$.

formale, che, come facilmente si può immaginare, porterebbe alle equazioni (4'') se fosse applicato all'equazione di Hamilton di un punto materiale dell'ordinaria meccanica (non relativistica) che si muove in un arbitrario campo di forze. – Nella (34), nell'operazione di elevazione al quadrato, sostituisco le quantità ¹²⁸:

$$(35) \quad \begin{aligned} & \frac{\partial W}{\partial t}, \frac{\partial W}{\partial x}, \frac{\partial W}{\partial y}, \frac{\partial W}{\partial z}, \\ & \text{rispettivamente con gli operatori:} \\ & \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial t}, \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x}, \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial y}, \pm \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned}$$

Pongo uguale a zero l'operatore lineare del secondo ordine così ottenuto, applicato a una funzione d'onda ψ :

$$(36) \quad \begin{aligned} \nabla^2 \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} \mp \frac{4\pi i e}{hc} \left(\frac{V}{c} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \mathbf{A} \text{ grad } \psi \right) \\ + \frac{4\pi^2 e^2}{h^2 c^2} \left(V^2 - \mathcal{A}^2 - \frac{m^2 c^4}{e^2} \right) \psi = 0. \end{aligned}$$

(I simboli ∇^2 e grad hanno qui il significato elementare tridimensionale euclideo.) La coppia di equazioni (36) sarebbe la presunta generalizzazione relativistico-magnetica della (4'') nel caso di un singolo elettrone e sarebbe parimente da interpretare nel senso che la funzione d'onda complessa debba soddisfare l'una o l'altra delle due equazioni.

Per l'atomo di idrogeno la formula di struttura fine di Sommerfeld può essere ottenuta dalla (36) esattamente con lo stesso metodo descritto nella prima comunicazione e allo stesso modo si può derivare l'effetto Zeeman normale (trascurando il termine in \mathcal{A}^2), come pure le ben note regole di selezione e di polarizzazione insieme con le formule di intensità; esse seguono dalle relazioni di integrazione tra funzioni sferiche derivate alla fine della terza comunicazione ¹²⁹.

¹²⁸ La (35) fornisce la regola per la transizione dalle variabili classiche di energia e impulso, scritte in termini di derivate dell'azione, agli operatori quantistici tuttora in uso; resta ancora ambiguo il segno degli operatori, come nel caso non relativistico (3').

¹²⁹ Le regole di selezione sulle possibili transizioni da un livello all'altro sono pilotate dall'ortogonalità delle armoniche sferiche che descrivono la parte angolare della funzione d'onda dei due livelli in considerazione. Schrödinger lo aveva scoperto nella sua terza comunicazione, ma oggi è riconosciuto come un caso particolare del teorema di Wigner–Eckart che trae origine dall'uso dei tensori irriducibili e della teoria dei gruppi in meccanica quantistica. Eugene Paul Wigner (n. 1902) introdusse il concetto di operatore tensoriale nel 1931 nel suo libro: *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspek-*

Per i motivi accennati nel primo capoverso di questo paragrafo rinuncio per il momento alla dettagliata riproduzione di questo calcolo e nel paragrafo finale seguente mi occupo anche della formulazione della teoria “classica” e non di quella relativistico-magnetica non ancora compiuta.

§ 7. Sul significato fisico dello scalare di campo

Nel § 2 l’ipotesi euristica sul significato elettrodinamico dello scalare di campo ψ , applicata in precedenza al problema di *un* elettrone, è stata generalizzata senza tanti discorsi a un arbitrario sistema di masse cariche ed è stata promessa una approfondita discussione di questo modo di procedere. Là avevamo calcolato la densità di carica elettrica in un punto qualsiasi dello spazio nel modo seguente: si sceglie *un* punto materiale, si tiene fissa la tripla di coordinate che descrive la *sua* posizione nell’ordinaria meccanica, si integra $\psi\bar{\psi}$ sulle rimanenti coordinate del sistema e si moltiplica il risultato per una certa costante, la “carica” del punto materiale prescelto; nella stessa maniera si procede con ogni punto materiale (tripla di coordinate), assegnando ogni volta la stessa posizione al punto materiale di volta in volta prescelto, e cioè la posizione del punto *spaziale* in cui si desidera conoscere la densità di carica elettrica. Quest’ultima è uguale alla somma algebrica dei risultati parziali.

Questa prescrizione vale ugualmente ora con l’idea seguente, che meglio mette in evidenza l’autentico significato della ψ . $\psi\bar{\psi}$ è una specie di *funzione di peso* nello spazio delle configurazioni del sistema. La configurazione del sistema nella *meccanica ondulatoria* è una *sovrapposizione* di molte, a rigore di *tutte*, le configurazioni cinematicamente possibili nella meccanica del punto. Inoltre ogni configurazione della meccanica del punto contribuisce con un certo *peso* alla reale configurazione della meccanica ondulatoria, peso che è dato appunto da $\psi\bar{\psi}$. Se si amano i paradossi, si può dire che il sistema si trova parimente e contemporaneamente in tutte le posizioni immaginabili cinematicamente, ma non in tutte “con la stessa intensità”. Nei moti macroscopici la funzione di peso si restringe in pratica a una piccola regione di posizioni in pratica indistinguibili, il cui baricentro percorre nello spazio delle configurazioni le traiettorie osservabili macroscopicamente. In ogni caso nel problema del moto microscopico interessa *anche*, e per certe richieste perfino *innanzi tutto*, la *distribuzione* variabile sulla regione.

Questa interpretazione a prima vista può essere scioccante, in quanto finora abbiamo parlato spesso intuitivamente in una forma così concreta delle

tren, F. Vieweg, Braunschweig, 1931. Un primo enunciato del teorema si trova in Carl Henry Eckart (1902–1975): *The Application of Group Theory to the Quantum Dynamics of Monoatomic Systems* [Applicazione della teoria dei gruppi alla dinamica quantistica di sistemi monoatomici], *Reviews of Modern Physics* **2** (1930) 305–380. Per una trattazione generale, si veda E.P. Wigner: *Group Theory and its Application to the Quantum Mechanics of Atomic Spectra*, Academic Press, New York, 1959, edizione tradotta e ampliata della prima edizione tedesca del 1931.

“vibrazioni di ψ ”, come se fossero qualcosa di totalmente reale. Però ancora compete loro una certa realtà afferrabile sulla base della presente interpretazione, e cioè le fluttuazioni estremamente reali, efficaci elettrodinamicamente, della densità spaziale di carica elettrica. La funzione ψ non deve essere o fornire né più né meno di ciò che consente, e cioè di governare e dominare matematicamente il complesso di queste fluttuazioni attraverso una sola equazione differenziale alle derivate parziali. Che la funzione ψ stessa non si possa e non si debba in generale interpretare direttamente nello spazio tridimensionale¹³⁰, come davvero induce a pensare il problema a un elettrone, è stato messo in rilievo ripetutamente[†], perché essa è appunto in generale una funzione nello spazio delle configurazioni e non nello spazio reale.

Da una funzione di peso nel senso posto sopra si vorrebbe che il suo integrale sull'intero spazio delle configurazioni continuasse a rimanere normalizzato con lo stesso valore, preferibilmente uguale a uno. Di fatto ci si rende facilmente conto che ciò è necessario perché si mantenga costante la carica totale del sistema come definita sopra. Ed è ovvio imporre questo requisito anche per sistemi non conservativi, in quanto naturalmente la carica di un sistema non può variare se, per esempio, incide un'onda di luce per un certo periodo di tempo e poi si interrompe. (N.B. Ciò vale anche nei processi di ionizzazione. Una particella separata è ancora da considerarsi parte del sistema fino a quando la separazione non viene effettuata anche *logicamente* – mediante la partizione dello spazio delle configurazioni.)

Ci si chiede ora se questa richiesta *persistenza della normalizzazione* sia garantita anche in realtà dalle equazioni di evoluzione (4'') di p. 112¹³¹, cui è assoggettata la ψ . Se ciò non fosse, sarebbe una catastrofe per tutto il nostro punto di vista. Ma fortunatamente questo è il caso. Costruiamo:

$$(37) \quad \frac{d}{dt} \int \psi \bar{\psi} \rho \, dx = \int \left(\psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} + \bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \rho \, dx.$$

Ora la ψ soddisfa a una delle equazioni (4''), e quindi la $\bar{\psi}$ l'altra. Perciò l'integrale precedente, a meno di una costante moltiplicativa, diventa:

$$(38) \quad \int (\psi \nabla \bar{\psi} - \bar{\psi} \nabla \psi) \rho \, dx = 2i \int (J \nabla R - R \nabla J) \rho \, dx,$$

in cui per il momento si è posto:

$$\psi = R + iJ.$$

¹³⁰ Come pretendeva invece de Broglie.

[†] Ann. d. Phys. **79**, p. 526, 754, 1926.

¹³¹ Qui di p. 89.

L'integrale (38) si azzerava identicamente per il lemma di Green ¹³²; l'unica condizione alla quale debbono soddisfare le funzioni R e J – di azzerarsi all'infinito in modo sufficientemente veloce – fisicamente non significa altro che il sistema all'esame sia in pratica limitato a un dominio *finito*.

Quanto precede si può trattare in altro modo, nel senso che non si integra direttamente su tutto lo spazio delle configurazioni, ma piuttosto si trasforma semplicemente la derivata temporale della funzione di peso in una divergenza mediante la trasformazione di Green. Ci si fa così un'idea del comportamento di flusso in primo luogo della funzione di peso e, per mezzo di lei, della carica elettrica. Si moltiplichino le due equazioni:

$$(4'') \quad \begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial t} &= \frac{h}{4\pi i} \left(\nabla - \frac{8\pi^2}{h^2} V \right) \psi, \\ \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} &= -\frac{h}{4\pi i} \left(\nabla - \frac{8\pi^2}{h^2} V \right) \bar{\psi}, \end{aligned}$$

rispettivamente per $\rho \bar{\psi}$ e per $\rho \psi$ e le si sommino ¹³³:

$$(39) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi \bar{\psi}) = \frac{h}{4\pi i} \rho \cdot (\bar{\psi} \nabla \psi - \psi \nabla \bar{\psi}).$$

Per eseguire esplicitamente la trasformazione del membro destro, occorre ricordarsi della forma esplicita del nostro operatore di Laplace nello spazio multidimensionale non euclideo ^{† 134}:

¹³² Nel secondo membro della (38) compare la divergenza di R e J ; per il lemma di Green l'integrale di volume di una divergenza si trasforma in un integrale esteso alla superficie che racchiude il volume, che si azzerava se non c'è flusso di R e J attraverso tale superficie. George Green (1793–1841) viene citato sia per il lemma, sia per la funzione che porta il suo nome e che viene utilizzata nella risoluzione delle equazioni differenziali. Questi suoi contributi apparvero in un saggio del 1828 (*An Essay on the Application of Mathematical Analysis to the Theory of Electricity and Magnetism*), in cui Green sottolineava il ruolo della funzione potenziale nello studio dei fenomeni elettrici e magnetici.

¹³³ Schrödinger scopre qui che la quantità $\rho \psi \bar{\psi}$ soddisfa a un'equazione di continuità.

[†] Ann. d. Phys. **79**, p. 748, 1926, eq. (31). La quantità là indicata con $\Delta_p^{-1/2}$ è la nostra "funzione densità" $\rho(x)$ (p. es. $r^2 \sin \theta$ per una tripla di coordinate polari). T è l'energia cinetica in funzione delle coordinate di posizione e degli *impulsi*, con l'indice di T che indica la dipendenza da una delle coordinate di impulso. – Nelle equazioni (31) e (32) del lavoro citato, per una svista l'indice k è usato purtroppo due volte, una come indice della sommatoria e poi però anche come indice rappresentativo nell'argomento delle funzioni.

¹³⁴ L'articolo citato è quello in cui Schrödinger mostra l'equivalenza tra il suo approccio e quello di Heisenberg. Nel § 4, intitolato "soluzione delle equazioni di moto di Heisenberg", per utilità del lettore rideriva l'equazione d'onda col metodo variazionale, scritto nella forma:

$$\delta \int \left\{ \frac{h^2}{4\pi^2} T \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) + \psi^2 V(q_k) \right\} \Delta_p^{-1/2} dx = 0,$$

$$(40) \quad \rho \nabla = \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\rho T_{p_k} \left(q_l, \frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right) \right].$$

Con una piccola trasformazione si trova allora facilmente:

$$(41) \quad \frac{\partial}{\partial t} (\rho \psi \bar{\psi}) = \frac{\hbar}{4\pi i} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left[\rho \bar{\psi} T_{p_k} \left(q_l, \frac{\partial \psi}{\partial q_l} \right) - \rho \psi T_{p_k} \left(q_l, \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial q_l} \right) \right].$$

Il membro destro appare come una divergenza di un vettore reale in uno spazio a molte dimensioni, che chiaramente si deve interpretare come la *densità di corrente della funzione di peso* nello spazio delle configurazioni. L'eq. (41) è l'*equazione di continuità* della funzione peso.

Da essa si può ricavare l'*equazione di continuità della carica elettrica* e una tale equazione vale separatamente per la densità di carica "che deriva da

con la condizione ausiliaria di normalizzazione:

$$\int \psi^2 \Delta_p^{-1/2} dx = 1.$$

In queste equazioni $\int dx$ sta per $\int dq_1 \dots dq_n$ e $\Delta_p^{-1/2}$ è il reciproco della radice quadrata del discriminante della forma quadratica T , che "non deve essere assolutamente dimenticato, altrimenti l'intero processo non sarebbe invariante rispetto alle trasformazioni puntuali [canoniche] delle q_k " (cfr. n. 76 a p. 43). Il risultato del metodo variazionale è un'equazione di Eulero, la citata equazione (31), che è poi l'equazione di Schrödinger:

$$\frac{\hbar^2}{8\pi^2} \Delta_p^{1/2} \sum_k \frac{\partial}{\partial q_k} \left\{ \Delta_p^{-1/2} T_{p_k} \left(q_k, \frac{\partial \psi}{\partial q_k} \right) \right\} - V(q_k) \psi + E \psi = 0, \quad (31)$$

dove E è il moltiplicatore di Lagrange che tiene conto della condizione di normalizzazione e p_k indica la derivazione di T rispetto all'argomento che originariamente si chiamava $p_k (= \partial \psi / \partial q_k)$. Schrödinger mostra che questa equazione coincide con quella che nel lavoro citato è l'eq. (21) e che si ottiene introducendo una funzione ψ dipendente dalle q_k nello schema di Heisenberg:

$$-[H, \psi] + E \psi = 0. \quad (21)$$

Infatti, ricordando che per la forma quadratica T vale la relazione di Eulero per le funzioni omogenee (eq. (32) citata):

$$T(q_k, p_k) = \frac{1}{2} \sum_k p_k T_{p_k}(q_k, p_k), \quad (32)$$

si riconosce che l'equazione citata (31) si identifica con quella citata (21), pur di identificare p_k con $-i \hbar \partial / \partial q_k$.

ogni singolo punto materiale”. Consideriamo per esempio la α -esima massa, con “carica” e_α , massa m_α e in uno spazio delle coordinate descritto per semplicità mediante coordinate cartesiane $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$. Indichiamo in modo abbreviato con dx' il prodotto dei differenziali delle rimanenti coordinate. Su queste si integri l’eq. (41) mantenendo costanti $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$. Con questa integrazione vengono eliminati nel membro destro tutti i termini tranne tre e si ottiene:

$$(42) \quad \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[e_\alpha \int \psi \bar{\psi} dx' \right] &= \frac{he_\alpha}{4\pi im_\alpha} \left\{ \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left[\int \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial x_\alpha} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial x_\alpha} \right) dx' \right] \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial y_\alpha} \left[\int \left(\bar{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial y_\alpha} - \psi \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial y_\alpha} \right) dx' \right] + \dots \right\} \\ &= \frac{he_\alpha}{4\pi im_\alpha} \operatorname{div}_\alpha \left[\int \left(\bar{\psi} \operatorname{grad}_\alpha \psi - \psi \operatorname{grad}_\alpha \bar{\psi} \right) dx' \right]. \end{aligned}$$

In questa equazione div e grad hanno l’usuale significato nello spazio euclideo tridimensionale e $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$ sono da intendersi come coordinate cartesiane dello spazio reale. L’equazione è l’equazione di continuità della densità di carica che “deriva dalla α -esima massa”. Se si costruiscono le rimanenti in modo analogo e le si sommano tutte, si ottiene l’equazione di continuità complessiva. Va sottolineato naturalmente che, come sempre in tali casi, l’interpretazione dell’integrale nel membro di destra come *componente della densità di corrente* non è assolutamente necessaria, in quanto potrebbe presentarsi un vettore privo di divergenza¹³⁵.

Per dare un esempio, se si dà la ψ nella forma:

$$(43) \quad \psi = \sum_k c_k u_k e^{2\pi i \nu_k t + i \theta_k} \quad (c_k, \theta_k \text{ costanti reali}),$$

nel problema conservativo a un elettrone si ottiene come *densità di corrente* J :

$$(44) \quad \begin{aligned} J &= \frac{he_1}{2\pi m_1} \sum_{(k,l)} c_k c_l (u_l \operatorname{grad} u_k - u_k \operatorname{grad} u_l) \\ &\quad \cdot \sin[2\pi(\nu_k - \nu_l)t + \theta_k - \theta_l]. \end{aligned}$$

¹³⁵ Tuttavia l’interpretazione dell’equazione di continuità in termini di conservazione della carica elettrica incontra grosse difficoltà già a livello della stessa equazione di Schrödinger; in essa compare solo il potenziale delle forze esterne e non anche un contributo dovuto all’interazione tra le diverse regioni spaziali nelle quali andrebbe immaginata distribuita la carica della particella. Perciò va senz’altro esclusa.

Si vede, e ciò vale in generale per sistemi conservativi – che se viene eccitata solo una singola vibrazione propria, le componenti della corrente si azzerano e la distribuzione della carica elettrica diventa costante nel tempo; cosa, quest'ultima, che si osserva anche immediatamente perché $\psi\bar{\psi}$ diventa costante nel tempo. Questo si verifica anche quando sono eccitate più vibrazioni proprie, ma appartenenti tutte allo stesso autovalore. Allora al contrario la densità di corrente non ha più bisogno di annullarsi, ma può essere ed è presente in generale come una distribuzione di corrente *stazionaria*. Siccome nello stato fondamentale imperturbato si verifica l'uno o l'altro caso, in un certo senso si può parlare di un *ritorno al modello atomico elettrostatico e magnetostatico*. Perciò l'assenza di radiazione nello stato fondamentale trova in ogni caso una soluzione stupefacente.

Spero e credo che le precedenti considerazioni si dimostrino utili per la spiegazione delle proprietà magnetiche degli atomi e delle molecole e inoltre anche per la spiegazione del flusso di elettricità nei solidi.

Una certa resistenza c'è ancora senza dubbio nell'utilizzo di una funzione d'onda *complessa*. Se fosse inevitabile *in linea di principio* e non una pura facilitazione di conto, vorrebbe dire che esisterebbero in linea di principio *due* funzioni d'onda che solo *insieme* spiegano lo stato del sistema. Questa conclusione poco simpatica ammette, come credo, l'interpretazione molto più simpatica che lo stato del sistema sia fornito da una funzione reale e dalla sua dipendenza dal tempo. Che su ciò non siamo ancora in grado di dare una conclusione più precisa dipende dal fatto che nella coppia di equazioni (4'') abbiamo davanti solo il *surrogato* – in ogni caso straordinariamente adatto al calcolo – di un'equazione d'onda reale probabilmente del quarto ordine, che tuttavia non ho voluto proporre nel caso non conservativo.

Zurigo, Istituto di Fisica dell'Università.

QUADERNI DI FISICA TEORICA
Collana curata da Sigfrido Boffi
Collana di monografie curata da Sigfrido Boffi

1. Le onde di de Broglie, a cura di Sigfrido Boffi
2. Onde di materia e onde di probabilità, a cura di Sigfrido Boffi
3. Il principio di indeterminazione, a cura di Sigfrido Boffi
4. La meccanica delle onde, a cura di Sigfrido Boffi
5. Paradosso EPR e teorema di Bell, a cura di Oreste Nicosini
6. I cammini di Feynman, a cura di Marco Roncadelli e Antonio Defendi
7. L'interpretazione statistica della meccanica quantistica, a cura di Sigfrido Boffi
8. L'origine delle statistiche quantistiche, a cura di Fulvio Piccinini
9. Le radici della quantizzazione, a cura di Sandro Graffi
10. La fase di Berry, a cura di Franco Salmistraro
11. Il postulato dei quanti e il significato della funzione d'onda, a cura di Sigfrido Boffi
12. Indice di rifrazione adronico, a cura di Francesco Cannata
13. La formulazione delle storie della meccanica quantistica, a cura di Irene Giardina
14. La regola d'oro di Fermi, a cura di Paolo Facchi e Saverio Pascazio
15. Le radici del dualismo onda-corpuscolo, a cura di Sigfrido Boffi e Michele D'Anna
16. Teoria delle caratteristiche ed equazioni ondulatorie quantiche, a cura di Paola Orsi
17. La nascita del concetto di quanto, a cura di Francesco Lateana
18. Da Heisenberg a Landau. Introduzione alla fisica dei sistemi a molte particelle, di Sigfrido Boffi
19. Aspetti astrofisici della materia oscura, di Marco Roncadelli

I primi dieci Quaderni sono disponibili su richiesta presso il Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica dell'Università di Pavia.

QUADERNI DI FISICA TEORICA

Collana curata da Sigfrido Boffi

Dopo un primo biennio, in cui ha rivisto con maggiori dettagli e approfondimenti lo sviluppo della fisica classica e ha imparato a destreggiarsi con alcuni aspetti del formalismo matematico necessario, lo studente del Corso di Laurea in Fisica è costretto ad affrontare un nuovo modo di descrivere la natura che ormai il ricercatore professionale ha fatto suo da oltre mezzo secolo, ma che tuttora risulta estraneo al cosiddetto senso comune. L'impatto è principalmente difficile nel corso di Istituzioni di Fisica Teorica, che è tradizionalmente dedicato all'esposizione dei metodi teorici della meccanica quantistica così come si sono sviluppati nella prima metà del nostro secolo. Sembra perciò utile proporre, con questa collana di "*Quaderni di Fisica Teorica*," un tema, o un autore, attraverso la lettura commentata di uno o più articoli originali. Lo studente si accorgerà allora che le teorie organicamente presentate nei suoi manuali, necessarie per la pratica scientifica attuale, sono piuttosto il risultato di un lungo travaglio di idee, tentativi, successi, difficoltà, e infine di scelte, che sono sempre presenti nell'avventura dell'uomo animato dal desiderio invincibile di capire. Sarà dunque preparato, al termine dei suoi studi durante i quali si è impadronito in breve tempo dei risultati fondamentali ottenuti nell'arco di secoli, ad affrontare a sua volta, come giovane ricercatore, un cammino pieno di trabocchetti, ma anche ricco di soddisfazioni.

LA MECCANICA DELLE ONDE

La meccanica delle onde nasce dal riconoscimento che la meccanica classica fallisce là dove fallisce l'ottica geometrica, cioè quando i raggi di curvatura delle traiettorie non si possono più considerare grandi e la lunghezza d'onda diventa comparabile con le dimensioni degli ostacoli che incontra il moto dell'onda. La meccanica ondulatoria si fonda sull'equazione che Erwin Schrödinger propose in una serie di comunicazioni scritte nei primi sei mesi del 1926 e che è tuttora il punto di partenza di tutti gli studi di fisica atomica e nucleare. In questo Quaderno viene presentato il testo originale, tradotto in italiano, delle prime due comunicazioni e di parte della quarta.

ISBN 88-85159-04-4