

## Capitolo 2

# Heisenberg, 29 luglio 1925

### 2.1 Il circolo di Göttingen e l'illuminazione (*Erleuchtung*) di Heisenberg

La meccanica quantistica, dopo i prodromi di Planck (1900), Einstein (1905, 1906, 1917), Bohr (1912) e Sommerfeld (1919), nacque in maniera subitanea con due colpi di genio, dovuti l'uno ad Heisenberg (29 luglio 1925), subito seguito e completato da Born e Jordan e soprattutto da Dirac, l'altro a Schroedinger (27 gennaio 1926). La cosa incredibile è che anche la sistemazione finale ebbe luogo in maniera rapidissima, con quella che si può chiamare la bibbia della meccanica quantistica, ovvero il libro *The Principles of Quantum Mechanics* di Dirac, pubblicato nel 1930, parallelo al libretto *The Physical Principles of the Quantum Theory* di Heisenberg, dove sono raccolte le sue lezioni a Chicago del 1929 (gli altri grandi libri sono *Elementare Quantenmechanik* di M. Born e P. Jordan, del 1930, quello di von Neumann del 1932, con traduzione inglese *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics* e quello di H. Weyl, *The theory of Groups and Quantum Mechanics*, pubblicato a Londra nel 1931. L'articolo originale di Heisenberg e gran parte degli altri articoli rilevanti si trovano raccolti (tradotti e commentati) nel volume dell'algebrista van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*).<sup>1</sup>

Ora, il colpo di genio di Schroedinger è abbastanza facilmente descrivibile, come legato alla idea (concepita da de Broglie e fatta conoscere da Einstein<sup>2</sup>) di estendere la meccanica di una particella ad una meccanica ondulatoria, per analogia con l'estensione dell'ottica geometrica all'ottica ondulatoria, sicché molti manuali espongono la meccanica quantistica secondo

---

<sup>1</sup>Bellissimo è anche il libretto M Born, *Problems of Atomic Dynamics*, Dover (2004), ristampa delle lezioni tenute da Born al MIT di Boston nell'inverno 1925–1926. Le lezioni sono divise in due argomenti: I, *The structure of the Atom*; II, *The lattice theory of rigid bodies*.

<sup>2</sup>Nel suo secondo articolo (1925) sulla statistica di Bose–Einstein.

questa linea. Invece, il colpo di genio di Heisenberg è molto più difficile da illustrare, e d'altra parte il suo procedimento è in qualche modo, forse, più profondo.

Un'altra differenza è che, mentre il procedimento di Schroedinger è in un certo senso solare, tranquillo, legato ad una semplice intuizione sviluppata poi in modo pacato, e da una singola persona, il procedimento di Heisenberg si sviluppa invece nell'ambito della ricerca più avanzata (riguardante l'adattamento della teoria classica della dispersione della luce alla "teoria quantistica" di Bohr), condotta coralmemente da molti scienziati che giravano continuamente per i centri dominanti della cultura scientifica, Göttingen,<sup>3</sup> Vienna, Berlino, Copenhagen, con gruppi di persone che discutevano animatamente<sup>4</sup>, in un clima in qualche modo ansioso. Così lo descrive Heisenberg stesso nella conferenza "*The Beginnings of Quantum Mechanics*"<sup>5</sup> (pag. 40), quando illustra il problema centrale di cui tutti si occupavano (conciliare le regole di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld con la fisica classica), e dice: "*the fact ... that the orbital frequencies of the electrons could not coincide with the frequencies of the radiation emitted by the atom, was felt even by Bohr himself to be an almost intolerable contradiction, which he tried merely to patch over in desperation with the idea of his correspondence principle*". Cercheremo di rendere comprensibili queste parole nel prossimo paragrafo.

Dunque, a differenza che nel caso di Schroedinger, nel caso di Heisenberg non c'era una semplice idea da cui partire, ma una intricata e involuta serie di regole cui attenersi, su cui si svolgeva un grandissimo lavoro di gruppo. Il tema centrale era la comprensione delle righe spettrali degli atomi e delle molecole, e la difficoltà era che le regole di Bohr–Sommerfeld si riferivano a orbite classiche la cui frequenza non coincideva con quelle osservate. Infine, tali regole potevano essere formulate solo per sistemi che ammettono variabili angolo–azione, che sono sistemi eccezionali. Le righe erano ordinate per "serie" (si pensi alla serie di Balmer o a quella di Lyman) e si avevano tabelle di intensità e addirittura tabelle di "ampiezze", e Heisenberg ricorda (pag. 45) "*I wanted, rather, to trust entirely on the half-empirical rules for the multiplication of amplitude series*" (regola di somma di Thomas e Kuhn). Heisenberg stesso aveva già cercato per ben due volte di dare una regola di quantizzazione più appropriata di quelle di Bohr–Sommerfeld<sup>6</sup> (dopo diversi

<sup>3</sup>Nella prefazione al loro libro *Elementare Quantenmechanik*, Berlino 1930, Born e Jordan parlano del *Göttinger Kreis* (Circolo di Göttinga).

<sup>4</sup>Bellissima è la scenetta del ristorante, ricordata da Heisenberg nella sua conferenza "*The Beginnings of Quantum Mechanics*", scritta nel 1975, un anno prima della sua morte, come anche la descrizione delle serate nella casa di Born, con le torte della signora Born, e la presenza di Jordan, Hund, Fermi, Pauli, Norheim. Si veda W. Heisenberg, *Encounters with Einstein*, Princeton U.P. 1989, pag. 37

<sup>5</sup>In W. Heisenberg, *Encounters with Einstein*, Princeton U.P. 1989.

<sup>6</sup>Ad esempio, si veda W. Heisenberg, *Über eine Abhandlung ...*, ovvero *Su un cambiamento delle regole formali della teoria quantistica per il problema dell'effetto Zeeman*

lavori scritti con Sommerfeld, con Born e con Kramers). Infine, allontanatosi da Göttingen per riparare nell'isola di Helgoland per sfuggire alla febbre da fieno che lo tormentava, come lui stesso dice<sup>7</sup> “*es mir wie eine Erleuchtung kam*” (mi venne come una illuminazione) e riuscì nel suo intento di fabbricare una meccanica quantistica (“*eine Quantenmechanik zu fabrizieren*”).

Portando all'estremo il punto di vista di Bohr, già perseguito da Born e Kramers, Heisenberg aveva compiuto il grande salto di eliminare i concetti legati alle traiettorie delle particelle (che erano necessarie per esprimere le regole di quantizzazione al modo di Bohr e Sommerfeld), concentrandosi sulle tabelle delle ampiezze spettrali osservate (proprio come quantità complesse, con un modulo e una fase, come era ben familiare in ottica) come descriventi esse stesse, nella loro globalità, il sistema studiato, sicché svaniva in qualche modo la visione classica del sistema (si stava infatti fabbricando la meccanica quantistica). Si trattava di trovare “*un sostituto della regola di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld, perché questa, naturalmente, impiegava il concetto di orbite dell’elettrone which I had expressly forbidden myself. But a correspondence–type transformation soon led to the addition rule, derived by Thomas and Kuhn from dispersion theory and known to me from my time in Copenhagen. With this, it seemed, the whole mathematical scheme was established.*”

Heisenberg riuscì dunque ad enunciare la regola di quantizzazione in una forma matematica generalizzante quella di Bohr–Sommerfeld, che sarebbe subito dopo diventata, nelle mani di Born e Jordan e indipendentemente di Dirac, la condizione definente l’aspetto matematico della meccanica quantistica (le osservabili diventano matrici, o meglio operatori lineari, che sono definite dalle regole di commutazione tra gli operatori  $p$  e  $q$ ). In pochi giorni egli scrisse il lavoro e, dice, “*after my return to Göttingen I showed the paper to Born, who found it interesting but somewhat disconcerting, inasmuch as the concept of electron pathways was totally eliminated.*<sup>8</sup> *But he sent it for publication*<sup>9</sup> *to the Zeitschrift für Physik. Born and Jordan now plugged into the mathematical consequences of the paper, this time in my absence, since I had been invited by Ehrenfest and Fowler in Holland and Cambridge, England. In a few days (!) Born and Jordan found the key relation*

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i},$$

*anomalo*, pagina 289 del primo volume dei *Collected Works*.

<sup>7</sup>W. Heisenberg, Pauli Memorial Volume, pag 42

<sup>8</sup>Cio’è, si riusciva a dare una regola di quantizzazione che, a differenza da quella di Bohr–Sommerfeld, non faceva riferimento alle orbite delle particelle. Si ricordi che il calcolo dell’azione – da quantizzarsi secondo Bohr–Sommerfeld, richiedeva di valutare un opportuno integrale,  $\oint pdq$  lungo un’orbita. Heisenberg dà una prescrizione di quantizzazione che evita questo riferimento ad una orbita.

<sup>9</sup>Il 29 luglio.

by means of which the whole mathematical scheme could be made clear.” (qui e nel seguito, la matrice identità  $\mathbb{I}$  verrà denotata semplicemente con il numero 1.)

Il lavoro di Born e Jordan fu inviato il 27 settembre, seguito poi (il 16 novembre) dal *dreimänner-Arbeit* (il lavoro dei tre uomini, Born, Heisenberg e Jordan). Ma la cosa incredibile è il contributo di Dirac.<sup>10</sup> Infatti, quando Heisenberg tenne il suo seminario a Cambridge, Dirac non era presente. Il contenuto gli fu però riferito dal suo *tutor* Fowler (che era la persona che aveva invitato Heisenberg), e Dirac, cui Fowler aveva fatto intanto pervenire le bozze del lavoro di Heisenberg, rapidissimamente diede il suo contributo con un lavoro che venne inviato per pubblicazione sui *Proceedings of the Royal Society* il 7 novembre (nove giorni prima del *dreimänner Arbeit*). Sostanzialmente anche egli capì che la regola di quantizzazione di Heisenberg poteva porsi nella forma matematica trovata indipendentemente da Born e Jordan, che consiste nel promuovere le variabili dinamiche classiche  $p, q$  ad operatori di cui era fissato il commutatore. Più in generale, Dirac mostrò che la quantizzazione consisteva nel passaggio da parentesi di Poisson a commutatori nel modo oggi familiare. Heisenberg stesso, nelle sue lezioni di Chicago, formula la regola di quantizzazione esattamente con il procedimento e perfino i simboli stessi usati da Dirac nel suo lavoro.

Dunque, per comprendere come è stata fondata la meccanica quantistica con il procedimento di Heisenberg, perfezionato da Born, Jordan e Dirac, dovremo familiarizzarci con i seguenti fatti:

1. Quella che Heisenberg chiama la “cinematica”, ovvero come un sistema venga descritto da tabelle (che diventeranno poi matrici) relative alle diverse grandezze fisiche (paragrafo 1 del lavoro di Heisenberg)
2. Come Heisenberg formula la sua generalizzazione della regola di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld; si tratta dunque di “spiegare” la sua illuminazione<sup>11</sup> (paragrafo 2 del lavoro di Heisenberg).

<sup>10</sup>Dirac, Heisenberg, Pauli e Fermi, costituisce il quartetto dei moschettieri della classe 1901–1902.

<sup>11</sup>La faccenda della illuminazione sembra fosse quasi un’abitudine. Anche Born ricorda a questo proposito (si veda van der Waerden, *Sources of Quantum Mechanics*, Dover, pagg. 36, 37): “After having sent Heisenberg’s paper to the *Zeitschrift für Physik* for publication. I began to ponder about his symbolic multiplication, and was soon so involved in it that I thought the whole day and could hardly sleep at night. For I felt there was something fundamental behind it ... And one morning ... I suddenly saw light: Heisenberg’s symbolic multiplication was nothing but the matrix calculus, well known to me since my student days from the lectures of Rosanes in Breslau.” Poi continua: “I found it by just simplifying the notation a little. Instead of  $q(n, n + \tau)$  ... I wrote  $q(n, m)$ , ( $q_{n,m}$  nelle presenti note) and rewriting Heisenberg’s form of Bohr’s quantum conditions I recognized at once its formal significance. It meant that the two matrix products  $pq$  and  $qp$  are not identical... closer inspection showed that Heisenberg’s formula gave only the value of the diagonal elements ( $m = n$ ) of the matrix  $pq - qp$ : it said that they were all equal and had the same value  $h/2\pi i$  (ovvero  $-i\hbar$ ). But what were the other elements?”. E allora Born capisce che gli

3. Come questa regola sia (sostanzialmente) equivalente al richiedere che valga la regola di commutazione  $pq - qp = -i\hbar$  (dove la matrice identità è stata denotata semplicemente con 1). È questo il contributo di Born–Jordan e di Dirac.

Dopo aver compiuto questi passi, nel prossimo capitolo dovremo comprendere il contributo di Schroedinger, che fissa l’attenzione sugli “stati” piuttosto che sulle “osservabili”, e inoltre descrive gli stati come funzioni definite (almeno nel caso di una sola particella) nello spazio fisico,<sup>12</sup> il quale è invece completamente assente nell’approccio iniziale di Heisenberg, Born e Jordan (metodo delle matrici). Infine dovremo pervenire alla formulazione assiomatica della meccanica quantistica, almeno nella forma che le fu data tra la fine degli anni 20 e i primi anni 30 da Dirac e von Neumann.

Tuttavia, prima di passare alla lettura dell’articolo di Heisenberg, sarà utile illustrare rapidamente, nel prossimo paragrafo, quale fosse il “problema angosciante” cui Heisenberg faceva riferimento, cioè quello di conciliare l’elettromagnetismo con le regole di quantizzazione di Bohr (o di Bohr–Sommerfeld) che erano state formulate dopo l’introduzione del *modello planetario dell’atomo* (Rutherford, 1911), mentre il problema sostanzialmente non si poneva nell’ambito dei modelli precedenti, alla Thomson. Dovremo anche ricordare come tale problema di eliminare le contraddizioni tra elettromagnetismo e quantizzazione fosse stato da Bohr in parte aggirato, e in parte superato, attraverso il suo principio di corrispondenza, che si applica solo nel caso limite “di grandi numeri quantici”. Saremo allora in grado di comprendere in quale modo Heisenberg introdusse la sua “riformulazione” (o generalizzazione) del procedimento di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld, che subito dopo divenne, nelle mani di Born Jordan e di Dirac, la regola di quantizzazione  $pq - qp = -i\hbar$ . La discussione di questi problemi ci condurrà spontaneamente ad esporre alcuni semplici richiami “tecnici” sulle variabili azione angolo.

---

elementi fuori diagonale debbono essere nulli, e dice *“I wrote the strange equation*

$$pq - qp = \frac{h}{2\pi i} .$$

Aggiunge poi: *But this was only a guess, and my attempts to prove it failed.*

<sup>12</sup>Questo aspetto viene lasciato cadere quando si passa a un sistema di più particelle, in cui la funzione d’onda di Schroedinger è ambientata nello spazio delle configurazioni, anziché nello spazio “fisico”. È questo un punto sul quale si svolgeranno molte discussioni in seguito.

## 2.2 Intermezzo. Il modello planetario dell'atomo dopo Rutherford. La quantizzazione alla Bohr–Sommerfeld, e richiami sulle variabili azione–angolo. Il principio di corrispondenza da Bohr a Born e Kramers.

**Il modello planetario di Rutherford, le regole di Bohr, e le difficoltà rispetto all'elettromagnetismo.** Tutti sappiamo che i modelli atomici furono rivoluzionati a seguito delle ricerche di Rutherford (1911), che misero in luce come l'atomo sia costituito da un nucleo centrale (con raggio dell'ordine di  $10^{-13}$  cm) avente carica positiva  $Z$  (numero atomico), attorno al quale ruotano  $Z$  elettroni (il cui raggio può addirittura pensarsi nullo), in maniera simile a quello che avviene nel caso dei pianeti orbitanti attorno al Sole.

Naturalmente nell'atomo si hanno forze Coulombiane anziché gravitazionali, e questo comporta una grande differenza, dovuta al fatto che le forze gravitazionali sono proporzionali al prodotto delle masse, mentre quelle Coulombiane sono proporzionali al prodotto delle cariche. La conseguenza è che nel caso gravitazionale le forze mutue tra i pianeti possono essere considerate come delle piccole perturbazioni rispetto alle forze dovute al Sole (e proprio per questo venne inventata, fino dai tempi di Newton e di Lagrange la *teoria delle perturbazioni*), mentre nel caso atomico le forze mutue sono dello stesso ordine di grandezza di quelle dovute al nucleo. Si pensi tipicamente al caso dell'atomo di Elio, con due elettroni ( $Z = 2$ ). Vedremo sotto la grande rilevanza di questo fatto

Questa rivoluzione introdusse però dei gravissimi problemi di principio, legati all'irraggiamento che secondo l'elettromagnetismo classico dovrebbe prodursi a seguito dei movimenti (necessariamente accelerati) degli elettroni. Ricordiamo infatti che la grande scoperta di Maxwell era stata appunto che delle correnti variabili nel tempo producono irraggiamento, il tipico e più semplice esempio essendo quello di una corrente hertziana (una carica oscillante come in una antenna), che aveva in effetti portato alla produzione concreta di onde elettromagnetiche, e doveva condurre poi alla radio, alla televisione,... Il punto cruciale è la formula di Larmor, secondo la quale ogni carica in moto irraggia una potenza (energia per unità di tempo) proporzionale al quadrato della sua accelerazione. Inoltre, se la carica compie un moto  $q(t)$  periodico di periodo  $T$ , vengono irraggiate sia la frequenza fondamentale  $\omega = 2\pi/T$ , sia tutte le armoniche (soprattanti) contenute nello sviluppo di Fourier della funzione  $q(t)$ .

Ora, prima di Rutherford questa proprietà non comportava alcun problema di principio. Perché si introducevano dei gradi di libertà "interni", corrispondenti ciascuno a una delle frequenze osservate (il primo caso, risalente ai tempi di Maxwell, è quello relativo alla dispersione anomala, ma poi vi

fu tutta la fenomenologia relativa alla spettroscopia, con le righe – o più in generale lo spettro – di assorbimento ed emissione caratteristiche di ogni sostanza). Dunque si assumeva che in ogni sostanza vi fossero atomi che potevano eseguire dei movimenti di tipo elastico – si pensi a molle descritte da oscillatori lineari, come degli oscillatori hertziani – proprio caratterizzati da quelle frequenze, sicché il modello era proprio costruito in maniera da soddisfare alle caratteristiche classiche dell'elettromagnetismo (si ricordi che per un oscillatore lineare non si presentano armoniche della fondamentale). In particolare, in corrispondenza degli stati di equilibrio delle variabili interne (oscillatori fermi) non si aveva alcun irraggiamento.

Ma dopo l'introduzione del modello planetario di Rutherford la situazione cambiò completamente. Anzitutto perché ogni elettrone, avendo un moto necessariamente accelerato, dovrebbe comunque perdere energia per irraggiamento e quindi cadere sul nucleo (problema della instabilità dell'atomo.<sup>13</sup> Inoltre, anche se si trascura l'irraggiamento che porta alla caduta e si considera un moto periodico, verrebbero irraggiate sia la frequenza fondamentale sia tutte le armoniche superiori, mentre le righe spettrali osservate non presentano tali caratteristiche: quando si osservano delle righe, in generale non si osservano le loro armoniche. Inoltre, fin dal 1908 era stato formulato il cosiddetto **principio di combinazione di Ritz–Rydberg**, secondo il quale se si osservano due righe con certe frequenze, allora in generale si osserva anche la riga con la frequenza somma, fatto di cui non si vedeva alcun corrispondente in elettromagnetismo.

Allora Bohr (1913) introdusse le sue regole, che ben conosciamo. Preso atto del fatto che il principio di Ritz è equivalente ad assumere che la frequenza di ogni riga si esprime come la differenza di due termini (detti *termini spettrali*), Bohr assume che esistono dei moti stazionari corrispondenti a certe energie  $E_n$ , che per decreto si svolgono senza irraggiamento. L'irraggiamento (o l'assorbimento) avverrebbe invece nella transizione tra due stati stazionari, con una frequenza  $\omega$  data dalla relazione  $\Delta E = \hbar\omega$ , assunta per analogia con la formula di quantizzazione di Planck. Ricordiamo anche che, in aggiunta a queste regole riguardanti le relazioni tra livelli di energia ed irraggiamento elettromagnetico, si aveva poi la regola di quantizzazione per le orbite, cui accenneremo fra un momento. Qui vogliamo mettere in evidenza come si capisca che queste regole siano state qualificate come disperanti, perché incompatibili con l'elettromagnetismo classico. Vedremo tuttavia fra un momento come si abbia invece compatibilità nella regione degli alti numeri quantici, fatto che costituisce il teorema di corrispondenza di Bohr per la frequenza, in seguito esteso alla intensità delle righe come *principio* di corrispondenza.

Per comprendere tale teorema dobbiamo pereliminarmente richiamare

---

<sup>13</sup>Nel secondo volume di Landau–Lifshitz, questo è lasciato come un esercizio per il lettore, il risultato essendo che l'elettrone cadrebbe in circa  $10^{-8}$  secondi.

l'ulteriore regola di Bohr, che riguardava il modo in cui venivano selezionate le orbite privilegiate quantizzate, lungo le quali per decreto non si aveva irraggiamento. Dobbiamo spiegare come tali regole siano formulate in termini di quantizzazione dell'azione, mediante la quale risulta poi quantizzata l'energia, e dobbiamo poi osservare come questo sia possibile solo per sistemi molto particolari, quelli che ammettono variabili azione–angolo.

Abbiamo già ricordato che nel caso dell'oscillatore armonico sia significativo, partendo dalle consuete variabili canoniche  $q, p$  di posizione e momento, introdurre due nuove coordinate canoniche  $I, \varphi$  dette variabili azione angolo, tali che l'hamiltoniana dipenda solo dall'azione, e anzi addirittura in maniera lineare:  $H(I, \varphi) = \omega I$ , dove  $\omega$  è una costante. Più in generale, avviene che nei sistemi che ammettono moti completamente ordinati e confinati si possono introdurre delle variabili azione angolo,  $I, \varphi$ , e l'hamiltoniana dipende solo dalle azioni,  $H = H(I)$ , in generale in modo nonlineare (ad esempio,  $H = cI^2$  per il rotatore). Allora il procedimento di quantizzazione consiste nel richiedere che ogni azione  $I$  debba essere quantizzata. Ad esempio nel caso di un solo grado di libertà si impone  $I = I_n = n\hbar$ . Di conseguenza risulta quantizzata l'energia:  $E_n = H(I_n)$ . Per quanto riguarda il teorema di corrispondenza per le frequenze, la formula rilevante è quella che esprime la frequenza orbitale classica nella forma

$$\omega(I) = \frac{\partial H}{\partial I} . \quad (2.2.1)$$

Questa si ottiene immediatamente dalle equazioni di Hamilton  $\dot{I} = -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0$  (sicché le azioni sono costanti del moto), e si ha  $\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial I}$ , ovvero gli angoli evolvono linearmente nel tempo con frequenza angolare  $\omega(I)$  data dalla 2.2.1).

Il fatto che si dovesse quantizzare l'azione era stato messo in luce particolarmente da Paul Ehrenfest, che aveva fatto presente come ciò potesse essere legato al noto fatto che l'azione è in casi significativi un invariante adiabatico (concetto che risaliva a Clausius, Helmholtz e Boltzmann).<sup>14</sup> Inoltre, nel 1911 era già stato fatto osservare da Nicholson che nel procedimento di quantizzazione dei moti atomici si doveva richiedere che “ *the angular momentum of an atom can only rise or fall by discrete amounts* ”, sicché fu spontaneo per Bohr introdurre l'ipotesi che lo stato fondamentale dell'atomo di idrogeno dovesse corrispondere ad un'orbita circolare con momento angolare uguale ad  $\hbar$  (si ricordi che il momento angolare ha proprio le dimensioni

<sup>14</sup>Ad esempio, Boltzmann ricordava l'esempio di una corda di uno strumento ad archi (violino, ma anche chitarra). Se si accorcia la lunghezza della corda, spostando il dito lungo la tastiera, come è ben noto aumenta la frequenza del suono, ma si constata anche che aumenta l'energia del suono. In effetti si trova che l'energia aumenta in maniera tale che il rapporto definente la corrispondente azione  $I = E/\omega$  rimane costante (è un invariante, adiabatico).

di una azione, e che nei moti circolari dell'elettrone nell'atomo di idrogeno l'energia è funzione del momento angolare orbitale).

**Richiami sulle variabili azione–angolo.** Per quanto riguarda le variabili azione–angolo basta qui ricordare quanto segue. Si considerano sistemi cosiddetti *integrabili* (in qualche modo i sistemi con moti completamente ordinati, come contrapposti ai sistemi con moti caotici): essi sono caratterizzati dal fatto che ammettono tante costanti del moto indipendenti quanti sono i gradi di libertà (con inoltre la proprietà che le costanti del moto siano in involuzione – le loro parentesi di Poisson mutue siano uguali a zero). Inoltre si richiede che tali sistemi presentino solo moti confinati (*bound states*), e non anche moti estendentisi all'infinito (stati di scattering)).

L'esempio paradigmatico è quello di ogni sistema a un grado di libertà con Hamiltoniana indipendente dal tempo (che dunque è una costante del moto), sicché il piano delle fasi con arbitrarie coordinate canoniche  $q, p$  è solcato da curve invarianti (le curve di livello dell'energia,  $H(q, p) = E$ ). Assumiamo inoltre che tali curve non si estendano all'infinito, ovvero siano tutte curve chiuse (ad esempio, non va bene la particella libera, con  $H = p^2/2m$ , per cui le curve di livello dell'energia sono le linee orizzontali  $p = \text{cost}$ ). In tal caso è spontaneo cercare un cambiamento di variabili in cui una delle nuove coordinate sia la energia stessa, o una sua funzione, e l'altra coordinata sia un angolo,  $\varphi$ . Nel caso dell'oscillatore armonico, si ha<sup>15</sup>

$$H = \frac{1}{2}\left(\frac{p^2}{m} + m\omega^2 q^2\right) = \frac{\omega}{2}\left(\frac{p^2}{m\omega} + m\omega q^2\right) = \omega \frac{P^2 + Q^2}{2} .$$

Verrebbe quindi spontaneo passare nel piano  $Q, P$  alle corrispondenti coordinate polari diciamo,  $r, \varphi$  con  $r = \sqrt{P^2 + Q^2}$ , ma tale trasformazione non è canonica perché non conserva l'area (ricordiamo che questa è condizione necessaria e sufficiente per la canonicità di una trasformazione, per sistemi a un solo grado di libertà). Si ha tuttavia

$$dQdP = r dr d\varphi = d\frac{r^2}{2} d\varphi ,$$

e dunque la trasformazione

$$(Q, P) \rightarrow (\varphi, I) , \quad I = \frac{Q^2 + P^2}{2}$$

è canonica. La nuova variabile  $I$  ha le dimensioni di una azione (energia x tempo), perché in generale è un'azione ogni variabile coniugata a un

---

<sup>15</sup>Si considerano trasformazioni canoniche, che nel caso di un grado di libertà sono definite dalla proprietà di conservare l'area, come avviene nel caso  $Q = m\omega q$ ,  $P = p/m\omega$  qui considerato.

angolo.<sup>16</sup> Inoltre,  $H$  è funzione dell'azione  $I$  perché si ha evidentemente

$$H(I) = \omega I$$

e dunque le equazioni di Hamilton si risolvono immediatamente, avendosi  $\dot{I} = 0$ ,  $\dot{\varphi} = \omega$  (=cost).

Il fatto che qui ci interessa è però che l'azione  $I$  definita sopra ha un chiarissimo significato geometrico, perché essa è uguale ad  $A/2\pi$  dove  $A$  è l'area racchiusa nel piano delle fasi da una curva di livello dell'energia, o equivalentemente da una curva di livello dell'azione  $I$ . D'altra parte il valore di tale area può essere espresso da un integrale curvilineo con riferimento a coordinate arbitrarie, come le variabili  $q, p$  originariamente considerate sopra, e si ha dunque

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint p dq = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} p(t) \dot{q}(t) dt = \frac{m}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \dot{q}(t)^2 dt \quad (2.2.2)$$

dove si è integrato lungo una soluzione  $q(t), p(t)$  delle equazioni di Hamilton, e si è usato  $p = m\dot{q}$  (ad esempio, caso del moto di una particella su una retta, con  $p = m\dot{q}$ ). Questa formula per l'azione svolgerà un ruolo fondamentale nel procedimento di quantizzazione di Heisenberg.

Altro esempio paradigmatico di sistema che ammette variabili angolo-azione è l'elettrone nell'atomo di idrogeno (meccanicamente analogo al caso di un pianeta attratto dal Sole), o gli atomi in cui si considera il moto di un elettrone periferico, su cui agisce sia il potenziale coulombiano del nucleo sia un potenziale descrivente in qualche maniera mediata l'azione degli altri elettroni "interni". Si noti bene che invece le variabili azione-angolo non esistono, sia per i moti di scattering dell'elettrone ad esempio nell'atomo di idrogeno (sono moti non confinati), sia (e questo è un fatto più rilevante) per il sistema dei due elettroni nell'atomo di elio, o più in generale per sistemi a più elettroni, perché in tal caso in generale non esistono integrali del moto in numero uguale al numero dei gradi di libertà. La difficoltà proviene dall'interazione repulsiva tra gli elettroni, che non è "piccola", ovvero non può essere trattata come una piccola "perturbazione" rispetto al sistema di  $n$  elettroni indipendenti soggetti solo all'azione del nucleo.<sup>17</sup>

Più in generale, considereremo il caso dei sistemi ad  $n$  gradi di libertà che siano integrabili (ammettano  $n$  costanti del moto in involuzione) e ammettano solo moti confinati. Allora si dimostra (teorema di Arnol'd-Liouville) che è possibile introdurre nuove coordinate  $I = (I_1, \dots, I_n)$ ,  $\varphi =$

<sup>16</sup>Più in generale si constata immediatamente che il prodotto  $pq = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} q$  ha le dimensioni di una azione. In particolare, se  $q$  è un angolo, adimensionale, allora  $p$  è una azione.

<sup>17</sup>Infatti Heisenberg aveva potuto trattare in precedenza la quantizzazione dell'atomo di elio solo in un caso limite, in cui un elettrone è molto vicino al nucleo e l'altro molto distante, e dunque il secondo elettrone - quello distante - poteva essere trattato sostanzialmente come una perturbazione dell'elettrone dell'atomo di idrogeno.

$(\varphi_1, \dots, \varphi_n)$  di cui  $n$  siano angoli e le altre, dunque, delle azioni, in modo che l'hamiltoniana  $H$  del sistema è funzione delle sole azioni,  $H = H(I)$ . Dunque le equazioni di Hamilton diventano  $\dot{I} = \frac{\partial H}{\partial I}$  sicché anzitutto si ha  $\dot{I} = 0$  (le azioni sono costanti del moto) e inoltre  $\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial I}$ . In conclusione la frequenza orbitale  $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_n)$ , ovvero la frequenza (o meglio l'insieme delle frequenze) con cui girano gli angoli  $\varphi$ , è data da<sup>18</sup>

$$\omega(I) = \frac{\partial H}{\partial I} .$$

Questa è la formula rilevante per quanto riguarda il teorema di corrispondenza per le frequenze.

**Il teorema di corrispondenza di Bohr per le frequenze.** Dopo questa lunga digressione sulle variabili azione–angolo, che avremmo potuto relegare in una appendice, torniamo ora al nostro argomento principale, riguardante le regole di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld, e la reinterpretazione che ne diede Heisenberg. Abbiamo già ricordato che il livello  $n$ -esimo  $E_n$  dell'energia è dato dalla regola di Bohr–Sommerfeld

$$E_n = H(I_n), \quad \text{con} \quad I = I_n = n\hbar$$

(la grandezza che si quantizza è l'azione  $I$ , e l'energia  $E = H(I)$  risulta allora quantizzata di conseguenza).

Secondo Bohr, viene irraggiata energia ad esempio nel passaggio da  $E_n$  ad  $E_{n-1}$  e la frequenza (angolare) emessa, diciamola  $\omega_{n,n-1}$  è data da

$$\omega_{n,n-1} = \frac{E_n - E_{n-1}}{\hbar} = \frac{H(n\hbar) - H((n-1)\hbar)}{\hbar} .$$

Ma, con uno sviluppo di Taylor al primo ordine, si ha

$$H(n\hbar) - H((n-1)\hbar) \simeq \hbar \frac{\partial H}{\partial I} ((n-1/2)\hbar) \equiv \hbar \omega(n-1/2) ,$$

– scriviamo  $\omega(n)$  per  $\omega(I = n\hbar)$  – e dunque si ha

$$\omega_{n,n-1} \simeq \omega(n-1/2) \equiv \frac{\partial H}{\partial I} (n-1/2) ,$$

<sup>18</sup>**Notazioni diverse per le variabili azione–angolo:**  $(I, \varphi)$  e  $(J, w) = (2\pi I, \varphi/2\pi)$ . Si tenga presente che, per quanto riguarda gli angoli, si può scrivere

$$\varphi(t) = \omega t \quad \text{oppure} \quad \varphi(t) = 2\pi \nu t .$$

e quindi vi sono due naturali scelte per le variabili  $q$ : gli angoli  $\varphi \in [0, 2\pi)$ , oppure gli “angoli ridotti”  $w = \varphi/2\pi \in [0, 1)$  – non si confonda  $w$  con  $\omega$ , nonostante la somiglianza tipografica!. Le variabili  $p$  ad essi coniugate (che in ogni caso sono azioni, con dimensioni energia x tempo) vengono denotate rispettivamente  $I$  e  $J$ , e si ha  $J = 2\pi I$ . Oggi si usano più comunemente le variabili  $I, \varphi$  (con la quantizzazione  $I_n = n\hbar$ ) mentre ai tempi di Bohr, Sommerfeld e Heisenberg si usavano piuttosto le variabili  $(J, w) = (2\pi I, \varphi/2\pi)$  (con la quantizzazione  $J = nh$ ). Dunque l'energia dell'oscillatore armonico si scriveva  $E_n = nh\nu$ , mentre oggi si scrive piuttosto  $E_n = n\hbar\omega$ .

ovvero la frequenza “spettrale” (la frequenza osservata)  $\omega_{n,n-1}$ , espressa secondo la regola di Bohr, coincide proprio con la frequenza orbitale  $\omega = \frac{\partial H}{\partial I}$ , calcolata in un punto intermedio tra le due orbite quantizzate.<sup>19</sup> Ora, è noto che, nella maggior parte dei sistemi, come tipicamente nell’atomo di idrogeno (ma non per l’oscillatore armonico), per  $n$  molto grandi le orbite si infittiscono fino a formare praticamente un continuo, per cui la frequenza orbitale viene a coincidere con quella spettrale prevista dalla regola di Bohr. Questo è sostanzialmente il **“Teorema di corrispondenza per le frequenze”**: *Per grandi numeri quantici, le frequenze spettrali corrispondenti alla regola di Bohr coincidono con quelle “orbitali” previste dall’elettromagnetismo classico* (le “frequenze degli elettroni pensati come antenne”).

Osserviamo infine che nella zona dei grandi numeri quantici  $n$  (cui il teorema di corrispondenza si riferisce) si ha  $\omega(n-1) \simeq \omega(n)$  e quindi possiamo formulare il teorema di corrispondenza nella forma  $\omega_{n,n-1} \simeq \omega(n)$ . Anzi, ripercorrendo il calcolo appena compiuto si vede immediatamente che vale la formula più generale<sup>20</sup>

$$\omega_{n,n-k} \simeq k\omega(n) , \quad \text{o anche} \quad \omega_{n,n-k} \simeq k\omega(n-k) , \quad (2.2.3)$$

cioè: *Nella zona dei grandi numeri quantici la “frequenza spettrale”  $\omega_{n,n-k}$  coincide con la  $k$ -esima armonica della frequenza orbitale fondamentale  $\omega(n)$ .* È questa la forma in cui il teorema di corrispondenza sarà utilizzato da Born, Kramers ed Heisenberg.

Ma Born ne fece una notevole estensione. Ricordando la relazione tra frequenza spettrale e differenza di energie, la relazione (2.2.3) può leggersi come una *prescrizione di quantizzazione*, come il passaggio

$$k\omega(n) \equiv k \frac{\partial}{\partial I} H(n) \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\hbar} (H_n - H_{n-k}) \simeq \frac{1}{\hbar} (H_{n+k} - H_n) .$$

Più in generale, per una qualunque funzione  $f(I)$  delle azioni, Born propose la regola di quantizzazione<sup>21</sup>

$$k \frac{\partial}{\partial I} f(n) \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\hbar} (f_n - f_{n-k}) \simeq \frac{1}{\hbar} (f_{n+k} - f_n) . \quad (2.2.4)$$

<sup>19</sup>Tra l’altro, è interessante ricordare che, nel primo lavoro del 1912 in cui Bohr proponeva la sua “teoria”, egli cominciò proprio con il proporre che la frequenza spettrale emessa fosse una media delle frequenze orbitali corrispondenti a tutte le orbite comprese fra quelle estreme che definivano “il salto”.

<sup>20</sup>Si ha infatti

$$E_n \simeq E_{n-k} + k\hbar \frac{\partial H}{\partial I} .$$

<sup>21</sup>Questa ambiguità tra le scelte  $f_n - f_{n-k}$  e  $f_{n+k} - f_n$  svolse un ruolo rilevante nel passaggio cruciale compiuto da Heisenberg per “riformulare” la quantizzazione alla Bohr–Sommerfeld nel suo nuovo modo. Si veda più avanti. A proposito di queste due scelte, si veda anche la successiva discussione delle variabili azione–angolo in ambito quantistico, data da Dirac nel suo secondo lavoro (paragrafo 4, a pag. 424 dell’edizione di van der Waerden.

Nelle parole di Born (1924, pag. 191 dell'edizione di van der Waerden)<sup>22</sup>, “*The assumption presents itself that the symbol  $k\frac{\partial}{\partial t}$  has to be replaced by a similar difference symbol divided by  $\hbar$* ” (con qualche nostro aggiustamento nelle notazioni). Born e Kramers applicarono tale procedimento di quantizzazione in relazione alle formule classiche che davano le intensità delle righe spettrali.<sup>23</sup>

A questo proposito un aspetto centrale del contributo di Heisenberg consistette nel comprendere che anche le ampiezze (piuttosto che il loro modulo al quadrato, ovvero le intensità) hanno significato fisico, e che dunque proprio ad esse dovesse applicarsi il procedimento di quantizzazione (nella forma di Born). Invece Born aveva esplicitamente assunto che si dovessero quantizzare solo le intensità e non le ampiezze. In tal modo Heisenberg riuscì a superare lo scoglio fondamentale che si presentava, ovvero dare una generalizzazione del procedimento di Bohr–Sommerfeld, che permettesse di quantizzare anche i sistemi per cui non si potevano introdurre le variabili azione–angolo, come tipicamente la particella libera e l’atomo di Elio.<sup>24</sup>

### 2.3 La nuova “cinematica” di Heisenberg; le matrici come “rappresentativi” di grandezze osservabili.

Il paragrafo 1 del lavoro di Heisenberg si legge abbastanza bene, anche se in effetti la lettura può avvenire a livelli alquanto diversi. Heisenberg, ispirandosi al procedimento di Einstein a proposito dell’ introduzione della relatività ristretta (ma Einstein fece notare ad Heisenberg, in maniera alquanto

<sup>22</sup>Vedi anche Kramers, pag 200 di van der Waerden.

<sup>23</sup>In effetti, un principio di corrispondenza esteso dalle frequenze alle ampiezze era già stato formulato da Bohr stesso nel 1918. Prendiamo da Whittaker pag 131–132. “*Bohr now extended this theorem by assuming that there is a relation between the intensity of the spectral line and the amplitude of the corresponding term in the classical multiple–Fourier expansion: in fact, that the transition probability associated with the genesis of the spectral line contains a factor proportional to the square of the corresponding coefficient in the Fourier series. Moreover, he extended this correspondence–principle for intensities by assuming its validity non only in the region of high–quantum numbers but over the whole range of quantum numbers*”, so that (nelle parole stesse di Bohr) “*if any term in the classical multiple–Fourier expansion is absent, the spectral line, which corresponds to it according to the correspondence–theorem for frequencies, will also be absent*”. Si tratta del **principio di selezione**. E Whittaker continua: “*He postulated also that the polarization of the emitted spectral line may be inferred by the nature of the conjugated classical vibration*” (Bohr, 1923). ... “*An extensive memoir by Kramers supplied convincing evidence of the validity of Bohr correspondence–principle for the calculation of the intensity of spectral lines: while Kossel and Sommerfeld showed that the deductions from the selection principle were confirmed by experiment in the case of many different kinds of atoms.*”

<sup>24</sup>Più in generale, i sistemi a più elettroni che potevano essere trattati solo nell’ approssimazione in cui si trascura l’ interazione mutua tra gli elettroni, riducendosi a un sistema ad un corpo per ogni elettrone.

ferma e piuttosto dura, che non apprezzava tale analogia.<sup>25</sup> insiste sul fatto che vuole sbarazzarsi di concetti come il movimento  $q(t)$  (o la traiettoria) di un elettrone e fare riferimento solo alle quantità osservabili. Noi a questo proposito (lo diciamo con molta discrezione) tenderemmo piuttosto ad essere d'accordo con Einstein (perché in effetti Heisenberg continuerà a parlare del movimento delle particelle, solo inteso in senso quantistico). Ma se si supera la lettera delle parole e si va alla sostanza, si capisce bene quello che Heisenberg compie. Egli considera come quantità rilevanti le righe spettrali e le loro intensità, anzi le loro “ampiezze”, quantità complesse il cui modulo al quadrato fornisce le intensità, osservando però che sono rilevanti anche le loro fasi, come avviene in meccanica quantistica ma già prima avveniva comunemente in ottica. Si tenga presente che si ammetteva che le intensità fossero proporzionali all’ “probabilità di transizione” introdotte nel 1916 da Einstein.<sup>26</sup>

Il punto cruciale nel procedimento di Heisenberg è il ruolo del principio di Rydberg–Ritz (1908), secondo il quale la frequenza angolare  $\omega$  di ogni riga è individuata da due numeri, diciamo  $n$  ed  $m$  (anche se in generale ognuno di questi due numeri sta per un insieme di più numeri – si pensi ai numeri quantici  $n, l$  ed  $m$  che individuano un livello dell’atomo di idrogeno), e si ha

$$\omega_{mk} + \omega_{kn} = \omega_{mn} \quad (2.3.1)$$

Questo è equivalente a dire che ogni frequenza spettrale (la frequenza osservata) è esprimibile come la differenza di due termini (*terms*)  $T_n, T_m$ , e corrisponde alla regola di Bohr secondo cui ogni riga è associata alla transizione tra due livelli  $E_n, E_m$ :

$$\omega_{nm} = T_n - T_m = \frac{E_n}{\hbar} - \frac{E_m}{\hbar} = \frac{E_n - E_m}{\hbar} \quad (2.3.2)$$

(si tenga presente che le frequenze così definite hanno valori sia positivi che negativi, anzi si ha  $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$ ).<sup>27</sup> D'altra parte, il procedimento di Bohr appariva ibrido, perché da una parte faceva riferimento a concetti classici (le orbite corrispondenti ai livelli  $E_n$ ), mentre dall'altra doveva ammettere, contro l'elettromagnetismo classico, che in corrispondenza delle orbite quantizzate non si avesse irraggiamento di energia. Dunque Heisenberg rinuncia

<sup>25</sup>Si veda Heisenberg, *Encounters with Einstein*.

<sup>26</sup>Questo costituiva il contributo fondamentale dato da Einstein, nel lavoro in cui aveva mostrato come la legge di Planck corrisponda all'equilibrio tra emissione spontanea, ed emissione ed assorbimento stimolati dalla radiazione, in cui vennero introdotti i celebri fattori  $A$  e  $B$ .

<sup>27</sup>Questo è un punto cruciale, legato al fatto che Heisenberg considera come quantità fisiche le ampiezze complesse anziché limitarsi a considerare i loro moduli al quadrato (le corrispondenti intensità). Infatti, sviluppando una grandezza in serie di Fourier in forma complessa, del tipo  $x(t) = \sum_k x_k \exp(ik\omega t)$ , si hanno “frequenze” sia positive che negative. Ad esempio, nel caso di un'orbita periodica con frequenza fondamentale  $\omega$  lo spettro è dato da  $k\omega$  con  $k$  intero relativo.

a parlare delle orbite corrispondenti a tali stati (riappariranno in seguito i livelli energetici, come autovalori dell'energia, con i corrispondenti autovettori od autostati, che prendono il posto degli stati classici, ma in qualche modo "privati" delle corrispondenti orbite) e si limita a parlare delle righe osservate. In altri termini, Heisenberg rinuncia alle frequenze orbitali e si comporta come se il sistema (l'atomo, la molecola) fosse costituito da *oscillatori virtuali* – questo era il nome introdotto in un lavoro di Bohr, Kramers e Slater – oscillanti proprio alle frequenze spettrali osservate  $\omega_{nm}$  (esattamente come si faceva prima dell'introduzione del modello planetario di Rutherford).<sup>28</sup>

Dunque Heisenberg ammette che il sistema in studio sia "rappresentato", nella sua globalità, dall'insieme di tutte le possibili righe, con le corrispondenti frequenze  $\omega_{mn}$  (con due indici, quindi una tabella), e ad ogni riga ( $mn$ ) sia associata una ampiezza complessa  $a_{mn}$ , e quindi disponiamo di una tabella, a priori infinita, di ampiezze. Ma a quale grandezza fisica dell'elettrone deve pensarsi associata questa tabella?

Si ha qui un passaggio cruciale, dal mondo del campo elettromagnetico (ampiezze o intensità delle righe) al mondo della meccanica. Proprio per questo Heisenberg parla a tale proposito di "cinematica", come cinematica dell'elettrone, indipendente dal campo, che in qualche modo viene eliminato. L'elemento che permette di sostituire il campo con una grandezza puramente meccanica sta nella osservazione che, in tutte le formule fondamentali che si incontravano, il campo emesso da un atomo risulta proporzionale al momento di dipolo elettrico dell'atomo. Considerando come prototipo il caso semplice dell'atomo di idrogeno, tale momento di dipolo è nient'altro che  $-eq(t)$  dove  $q$  è la posizione  $q$  dell'elettrone rispetto al nucleo. Dunque tutto si riduce ad introdurre l'analogo quantistico della funzione  $q = q(t)$ , quantità di tipo puramente "meccanico".

Dunque Heisenberg prende come quantità meccanica rilevante per l'elettrone il suo momento di dipolo elettrico, e dunque la sua posizione  $q = q(t)$ , e compie il salto di considerare la corrispondente "tabella"  $q_{mn}(t)$  "rappresentativa" (questa è la parola che egli usa) del movimento  $q(t)$  dell'elettrone.<sup>29</sup> A questo punto dell'esposizione, al fine di appoggiare le idee, potrebbe forse essere utile anticipare la conclusione, leggendo Heisenberg alla luce della futura meccanica quantistica, come venne effettivamente compiuto da Schroedinger nel 1926). Il lettore accorto dovrebbe poi cercare di

<sup>28</sup>Abbiamo già osservato che questo atteggiamento (la "ideologia" del primo paragrafo del lavoro di Heisenberg) di considerare solo le quantità osservabili, era in effetti stato adottato anche esplicitamente da Born e Kramers. Come vedremo, il contributo di Heisenberg consistette nel comprendere che le grandezze fondamentali da quantizzare sono le ampiezze complesse (grandezze già fondamentali in ottica) e non i loro moduli quadrati (le intensità).

<sup>29</sup>Si noti che nel lavoro di Heisenberg il nome della grandezza è  $a$ , anziché  $q$  o  $x$ , come se in qualche modo la tabella si riferisse ancora all'ampiezza del campo, che egli denotava con la lettera  $a$ .

sbarazzarsi di questa lettura, e provare a leggere direttamente nelle parole di Heisenberg il suo percorso.

A posteriori, le cose vanno nel modo seguente. Sia dato un sistema, ad esempio un oscillatore armonico. Data l'hamiltoniana, come operatore in uno spazio di Hilbert, consideriamone gli autovettori  $u_n$  con autovalori  $E_n$ , cioè sia

$$Hu_n = E_n u_n .$$

Allora all'osservabile  $q$ , posizione della particella, considerata come operatore, è associata la matrice

$$q_{mn} = (u_m, q u_n) \quad (2.3.3)$$

dove  $(\cdot, \cdot)$  denota il prodotto scalare.

Bene. Heisenberg sta dicendo che alla posizione della particella corrisponde una tabella  $q_{mn}$ , la quale a sua volta sarà in qualche modo connessa alla tabella "sperimentale" delle ampiezze  $a_{mn}$  del campo. Anzi, accanto agli autovettori  $u_n$  dell'energia, si possono considerare i corrispondenti "stati stazionari" soluzioni dell'equazione di evoluzione temporale di Schroedinger  $i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = H\psi$ , e dunque definiti da

$$\psi_n(t) = u_n e^{-iE_n t/\hbar} , \quad (2.3.4)$$

e allora alla posizione  $q$  è associata anche la tabella dipendente dal tempo

$$q_{mn}(t) = (\psi_m(t), q \psi_n(t)) = q_{mn} e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} = q_{mn} e^{i\omega_{mn}t} , \quad (2.3.5)$$

con  $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ , secondo la regola di Bohr (2.3.2). Si tratta della tabella degli "oscillatori virtuali" che oscillano non con le frequenze orbitali  $\frac{\partial H}{\partial I}$  ma con le frequenze delle righe osservate. Si noti che spesso negli scritti di Heisenberg il fattore temporale esponenziale viene sottinteso, e la tabella  $q_{mn}(t)$  viene semplicemente indicata con  $q_{mn}$ .

Effettivamente, anche a posteriori Heisenberg si esprimerebbe in maniera diversa, dicendo che le osservabili (ad esempio la "posizione"  $q$ ) evolvono secondo la legge

$$q(t) = e^{iHt/\hbar} q e^{-iHt/\hbar} ,$$

e quindi si avrebbe

$$q_{mn}(t) = (u_m, q(t) u_n) .$$

Si tratta di usare la *Heisenberg picture* (descrizione di Heisenberg) anziché la *Schroedinger picture* per l'evoluzione temporale: evolvono le osservabili e resta fisso lo stato.

Occorre ora tirarsi fuori da quello che sappiamo, dal pensare  $u_n$  come una funzione della posizione, nel modo che ci è familiare dopo Schroedinger, perché qui è tutto algebrico. Anzi, anche gli autovettori  $u_n$  dell'energia restano nella penna, e ci si muove al livello della tabella, pensata in astratto.

Seguendo Heisenberg, ammettiamo dunque che ad ogni grandezza  $q$  relativa alla particella (o più in generale relativa al sistema meccanico in studio) sia associata una tabella  $q_{mn}(t)$  dipendente dal tempo, in cui ogni elemento della tabella (che poi diventerà "elemento di matrice") ha un corrispondente

fattore temporale  $\exp(i\omega_{mn}t)$ , e scriveremo, seguendo Heisenberg (che però denota la nostra  $q$  con la lettera  $x$ ),

$$q_{mn}(t) = q_{mn}e^{i\omega_{mn}t} \quad (2.3.6)$$

Questa tabella, dice Heisenberg, è il “rappresentativo” della osservabile. Poiché trattiamo con grandezze reali, ammetteremo che si abbia una matrice hermitiana, ovvero con la proprietà

$$q_{nm} = q_{mn}^*$$

dove l’asterisco denota il complesso coniugato, analogamente al modo in cui in una serie di Fourier complessa che rappresenta una grandezza reale,  $q(t) = \sum_k q_k \exp(ik\omega t)$  si ha  $q_{-k} = q_k^*$ . Il passo successivo che compie Heisenberg consiste nel trovare la regola per la moltiplicazione delle tabelle, che Born in seguito (si ricordi quando dice “*I suddenly saw light*”) riconobbe come l’operazione per la moltiplicazione di due matrici (ovvero dei rappresentativi di due operatori in una base fissata, qui la base degli autovettori  $u_n$  dell’energia).

Heisenberg si domanda: se alla grandezza  $q$  associamo la tabella  $q_{mn}$ , allora quale tabella dobbiamo associare alla grandezza  $q^2$ ? Una ragione era senz’altro che egli voleva studiare il problema dell’oscillatore anarmonico, con equazione del tipo  $\ddot{q} + \omega_0^2 q + q^2 = 0$ . La risposta gli viene messa a disposizione dal principio di Rydberg–Ritz, e dal fatto che a ogni elemento  $(mn)$  della tabella è associata una fase temporale  $i\omega_{mn}t$ . Infatti, in virtù del principio di Rydberg–Ritz, al prodotto dei due elementi  $(mk)$ ,  $(kn)$  è allora associata la fase

$$i\omega_{mk}t + i\omega_{kn}t = i(\omega_{mk} + \omega_{kn})t = i\omega_{mn}t .$$

Quindi avviene che se si definisce la tabella di  $(q^2)(t)$  in termini di quella di  $x(t)$  mediante la relazione

$$(q^2)_{mn}(t) = \sum_k q_{mk}(t)q_{kn}(t)$$

(appunto il consueto prodotto, righe per colonne, di matrici) allora ogni elemento  $(mn)$  di  $q^2(t)$  ha la medesima fase temporale del corrispondente elemento  $(mn)$  della tabella  $q_{mn}(t)$ . Questo fatto va d’accordo con l’intuizione di base che gli oscillatori virtuali aventi le frequenze spettrali  $\omega_{mn}$  “sperimentali” siano una proprietà globale del sistema, e quindi significativa per ogni osservabile.

Dunque la tabella  $q_{mn}$  è diventata una matrice rappresentante la grandezza  $q$  (e pertanto implicitamente un operatore), e  $q^2$  è il corrispondente operatore prodotto di  $q$  con  $q$ . Così anche sappiamo ora definire  $q^3$  (è proprio questo il secondo esempio considerato da Heisenberg) e più in generale il

prodotto di grandezze diverse, o le funzioni di una grandezza (definite mediante polinomi, attraverso sviluppo in serie). Heisenberg osserva subito che per due grandezze diverse  $A, B$  si avrà in generale  $AB - BA \neq 0$ . Questa osservazione, lasciata cadere da Heisenberg, verrà poi portata a compimento da Born–Jordan e da Dirac.

In conclusione, nel primo paragrafo del suo lavoro Heisenberg assume esplicitamente che, per un determinato sistema con righe spettrali  $\omega_{mn}$ , ogni grandezza meccanica  $q$  sia individuata (rappresentata) da una matrice  $q_{mn}(t)$  della forma (2.3.6). Inoltre egli enuncia le seguenti **regole di corrispondenza**. Consideriamo il corrispondente sistema classico (che si suppone ammettere variabili azione angolo) e un suo moto quasiperiodico  $q(n, t)$  individuato dal valore  $I = n\hbar$  dell'azione. Dunque la variabile classica  $q(n, t)$ , anch'essa quasiperiodica, avrà uno sviluppo di Fourier

$$q(n, t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} q_k(n) e^{ik\omega(n)t}, \quad \text{con} \quad q_{-k}(n) = q_k^*(n).$$

Allora Heisenberg generalizza la regola di corrispondenza di Bohr sulle frequenze, assumendo

$$k\omega(n) \rightarrow \omega_{n, n-k} \quad (2.3.7)$$

$$q_k(n) \rightarrow q_{n, n-k}, \quad (q_{nk} = q_{kn}^*) \quad (2.3.8)$$

$$k \frac{\partial}{\partial I} f(n) \rightarrow \frac{1}{\hbar} (f_{n+k} - f_n). \quad (2.3.9)$$

La prima regola è semplicemente un caso particolare della terza, relativa alla scelta  $f = H$  della funzione  $f$  (si ricordi  $\omega = \frac{\partial H}{\partial I}$  e  $\omega_{mn} = E_m - E_n$  con  $E_m = H(m\hbar)$ ). La prima e la seconda sono ben descritte nelle parole di Heisenberg (dalle lezioni di Chicago) “*There is therefore asymptotic agreement ... between the spectral frequency  $\omega(n, n-k)$  and the harmonic  $k\omega(n)$  in the  $n$  or  $n-k$  stationary state.*” E aggiunge: “*Since the harmonic elements of the matrices of quantum mechanics represent the spectral lines, this suggests a general coordination between the matrix element  $q_{n, n-k} \exp(i\omega_{n, n-k}t)$  and the harmonic  $k$  in the  $n$  stationary state. More briefly:*

$$q_{n, n-k} e^{i\omega_{n, n-k}t} \text{ corresponds to } q_k(n) e^{ik\omega(n)t} \quad (2.3.10)$$

*in the region of large quantum numbers*”. La (2.3.8) costituisce il punto originale di Heisenberg. Si osserva che per grandi  $n$  e piccoli  $k$  si ha  $\omega_{n, n-k} \simeq k\omega(n)$  e anche  $q_{n, n-k} \simeq q_k(n)$  (teorema di corrispondenza per le frequenze), e allora si estende tale teorema ad assumere il ruolo di principio, mediante la prescrizione che le quantità classiche  $q_k(n), k\omega(n)$  vadano trasformate in (fatte corrispondere a) due tabelle (labellate da indici  $m, n$ ), rispettivamente proprio con elementi  $q_{n, n-k}$  ed  $\omega_{n, n-k}$ . Naturalmente, la quantità  $|q_{n, n-k}|^2$  verrà poi interpretata come proporzionale alla probabilità di transizione tra lo stato  $E_n$  e lo stato  $E_{n-k}$  perché classicamente la corrispondente quantità  $|q_k(n)|^2$  era nota essere proporzionale all'intensità relativa alla frequenza  $k\omega(n)$ .

## 2.4 La “regola di somma” di Heisenberg come nuova regola di quantizzazione, anche per sistemi che non ammettono variabili azione–angolo

Resta infine il problema (esprimendoci nella terminologia oggi a noi familiare) di come si debbano pensare definiti questi operatori (Heisenberg dice tabelle) corrispondenti alle varie grandezze fisiche. Questo è il secondo punto cruciale nella costruzione della “cinematica” di Heisenberg. Qui egli traduce il principio di corrispondenza di Bohr–Sommerfeld come generalizzato da Born, e con una intuizione che ha quasi del miracoloso lo applica alle ampiezze. Il suo percorso, completato poi da Born–Jordan e da Dirac, consiste nel comprendere come gli operatori risultano definiti se si assegnano le loro regole di commutazione. Nel caso più semplice di un solo grado di libertà, riferendosi alle grandezze posizione  $q$  e momento  $p = m\dot{q}$ , si richiede che valga<sup>30</sup>

$$qp - pq = i\hbar . \quad (2.4.1)$$

Vediamo dunque come Heisenberg pervenne alla sua “invenzione”. Anzitutto egli riconsidera il familiare procedimento di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld in cui si pone uguale ad  $n\hbar$  l’azione del sistema. Egli esprime l’azione nel modo di Sommerfeld, che era poi quello classico della teoria delle perturbazioni della meccanica celeste. Egli considera il caso semplice ma significativo di un sistema a un solo grado di libertà, anzi addirittura il caso del moto di un punto su una retta, sicché  $p = m_0\dot{q}$  (denotiamo qui con  $m_0$  anziché con  $m$  la massa, per evitare confusione con l’indice intero  $m$ ). Ammettendo inoltre che le curve di livello dell’energia  $H(q, p) = E$  nel piano delle fasi racchiudono un’area finita, come ricordato sopra l’azione  $I$  risulta essere proprio uguale a tale area divisa per  $2\pi$ , e dunque è data da

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint pdq = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} p\dot{q}dt = \frac{m_0}{2\pi} \int_0^{2\pi/\omega} \dot{q}^2 dt$$

dove  $q(t)$  è il moto che si svolge lungo la curva di energia costante ad un fissato valore  $E$ , mentre  $\omega$  è la corrispondente frequenza angolare orbitale (e dunque  $2\pi/\omega$  il corrispondente periodo). Tale moto periodico può dunque esprimersi con una serie di Fourier nella forma

$$q(t) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} q_k e^{ik\omega t} \quad (q_{-k} = q_k^*) ,$$

<sup>30</sup>È interessante osservare che Born e Jordan, appena stabilita la relazione di quantizzazione (2.4.1), osservano subito che essa comporta che gli operatori  $q$  e  $p$  agiscono su *un* spazio di dimensione infinita. Infatti negli spazi di dimensione finita è ben noto che vale Traccia  $AB$ =Traccia  $BA$ , e quindi la traccia del primo membro della (2.4.1) darebbe 0, mentre la traccia del secondo membro darebbe  $n$ , se  $n$  è la dimensione dello spazio su cui agiscono gli operatori. Molto spesso, lo studente scopre questo fatto piuttosto tardi, e come se fosse un fatto accidentale.

sicché

$$\dot{q}^2 = -\omega^2 \sum_{k,l} kl q_k q_l e^{i(k+l)\omega t}$$

Si noti che qui tutto dipende parametricamente da  $I_n$  (o semplicemente da  $n$ ), perché si sta considerando un'orbita di riferimento, corrispondente a un fissato valore  $I = I_n = n\hbar$  dell'azione  $I$ , e potremo quindi denotare il movimento come  $q = q(n, t)$ . Quindi Heisenberg associa esplicitamente l'indice  $n$  sia alla frequenza orbitale, scrivendo  $\omega(n)$ , sia ai coefficienti, che denota con  $q_k(n)$ , del movimento considerato  $q(n, t)$ , e scrive dunque ad esempio

$$\dot{q}^2(n, t) = -\omega^2(n) \sum_{k,l} q_k(n) q_l(n) kl e^{i(k+l)\omega(n)t} .$$

Resta ora da calcolare l'integrale  $\int_0^{2\pi/\omega} e^{i(k+l)\omega t} dt$ . Evidentemente, data la periodicità dell'esponenziale, l'integrale è sempre nullo tranne che per  $l = -k$  (quando si annulla l'esponente), nel qual caso vale  $2\pi/\omega$ :

$$\int_0^{2\pi/\omega} e^{i(k+l)\omega t} dt = \frac{2\pi}{\omega} \delta_{k,-l} ,$$

e dunque si ottiene (si ricordi  $q_{-k} = q_k^*$ , sicché  $q_k q_{-k} = |q_k|^2$ )

$$I_n = m_0 \omega(n) \sum_{k=-\infty}^{+\infty} k^2 |q_k(n)|^2 . \quad (2.4.2)$$

A questo punto Heisenberg compie il suo salto, in base ad una motivazione che commenteremo qui sotto. Egli considera la definizione dell'azione  $I = (1/2\pi) \oint p dq$  e la si deriva rispetto ad  $I$  (le derivate rispetto ad  $I$  entravano in moltissime formule che ricorrevano continuamente; l'esempio centrale sarà ricordato più sotto), e scrive dunque

$$1 = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial}{\partial I} \oint p dq = m_0 \frac{\partial}{\partial I} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \omega(I) |q_k(I)|^2 k^2 ,$$

o anche, fissando un valore quantizzato dell'azione  $I = n\hbar$  corrispondente ad un'orbita di riferimento, e ridistribuendo i fattori  $k$ ,

$$1 = m \sum_{k=-\infty}^{+\infty} k \frac{\partial}{\partial I} [k\omega(n) |q_k(n)|^2] \quad (2.4.3)$$

(si tratta proprio della (2.4.6) di Heisenberg, riportata sotto, ricordando  $I = n\hbar$ ). Si noti che in questa formula i fattori  $k \cdot k$  sono stati ridistribuiti proprio nel modo richiesto per applicare le regole di corrispondenza, che

riguardano le formazioni  $k\omega(n)$  e  $k\frac{\partial}{\partial I}$ . Si applicano dunque le tre regole di corrispondenza (2.3.7– 2.3.9) e si ottiene subito la relazione

$$\hbar = 2m_0 \sum_{k=0}^{+\infty} \{ |q_{n+k,n}|^2 \omega_{n+k,n} - |q_{n,n-k}|^2 \omega_{n,n-k} \} . \quad (2.4.4)$$

che costituisce la “regola di quantizzazione di Heisenberg”.<sup>31</sup> Si noti che la somma è estesa ora solo ai  $k$  nonnegativi. In effetti ogni termine della somma è simmetrico rispetto allo scambio  $k \rightarrow -k$  sicché ci si può restringere ai soli  $k$  nonnegativi, pur di moltiplicare per il fattore 2.<sup>32</sup>

Le parole di Heisenberg sono le seguenti. Egli considera l'integrale definita l'azione  $I = (1/2\pi) \oint pdq$  e dice: “*In the earlier theory this phase integral was usually set equal to an integer multiple of  $h$ , i.e., equal to  $nh$  (per noi  $n\hbar$ ), but such a condition does not fit naturally into the dynamical calculation. It appears, even when regarded from the point of view adopted hitherto, arbitrary in the sense of the correspondence principle, because from this point of view the  $J$  (per noi  $I$ ) are determined only up to an additive constant as multiples<sup>33</sup> of  $h$ . Instead of (uguagliare ad  $nh$  la grandezza) (2.4.2) (che è la formula (14) del lavoro di Heisenberg), it would be more natural to write – qui scriviamo  $\hbar$  in luogo di  $h/2\pi$ ,  $k$  in luogo di  $\alpha$ ,  $q$  in luogo di  $a$  –*

$$\frac{d}{dn} n\hbar = \frac{1}{2\pi} \frac{d}{dn} \oint m_0 |\dot{q}|^2 dt \quad (2.4.5)$$

that is (formula (15) di Heisenberg)<sup>34</sup>

$$\hbar = m \sum_{k=-\infty}^{+\infty} k \frac{d}{dn} (k\omega(n) |q_k(n)|^2) . \quad (2.4.6)$$

....

<sup>31</sup>Nota per gli autori: nella formula data da Heisenberg sopra la sua formula 20, non si capisce un fattore 1/4.

<sup>32</sup>A dire il vero, questo forse non è del tutto corretto, perchè va senz'altro bene nel caso di un solo grado di libertà, in cui  $k$  è un intero relativo. mentre sembrerebbe non essere corretto nel caso di più gradi di libertà, in cui  $k = (k_1, \dots, k_n)$  con  $k_i$  interi relativi.

<sup>33</sup>Presumibilmente, Heisenberg si riferisce al fatto, che abbiamo già messo in luce, che nel teorema di corrispondenza per le frequenze si ha

$$\omega(n) \simeq \omega_{n,n-k} , \quad \text{ma anche} \quad \omega(n) \simeq \omega_{n,n+k} .$$

Ma è anche verosimile che Heisenberg sia partito dalla formula di Kramers (che discuteremo nel prossimo paragrafo) in cui entra la derivata parziale  $k\frac{\partial}{\partial I}$  di una espressione analoga a quella che qui stiamo considerando.

<sup>34</sup>Noi abbiamo cambiato le notazioni. Abbiamo indicato con  $k$  l'indice che Heisenberg denota con  $\alpha$ , e con  $q$  la sua variabile  $a$  (coefficienti della serie di Fourier).

We have to admit that only equation (2.4.6) has a simple quantum-theoretical **reformulation**<sup>35</sup> which is related to Kramer's dispersion theory:

$$\hbar = 2m \sum_{k=0}^{+\infty} \{ |q_{n,n+k}|^2 \omega_{n,n+k} - |q_{n,n-k}|^2 \omega_{n,n-k} \}. \quad (2.4.7)$$

In effetti, questa formula data da Heisenberg differisce dalla (2.4.4) data da noi sopra, per un segno nella frequenza al primo termine a destra. Infatti, per quanto riguarda il fattore con il modulo al quadrato non si ha differenza, perché per la hermiticità della matrice si ha

$$|q_{n,n+k}|^2 = q_{n,n+k} q_{n,n+k}^* = q_{n+k,n}^* q_{n+k,n} = |q_{n+k,n}|^2.$$

Ma la differenza rimane nel fattore coinvolgente la frequenza, perché si ha  $\omega_{n,n+k} = -\omega_{n+k,n}$ . Comunque, la formula da noi data sopra è proprio quella che viene concretamente usata da Heisenberg due pagine dopo, ed anche quella che fornisce la regola di quantizzazione nella fondamentale forma di Born e Jordan, che fissa il commutatore di  $p$  e  $q$ .<sup>36</sup>

Dunque, la formula (2.4.4) è proprio quella che Heisenberg sceglie per generalizzare la regola di quantizzazione di Bohr  $I = n\hbar$ . Infatti, poco dopo egli osserva che questa equazione, insieme con l'equazione di moto  $\ddot{q} + f(q) = 0$ , “contains a complete determination not only of the frequencies and energy values, but also of the quantum theoretical transition probabilities.” Quantità che infatti egli calcola nel paragrafo successivo (il paragrafo 3). Questa è dunque la nascita della meccanica quantistica.

Si noti bene che la prescrizione di quantizzazione (2.4.4) di Heisenberg, che poi diventerà la regola di commutazione tra  $p$  e  $q$ , è stata inventata riformulando (Heisenberg dice nel titolo tedesco dell'articolo *reinterpreto*) la classica regola di Bohr-Sommerfeld  $(1/2\pi) \oint p dq = n\hbar$ . Ora, questa faceva riferimento anzitutto all'azione, per un sistema che ammetteva variabili azione-angolo (ovvero un sistema integrabile, che è una classe di sistemi eccezionale, e non tipica), ma comunque espressa come integrale coinvolgente coordinate arbitrarie  $p$ ,  $q$  nello spazio delle fasi. Invece la condizione di quantizzazione di Heisenberg coinvolge variabili canoniche  $p$  e  $q$  arbitrarie,

<sup>35</sup>Infatti il titolo de lavoro di Heisenberg è “*Über quantentheoretische Umdeutung kinematiker und mechanischer Beziehungen*”, ovvero “*Quantum Theoretical Re-Interpretation of kinematical and mechanical relations*”.

<sup>36</sup>Si sarebbe tentati di dire che ci troviamo banalmente davanti ad un errore di stampa, ma forse si tratta invece in un certo senso di una imprecisione di linguaggio, perché nella sua formula appare una grandezza  $\omega$  che egli non ha mai prima definito. Ovviamente si tratta della frequenza, che però fin qui egli aveva sempre denotato con  $\nu$ . Evidentemente egli faceva riferimento alle formule di Kramers, Thomas e Kuhn, e potrebbe avere mescolato le notazioni. La imprecisione potrebbe forse spiegarsi considerando che gli autori citati prendevano sempre le frequenze soltanto positive, mentre Heisenberg prendeva le frequenze sia positive che negative, con  $\omega_{mn} = -\omega_{nm}$ , e questa potrebbe essere la origine della ambiguità nella formula di Heisenberg

senza più fare alcun riferimento all'azione  $I$ , che è completamente scomparsa dalla nuova formula. Dunque la nuova regola di quantizzazione può essere applicata a qualunque sistema (anche non integrabile, ad esempio con orbite "caotiche"), qualunque sia la scelta delle coordinate  $p, q$ . In questo modo risulta risolto il problema centrale che restava aperto nel procedimento di Bohr–Sommerfeld, ovvero la sua estendibilità a sistemi che non ammettono variabili azione–angolo, ovvero sistemi non integrabili – come l'atomo di Elio – o anche a sistemi integrabili ma in situazioni di scattering o con moti non confinati, come la particella libera.

## 2.5 Connessione con le formule empiriche di Kramers, Thomas e Kuhn nella teoria della dispersione

Diamo ora la connessione della regola di quantizzazione di Heisenberg (2.4.4) con la formula di somma empirica usata da Kramers, Thomas e Kuhn nella teoria della dispersione. Alcuni richiami sulla teoria microscopica della dispersione verranno dati in una appendice.<sup>37</sup> Qui basta tenere presente che, come già ricordato, la quantità di interesse è il momento elettrico  $-eq$  dell'elettrone, che Heisenberg denota con  $M$ . A pag 269 della edizione di van der Waerden (subito dopo avere stabilito la sua formula di quantizzazione), Heisenberg ricorda che, per il momento elettrico indotto da un'onda della forma  $E \cos \omega t$  (scriviamo  $\omega$  invece di  $2\pi\nu$ ,  $\hbar$  invece di  $h/2\pi$ ,  $q$  invece di  $a$ , infine  $k$  invece di  $\alpha$ ) Kramers, operando sulle formule perturbative classiche mediante le regole di corrispondenza estese al modo di Born, aveva trovato l'espressione

$$M = e^2 E \cos \omega t \frac{2}{\hbar} \sum_{k=0}^{+\infty} \left[ \frac{|q_{n,n+k}|^2 \omega_{n,n+k}}{\omega_{n,n+k}^2 - \omega^2} - \frac{|q_{n,n-k}|^2 \omega_{n,n-k}}{\omega_{n,n-k}^2 - \omega^2} \right]. \quad (2.5.1)$$

Si noti che Kramers considerava solo i  $k$  positivi, sicché  $\omega_{n,n+k}$  corrisponde ad assorbimento, e  $\omega_{n,n-k}$  ad emissione, con le frequenze sempre prese positive. Si è già osservato che questo potrebbe essere un elemento di ambiguità nello stabilire una connessione con il procedimento di Heisenberg. In ogni caso, Heisenberg procede considerando il caso limite  $\omega \gg \omega_{n,n+k}$ , che è il caso limite della particella libera, perché "*an oscillating electron behaves like a free electron when acted upon by light of much higher frequency than any eigenfrequency of the system*"). Allora egli osserva che in tale limite la formula si riduce alla

$$M = -e^2 \frac{2E \cos \omega t}{\omega^2 \hbar} \sum_{k=0}^{+\infty} \left[ |q_{n,n+k}|^2 \omega_{n,n+k} - |q_{n,n-k}|^2 \omega_{n,n-k} \right]. \quad (2.5.2)$$

<sup>37</sup>Ancora da scrivere.

D'altra parte, era noto, fin dai tempi della teoria classica della dispersione di fine '800, che per una particella libera il momento indotto è dato da

$$M = - \frac{e^2 E \cos \omega t}{m \omega^2}, \quad (2.5.3)$$

e quindi Heisenberg osserva che questa formula coincide con la formula limite (2.5.2) ottenuta sopra a partire dalla formula di Kramers, proprio se si assume la regola di quantizzazione (2.4.4) che lui stesso aveva appena dato. Una argomentazione equivalente era già stata data nel maggio del 1925 da Kuhn (e poi da Thomas).<sup>38</sup> Anche Born e Jordan, quando nel loro libro introducono la regola di quantizzazione di Heisenberg, sottolineano questo fatto, dicendo (pag. 85) “*Questa è essenzialmente la formula di somma (Summensatz) che Thomas e Kuhn avevano trovato alla base della loro relazione con la teoria della dispersione*”. Viceversa, sembrerebbe plausibile congetturare che il procedimento inverso (ammettere che la formula di Kramers dovesse ridursi nel caso di alte frequenze (dell'onda incidente) alla legge valida per l'elettrone libero) abbia indotto Heisenberg a formulare la sua regola di quantizzazione.

La cosa impressionante è il confronto con il lavoro di Born del 1924 (lavoro 7 dell'edizione di van der Waerden), di pochissimo precedente al lavoro di Heisenberg. Infatti, in quel lavoro anzitutto viene calcolata, con il metodo delle perturbazioni al primo ordine, la formula classica per il momento di dipolo indotto da un'onda monocromatica esterna. Si tratta della formula (24) di pag 188 dell'edizione di van der Waerden, lavoro 7, in cui il momento al primo ordine  $M^{(1)}$  (l'apice (1) sta per “approssimazione al primo ordine”) è dato da<sup>39</sup>

$$M^{(1)} = -2E \cos \omega t \sum_{k>0} k \frac{\partial}{\partial I} \frac{|q_k|^2 k \omega}{(k\omega)^2 - \omega^2}.$$

Ma poi viene presentata anche la corrispondente formula quantizzata secondo la prescrizione che abbiamo appunto attribuito a Born, ovvero<sup>40</sup>

$$M^{(1)} = -2E \cos \omega_0 t \sum \left[ \frac{\Gamma_{n+k,n} \omega_{n+k,n}}{\omega_{n+k,n}^2 - \omega^2} - \frac{\Gamma_{n,n-k} \omega_{n,n-k}}{\omega_{n,n-k}^2 - \omega^2} \right]$$

dove le quantità  $\Gamma$  sono le intensità, moduli al quadrato delle ampiezze, mentre le ampiezze stesse non figurano esplicitamente. Infatti Born aveva esplicitamente dato la prescrizione: “*Evidently, it is only the quadratic*

<sup>38</sup>W. Thomas, Nature **13**, 627 (1925); W.Kuhn, Z. Phys. **35**, 408 (1925) – lavoro 11 di van der Waerden.

<sup>39</sup>Il momento  $M$  viene denotato con  $p_x$ , naturalmente, con un  $p$  gotico, e la frequenza  $\omega$  viene denotata con  $\omega_0$ . Abbiamo cambiato un poco la notazione.

<sup>40</sup>Si noti che qui il segno delle frequenze che appare nel primo termine a destra è corretto.

expressions  $\Gamma_k = |q_k|^2 = q_k q_{-k}$  which have a quantum mechanical meaning" !! Dunque Born aveva dato la corretta formula di quantizzazione per il momento di dipolo, ma non aveva messo in luce la parte relativa alla regola di somma di Thomas e Kuhn, che porta effettivamente alla regola di quantizzazione di Heisenberg.<sup>41</sup>

Ma il punto cruciale nel procedimento di Heisenberg, in cui questi veramente superò Born, consistette nel comprendere che erano le ampiezze complesse  $q_{mn}$  corrispondenti alle righe  $\omega_{m,n}$  che dovevano essere quantizzate, e non le intensità  $\Gamma_{mn} = |q_{mn}|^2$ . Inoltre, è vero che la regola di somma di Thomas e Kuhn era una buona regola empirica, ma nessuno avrebbe mai pensato di interpretarla come una regola che servisse a determinare le matrici (o tabelle) che rappresentano le grandezze osservabili, come avviene nella nuova cinematica proposta da Heisenberg.

Si capisce quindi come Born debba essere rimasto traumatizzato quando Heisenberg gli presentò il suo lavoro, come se gli fosse sfuggito un punto che a posteriori potrebbe apparire anche semplice a dirsi, ma evidentemente era stato difficilissimo da concepirsi. Si tratta di quelle situazioni in cui tutte le formule sono già praticamente disponibili, ma manca il colpo di genio di chi sa rimetterle tutte a posto, a seguito di una profonda illuminazione, e indica esplicitamente un preciso elemento qualitativamente nuovo. Si spiega in questo modo il tono delle parole di incredibile ammirazione con cui ha inizio il lavoro di Born e del suo allievo Jordan. Infatti, dopo avere citato come Heisenberg avesse formulato una nuova meccanica quantistica, viene detto *"The physical reasoning which led Heisenberg to this development has been so clearly described by him (nel suo lavoro del '25) that any supplementary remarks appear superfluous. .... Having been in the advantageous position to familiarize ourselves with his ideas throughout their formative stages, ... we now strive to clarify the mathematical formal content of his approach ..."*.

Non abbiamo avuto tempo di scrivere delle note sulla teoria della dispersione. Si può vedere ad esempio R. Becker, *Electromagnetic fields and interactions*, Dover (New York, 1964), Vol. II, paragrafi 40 e 41 oppure A. S. Kompanyets, *A course of theoretical physics* MIR (Mosca, 1972), Vol. II, paragrafo 37, oltre al classico libro di J.H. Van Vleck, *Theory of electric and magnetic susceptibilities* Oxford U.P. (Oxford, 1932). I lavori di Van Vleck sono molto interessanti per comprendere la rilevanza della regola di somma.

**Osservazione.** Ricordiamo dunque il cuore del percorso di Heisenberg. Egli scrive la definizione dell'azione in termini dei coefficienti di Fourier del movimento  $q(n, t)$ , e la deriva rispetto all'azione. Poi passa alla corrispondente formula "quantistica" ottenuta con il consueto principio di corrispondenza di Bohr–Born. Queste formule sostanzialmente erano note. È a questo

---

<sup>41</sup>Una discussione significativa della dispersione, che condusse all'articolo di Heisenberg, si trova nella lezione 14 (soprattutto la parte finale, a pag. 42) delle lezioni che Born tenne al MIT nell'inverno 1935–36. Si veda Max Born, *Problems of Atomic Dynamics*.

punto che interviene il grande salto di pensare alle tabelle (che poi diventeranno le matrici, ovvero gli operatori). Perché fino ad allora i due indici  $n, k$  erano il primo legato all'azione definente un'orbita (un movimento  $q(t)$ ), il secondo al coefficiente dello sviluppo di Fourier (rispetto al tempo) del movimento considerato. Il grande salto di Heisenberg fu di dimenticarsi di quella distinzione, e mettere i due indici sullo stesso piano, come in  $\omega_{mn}$  che già era una tabella, sganciandosi dalle orbite, dai movimenti. era implicito quando si voleva pensare alle frequenze osservate come a una tabella con due indici, senza alcun riferimento ad armoniche dello sviluppo di Fourier di una fissata orbita. Allora tutte le variabili dinamiche diventano tabelle, cioè matrici, cioè operatori.

## 2.6 Estensione della regola di quantizzazione di Heisenberg da parte di Born e Jordan – e di Dirac; la legge di quantizzazione $pq - qp = -i\hbar$

Vediamo ora come la condizione di quantizzazione di Heisenberg divenne, nelle mani di Born e Jordan e poi di Dirac, la regola di commutazione per gli operatori  $p, q$ . Si tratta dei due lavori già ripetutamente citati, e riprodotti nel libro di Van der Waerden, rispettivamente come numeri 13 e 14. In tali lavori viene data una rilettura della regola di quantizzazione di Heisenberg (2.4.4), che gli autori compiono nel modo seguente.

Born e Jordan ripartono dalla definizione dell'azione (noi, come al solito, in luogo dell'azione  $J$  e della frequenza  $\nu$  ci riferiamo all'azione ridotta  $I = J/2\pi$  e alla frequenza angolare  $\omega = 2\pi\nu$ )

$$I = \frac{1}{2\pi} \oint pdq = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\omega/2\pi} p\dot{q}dt$$

la quale “can, on introducing the Fourier expansions for  $p$  and  $q$ ,

$$p(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} p_k e^{ik\omega t}, \quad q(t) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} q_k e^{ik\omega t}$$

(usiamo l'indice  $k$  in luogo del loro indice  $\tau$ ) be transformed into (come Heisenberg, derivano rispetto ad  $I$  la definizione di  $I$ )<sup>42</sup>

$$1 = i \sum_k k \frac{\partial}{\partial I} [q_k(n)p_{-k}(n)] \quad (2.6.1)$$

<sup>42</sup>Usando come Heisenberg

$$\int_0^{2\pi/\omega} e^{i(k+l)\omega t} dt = \frac{2\pi}{\omega} \delta_{k,-l}.$$

..... The following expressions should correspond:<sup>43</sup>

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} k \frac{\partial}{\partial I} (q_k(n) p_{-k}(n)) \quad \text{with} \quad \frac{1}{\hbar} \sum_{k=-\infty}^{\infty} (q_{n+k,n} p_{n,n+k} - q_{n,n-k} p_{n-k,n}) . \quad (2.6.2)$$

sicché si ottiene la condizione

$$1 = \frac{i}{\hbar} \sum_k (q_{n+k,n} p_{n,n+k} - q_{n,n-k} p_{n-k,n}) .$$

Infine nel primo termine si sostituisce l'indice muto  $n+k$  con  $k$  (che ha lo stesso dominio), e nel secondo analogamente  $n-k$  con  $k$ ; inoltre si giustapppongono i fattori in modo che gli indici uguali risultino "affacciati", come richiesto nella regola di moltiplicazione di matrici. "In this way we obtain the quantization condition corresponding to (2.6.1)

$$\sum_k (p_{nk} q_{kn} - q_{nk} p_{kn}) = -i\hbar . \quad (2.6.3)$$

Poi aggiungono (ma non è questo il punto che qui ci importa) *This is a condition of infinitely many equations, namely one for each value of  $n$ . In particular, for  $p = m\dot{q}$  this yields (si ricordi  $\omega_{nm} = -\omega_{mn}$ )*

$$2m \sum_k \omega_{kn} |q_{nk}|^2 = \hbar$$

*which, as may easily be verified, agrees with Heisenberg's form of the quantization condition, or with the Thomas-Kuhn equation. The formula (2.6.3) has to be regarded as the appropriate generalization of this equation."*

Ma il punto nuovo è che la (2.6.3) fornisce le infinite relazioni che costituiscono la parte diagonale (elementi  $(n, n)$ ) della relazione matriciale

$$pq - qp = -i\hbar . \quad (2.6.4)$$

Nel paragrafo successivo Born e Jordan deducono poi, assumendo la legge di conservazione dell'energia, che la matrice  $pq - qp$  è una matrice diagonale, e quindi, insieme con la legge di quantizzazione precedentemente trovata, determinano il commutatore  $pq - qp$  nella forma (2.6.4).

<sup>43</sup>Si usi (ringraziamo la studentessa Sara Lui per averci indicato questo passaggio)

$$p_{-k}(n) = p_k^*(n) \rightarrow p_{n,n-k}^* = p_{n-k,n} ,$$

sicché si ha

$$q_k(n) p_{-k}(n) \rightarrow q_{n,n-k} p_{n-k,n} .$$

Si sostituisce poi  $k \frac{\partial}{\partial I}$  mediante la consueta regola di Born (2.3.9).

La regola di quantizzazione nella forma della regola di commutazione (2.6.4) viene data anche nel primo lavoro di Dirac.<sup>44</sup> Lasciamo al lettore di riprodurre l'interessantissimo ragionamento, basato ancora sul principio di corrispondenza, con cui Dirac dimostra la regola di corrispondenza generale tra parentesi di Poisson e commutatori. Esso è riprodotto, con le notazioni stesse di Dirac, nelle lezioni di Heisenberg a Chicago, e verrà riportato qui più avanti.

Si noti infine che, appena dopo avere stabilito la relazione (2.6.4), Born e Jordan osservano subito *“Incidentally one sees from (2.6.3) that the diagonal sum (la traccia)  $\text{Tr}(pq)$  necessarily becomes infinite. For otherwise one would have  $\text{Tr}(pq) - \text{Tr}(qp) = 0$  <sup>45</sup> ... whereas (2.6.3) leads to  $\text{Tr}(pq) - \text{Tr}(qp) = \infty$ . Thus the matrices under consideration are never finite.”* (ovvero, sono ambientate in spazi di dimensione infinita). In altri termini, se le matrici  $q, p, I$  “vivessero” in uno spazio finito dimensionale (diciamo di dimensione  $n$ ), allora, essendo  $\text{Tr}(pq) = \text{Tr}(qp)$ , la relazione (2.6.4) comporterebbe la relazione assurda  $0 = n$ , e quindi le matrici devono “vivere” in uno spazio infinito dimensionale.

In molti dei comuni manuali di meccanica quantistica questa semplicissima osservazione non viene riportata. Invece essa ha un ruolo fondamentale. Infatti essa ci dice non solo che lo spazio in cui vivono le matrici rappresentative di  $q$  e  $p$  è infinito dimensionale, ma anche che esso deve avere una struttura determinata. Occorrerebbe qui una lunga digressione che dovrebbe giustificare un assioma fondamentale della meccanica quantistica, ovvero che le “osservabili” (come  $q, p$  e ogni quantità fisica) devono essere descritte da operatori hermitiani (o autoaggiunti) in uno spazio di Hilbert separabile. Questi aspetti furono messi in luce particolarmente da von Neumann nel suo lavoro<sup>46</sup> del 1927 e poi nel suo libro. La situazione può anche essere

<sup>44</sup>Nelle sue parole: *“For a system of one degree of freedom, if we take  $p = m\dot{q}$ , the only quantum condition is*

$$2\pi m(q\dot{q} - \dot{q}q) = ih .$$

*Equating the constant part of the left-hand side (cioè gli elementi diagonali) to  $ih$ , we get*

$$4\pi m \sum_k q_{nk} q_{kn} \omega_{kn} = h .$$

*This is equivalent to Heisenberg's quantum condition (2.4.4). By equating the remaining components of the left-hand side to zero we get further relations not given in Heisenberg's theory.”*

<sup>45</sup>Infatti, per due matrici  $A, B$  si ha

$$\text{Tr}AB = \sum_i \sum_k a_{ik} b_{ki} = \sum_k \sum_i b_{ki} a_{ik} = \text{Tr}BA .$$

<sup>46</sup>J. von Neumann, *Mathematische Begründung swr Quantenmechanik*, Nachr. Ges. Wiss. Gött. 1–57 (1927), Collected Works, Vol. I, N.9 si veda anche D. Hilbert, L. Nordheim, J. von Neumann, *Über die Grundlagen der Quantenmechanik*, Math. Ann. **98**, 1–30 (1927), Collected Works, Vol. I, N. 7.

riassunta con le seguenti belle parole di Weyl (pag 95 del suo libro). “*The commutation rule (2.6.4) is of a rather remarkable nature. It is entirely impossible for matrices in a space of a finite number of dimensions, and it alone precludes the possibility that in an  $\infty$ -dimensional space  $q$  (or  $p$ ) have only a discrete spectrum of characteristic numbers*” (cioè di autovalori).<sup>47</sup>

## 2.7 Prima applicazione: l'oscillatore armonico. I livelli di energia, ed esistenza dello stato fondamentale; gli elementi di matrice $q_{mn}$ e $p_{mn}$

Nel suo primo lavoro, dopo avere dato la sua regola di quantizzazione (regola di somma), Heisenberg compie una applicazione al calcolo dei livelli energetici dell'oscillatore anarmonico, e quindi anche dei livelli energetici dell'oscillatore armonico, trovando che questi ultimi sono dati da

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.7.1)$$

se  $\omega$  è la frequenza angolare dell'oscillatore. Egli osserva che questi livelli differiscono per il termine  $\hbar\omega/2$  da quelli postulati da Planck nel 1900. e invece coincidono con quelli che Planck stesso aveva postulato nella sua “seconda teoria” del 1911–1912.<sup>48</sup>

Il procedimento originale di Heisenberg è alquanto involuto, e non facile da seguirsi, perché richiede di conoscere preliminarmente la teoria delle perturbazioni classiche secondo il metodo di Linstedt. Heisenberg lo conosceva bene, perché come compito affidatogli da Born, nel gruppo dei giovani facenti parte del circolo di Göttingen, egli aveva ricevuto proprio quello di studiare i lavori matematici sulla teoria delle perturbazioni. Noi richiameremo il metodo di Linstedt in una appendice, dove anche illustreremo il procedimento originario seguito da Heisenberg. Oggi, a seguito dei lavori di Dirac,

<sup>47</sup>Infatti, nella base degli autovettori di  $q$  si avrebbe  $q_{mn} = q_m \delta_{mn}$  (dove  $q_m$  sono gli autovalori di  $q$ ), mentre gli elementi  $p_{mn}$  sarebbero a priori arbitrari. Dunque il primo membro della (2.6.4) avrebbe elementi  $p_{mn}(q_n - q_m)$  sicché la diagonale principale avrebbe tutti gli elementi nulli, mentre a destra tutti gli elementi della diagonale principale sono uguali a  $i\hbar$ , e quindi nonnulli.

<sup>48</sup>Tale energia “minima” corrispondente al livello di energia dello “stato fondamentale” viene chiamata “energia di punto zero” (*zero point energy*) perché in tedesco *Nullpunkt* significa zero assoluto di temperatura, e  $\hbar\omega/2$  è proprio l'energia che un oscillatore di frequenza  $\omega$  dovrebbe avere allo zero assoluto (come si vede ripercorrendo il procedimento che porta alla formula di Planck, se si assume che i livelli. abbiano l'espressione (2.7.1)). L'esistenza effettiva di una energia di punto zero è una questione molto discussa. Da una parte si dice che essa esiste, e spiegherebbe un noto effetto detto “effetto Casimir”. D'altra parte spesso si sostiene che essa non esiste, potendo essere eliminata mediante uno *shift* dello zero dell'energia per ogni oscillatore, come ad esempio detto nel classico libro di elettrodinamica quantistica di Heitler a pag 57. In ogni caso, nella prefazione al suo classico libro sulla teoria della radiazione, Planck dice che la meccanica quantistica è costruita proprio sull'energia di punto zero.

si segue il procedimento di introdurre i cosiddetti operatori di creazione e di distruzione (particolarmente utili in teoria dei campi quantistici), da cui tutto segue molto pianamente. Questo procedimento sarà ricordato rapidamente qui sotto. Tuttavia, ci sembra utile riportare anche il procedimento seguito da Born e Jordan, particolarmente nella forma in cui esso venne illustrato da Born stesso nelle sue lezioni al MIT nell'inverno 1925–1926 (Lecture 13).

Le formule per i livelli energetici  $E_n$  e per gli elementi di matrice  $q_{mn}$  (e quindi per le probabilità di transizione  $|q_{mn}|^2$ ) vengono dedotte da Born facendo uso dell'equazione di moto, ovvero  $\ddot{q} + \omega^2 q = 0$ , che invece è completamente assente nel procedimento di Dirac (e in quello di Schroedinger). Assumendo che gli elementi di matrice dipendano dal tempo nella forma di Heisenberg<sup>49</sup>  $q_{mn} \exp(i\omega_{mn}t)$  dove, come di consueto,  $\omega_{mn} = (E_m - E_n)/\hbar$ , essa fornisce per ogni elemento  $q_{mn}$  l'equazione

$$(\omega_{mn}^2 - \omega^2)q_{mn} = 0 . \quad (2.7.2)$$

Da questa segue  $q_{mn} \neq 0$  se e solo se  $\omega_{mn} = \pm\omega$ , ovvero

$$q_{mn} \neq 0 \quad \text{equivalente a} \quad E_m - E_n = \pm\hbar\omega .$$

Ricordando che  $|q_{mn}|^2$  è proporzionale all'intensità della riga  $m \rightarrow n$ , ciò significa che esistono solo le righe relative a salti di energia  $\Delta E$  con  $\Delta E = \hbar\omega$  e quindi i livelli di energia costituiscono una successione di valori ugualmente spazati, ovvero della forma  $E_n = a + n\hbar\omega$  (per esempio con  $a \geq 0$ ), a priori illimitata sia per  $n$  positivi che per  $n$  negativi. Inoltre, gli unici elementi di matrice  $q_{mn}$  non nulli sono quelli della forma  $q_{n,n-1}$ .

Si tratta ora di comprendere come si stabilisce che esiste uno “stato fondamentale”, un livello, diciamo  $n = 0$ , al di sotto del quale non si può scendere, cioè tale che  $q_{0,-1} = 0$ . Nelle parole di Heisenberg (pag. 271 dell'edizione di Van der Waerden), si deve avere (“*the condition that  $q_{n_0, n_0-1}$  should vanish in the ground state*”).

Un argomento che faccia arrestare la successione a un livello  $E_0 > 0$  potrebbe essere che l'espressione dell'energia è positiva, ma gli autori non ne fanno uso. In effetti, questo argomento può essere utilizzato consistentemente solo se si fa uso, oltre che della nozione di elementi di matrice (che gli autori ben conoscevano), anche di quella di *stato*, che fu messa in luce

<sup>49</sup>Ciò corrispondere ad assumere che l'evoluzione temporale di una osservabile  $f$  sia data da

$$f(t) = e^{iHt/\hbar} f(0) e^{-iHt/\hbar} ,$$

sicché, relativamente alla base degli autovettori di  $H$  (assumendo che  $H$  abbia solo spettro discreto), sono dati da

$$f_{mn}(t) = e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} f_{mn}(0) .$$

successivamente da Schroedinger.<sup>50</sup> Ritourneremo su questo punto più sotto, riportando il procedimento di Dirac.

Per arrestare la successione, Born e Jordan fanno uso della condizione di quantizzazione che avevano trovato,  $pq - qp = -i\hbar$ , ovvero  $\sum_k (p_{mk}q_{kn} - q_{mk}p_{kn}) = -i\hbar\delta_{mn}$ , e osservano come essa implica che anche i numeri  $|q_{n,n-1}|^2$  formano una successione aritmetica.

Infatti, usando  $p = m_0\dot{q}$  - denotiamo ancora con  $m_0$  la massa della particella - tale relazione si scrive

$$\sum_k (\omega_{mk} - \omega_{kn})q_{mk}q_{kn} = -\frac{\hbar}{m_0}\delta_{mn} . \quad (2.7.3)$$

Prendiamone ora l'elemento diagonale  $(n, n)$  e usiamo il fatto stabilito sopra (in virtù dell'equazione di moto) che gli unici elementi non nulli sono  $q_{n,n+1}$  e  $q_{n,n-1}$ , e che  $q_{n,n+1}q_{n+1,n} = |q_{n,n+1}|^2$ . Usando anche il fatto che  $\omega_{n,n+1} = -\omega_{n+1,n} = -\omega$ , sicché si ha  $\omega_{n,n+1} - \omega_{n+1,n} = -2\omega$  (come anche per i termini con  $n-1$  in luogo di  $n+1$ ), otteniamo infine

$$|q_{n+1,n}|^2 = |q_{n,n-1}|^2 + \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m_0\omega} . \quad (2.7.4)$$

Dunque i numeri  $|q_{n+1,n}|^2$  costituiscono una successione aritmetica, e inoltre sono nonnegativi. Quindi la successione deve avere un elemento minimo, positivo o nullo (che possiamo convenire essere in corrispondenza dell'indice  $n=0$ ) perchè altrimenti si avrebbe una contraddizione.

Dunque, dalla relazione di ricorrenza (2.7.4) con  $q_{0,-1} = 0$  si ottengono le quantità  $|q_{n+1,n}|$   $n = 0, 1, 2, \dots$  nella forma

$$|q_{n+1,n}|^2 = (n+1) \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m_0\omega} , \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.7.5)$$

e infine gli elementi di matrice

$$q_{n+1,n}(t) = \sqrt{(n+1) \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m_0\omega}} e^{i\omega t + \varphi_n} , \quad (2.7.6)$$

dove  $\varphi_n$  è una fase arbitraria. Si noti che per grandi  $n$  l'azione  $I_{n+1} = (n+1)\hbar$  può essere assimilata a una variabile continua  $I$ , sicché la formula (2.7.6) si riduce alla formula classica, soluzione dell'equazione dell'oscillatore armonico,

$$q(t) = \sqrt{\frac{1}{2} \frac{I}{m_0\omega}} e^{i(\omega t + \varphi)} .$$

<sup>50</sup> Ad esempio, per ogni stato  $u$  si ha  $(u, p^2 u) \geq 0$ . Si usa che  $p$  è autoaggiunto, e quindi

$$(u, p^2 u) = (pu, pu) = \|pu\|^2 \geq 0 .$$

Analogamente per  $q^2$ , e quindi anche per l'energia si ha  $E_n = (u_n, H u_n) \geq 0$ .

Disponendo delle formule per  $q_{mn}$  (e quindi anche per  $\dot{q}_{mn} = i\omega_{mn}q_{mn}$ ), dall'espressione  $H = (m_0/2)(\dot{q}^2 + \omega^2 q^2)$  dell'energia, eseguendo il prodotto matriciale  $q^2$  si trova subito  $H_{mn} = E_n \delta_{mn}$  con

$$E_n = \frac{m_0}{2} \sum_k (\omega^2 - \omega_{nk}\omega_{kn}) q_{nk}q_{kn} = m_0\omega^2 (|q_{n+1,n}|^2 + |q_{n,n-1}|^2) ,$$

ovvero (ricordando la (2.7.5))  $E_n = (n+1/2)\hbar\omega$ . Il fatto che la matrice  $H_{mn}$  sia diagonale viene letto dagli autori come corrispondente alla conservazione dell'energia. Infatti sappiamo che per ogni osservabile  $f$  l'evoluzione temporale viene assunta avere la forma  $f_{mn}(t) = \exp[i(E_m - E_n)t/\hbar]f_{mn}(0)$ . Dunque gli elementi diagonali evidentemente non evolvono (perché l'esponente si annulla), e non evolvono neppure quelli fuori diagonale, perché abbiamo stabilito che sono nulli. Pertanto ogni matrice che sia diagonale (nella rappresentazione di Heisenberg, cioè calcolata rispetto agli autovalori dell'energia) è una costante del moto.

Più compatto e coerente è il procedimento di Dirac, che fa riferimento ai noti operatori di creazione e distruzione, ed è esposto nel classico libro di Dirac (paragrafo 34, pag. 136), e in qualunque manuale (ad esempio, L. Picasso, *Lezioni di Meccanica Quantistica*, pag. 87). Rispetto al procedimento di Heisenberg, Born e Jordan, esso si distingue per il fatto di fare esplicito riferimento allo spazio degli stati, inteso come spazio di Hilbert, su cui agiscono gli operatori corrispondenti alle osservabili, che era lasciato implicito nella trattazione di Heisenberg e degli altri, e che fu poi messa in luce da Schroedinger. Il procedimento consiste nel compiere operazioni algebriche, facendo uso delle note relazioni di commutazione, con lo scopo di trasformare l'hamiltoniana in modo che i suoi autovalori diventino evidenti

**Procedimento alla Dirac.** Per comodità del lettore, faremo qui uso delle notazioni moderne, non seguendo Dirac alla lettera (ad esempio egli denota  $\eta^\dagger$  l'operatore oggi comunemente denotato con  $a$  (operatore di distruzione). Inoltre, scriviamo direttamente l'Hamiltoniana nella forma<sup>51</sup>

$$H = \frac{\omega}{2}(p^2 + q^2) ,$$

<sup>51</sup>A questa forma ci si riduce subito a partire dalla forma consueta

$$H = \frac{1}{2} \left( \frac{p^2}{m} + m\omega^2 q^2 \right) = \frac{\omega}{2} \left( \frac{p^2}{m\omega} + m\omega q^2 \right) = \frac{\omega}{2} (P^2 + Q^2) ,$$

dove si è introdotta la trasformazione (evidentemente canonica)

$$Q = \sqrt{m\omega}q , \quad P = p/m\omega ,$$

e denotando ancora  $Q$  con  $q$ ,  $P$  con  $p$ .

in cui  $p^2 + q^2$  è una azione. Si introducono allora l'operatore complesso  $a$  (e quindi anche il suo aggiunto  $a^\dagger$ ), definiti da<sup>52</sup>

$$a = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(p - iq), \quad a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(p + iq)$$

Per le ragioni che si capiranno fra un momento, gli operatori  $a$  e  $a^\dagger$  vengono chiamati rispettivamente operatore di distruzione e operatore di creazione.

Si trova subito che la regola di commutazione  $[p, q] = -i\hbar$  comporta

$$[a, a^\dagger] = 1,$$

perché si calcola immediatamente

$$aa^\dagger - a^\dagger a = \frac{1}{2\hbar}[(p - iq)(p + iq) - (p + iq)(p - iq)] = \frac{i}{\hbar}(pq - qp).$$

Lo stesso calcolo mostra anche (usando la regola di commutazione) che si ha

$$aa^\dagger = \frac{1}{2\hbar}(p^2 + q^2) + \frac{1}{2}, \quad \text{ovvero} \quad H = aa^\dagger \hbar\omega - \frac{1}{2}\hbar\omega = (N - \frac{1}{2})\hbar\omega,$$

e analogamente (usando  $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ )

$$H = (N + \frac{1}{2})\hbar\omega,$$

dove si è introdotto l'operatore

$$N = a^\dagger a$$

Esso ha evidentemente la proprietà  $N^\dagger = N$ , ed inoltre  $N \geq 0$ , perché per ogni vettore  $v$  (questo è l'elemento che mancava ad Heisenberg, Born e Jordan) si ha

$$(v, a^\dagger av) = (av, av) = \|av\|^2 \geq 0.$$

L'operatore  $N$  viene detto "operatore numero" (e gli operatori  $a^\dagger$  ed  $a$  operatori di creazione e di distruzione) per il motivo che ora spieghiamo. Consideriamo un autovettore  $v$  di  $N$  corrispondente a un autovalore  $\lambda$ ,

$$Nv = a^\dagger av = \lambda v.$$

<sup>52</sup>Si noti che la convenienza di introdurre delle variabili complesse  $z = p + iq$ ,  $z^* = p - iq$  in luogo di  $p, q$  era ben nota in meccanica classica, particolarmente in teoria delle perturbazioni, perché tali variabili diagonalizzano (nel caso dell'oscillatore armonico) un operatore che entra sistematicamente nella teoria delle perturbazioni: si tratta dell'operatore  $\{H, \cdot\}$ , parentesi di Poisson con l'hamiltoniana  $H$ , operatore agente sulle funzioni  $f(q, p)$ . Nella nuova variabile complessa  $z$  le equazioni di moto  $\dot{p} = -\omega q$ ,  $\dot{q} = \omega p$  diventano semplicemente  $\dot{z} = -i\omega z$ , con soluzione  $z(t) = z_0 \exp(-i\omega t)$ , e si hanno dunque rotazioni rigide nel piano della variabile complessa  $z$ .

Allora si vede subito che si ha anche

$$N(a^\dagger v) = (\lambda + 1)a^\dagger v, \quad N(av) = (\lambda - 1)av$$

cioè  $a^\dagger v$  ed  $av$  sono ancora autovettori di  $N$ , con autovalore aumentato di uno e autovalore diminuito di uno rispettivamente.

Infatti, usando la regola di commutazione, si ha (ad esempio per  $a^\dagger v$ )

$$Na^\dagger v = a^\dagger(aa^\dagger)v = a^\dagger(a^\dagger a + 1)v = a^\dagger(N + 1)v = a^\dagger(\lambda + 1)v = (\lambda + 1)a^\dagger v.$$

Analogamente (usando  $a^\dagger a = aa^\dagger - 1$ ) si mostra la seconda.

Dunque gli autovalori di  $N$  sono la successione  $\lambda + k$  con  $k$  intero relativo. Ma sappiamo che  $N$  è un operatore definito positivo, sicché i suoi autovalori non possono essere negativi. Dunque la successione deve arrestarsi in basso. Denotiamo con  $v_0$  l'autovettore di  $N$  corrispondente al più piccolo autovalore positivo, diciamolo  $\lambda_0$  (con  $0 \leq \lambda_0 < 1$ ). Allora l'unico modo in cui si può ottenere che  $av_0$  non sia autovettore di  $N$  con autovalore negativo è che si abbia

$$av_0 = 0,$$

cioè che  $av_0$  sia il vettore nullo. In conseguenza, gli autovalori dell'operatore  $N$  sono tutti gli interi  $n \geq 0$ , e questo spiega il motivo del nome dato ad  $N$ , operatore numero. Il vettore  $v_0$  si dice "stato fondamentale" ("ground state") del sistema, o anche "stato di vuoto" ("the vacuum"), perché corrisponde all'autovalore 0 di  $N$ . Lo stato con  $N = n$  si dice contenere  $n$  "quanti".

Ciò è dovuto alla forma degli autovalori dell'energia. Infatti sappiamo che la relazione tra  $H$  ed  $N$  è data da  $H = (N + 1/2)\hbar\omega$ , sicché i suoi autovalori  $E_n$  sono dati da

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \quad (2.7.7)$$

Nelle parole di Dirac: "From the form of  $H$  as a sum of squares we should expect its eigenvalues to be all positive or zero (since the average value of  $H$  for any state must be positive or zero). We now have the more stringent condition (2.7.7)". Dunque si pensa l'energia dello stato corrispondente ad  $N = n$  come costituita di  $n$  "quanti di energia", ciascuno di energia  $\hbar\omega$ , mentre lo stato fondamentale, con la misteriosa energia  $(1/2)\hbar\omega$  sarebbe lo stato di vuoto, ovvero privo di quanti. In questo modo la iniziale intuizione di Planck riguardante la discretizzazione (quantizzazione) dell'energia dell'oscillatore armonico, divenuta con Einstein l'idea della esistenza di quanti di energia  $\hbar$ , viene ancora rivisitata da Dirac, e prenderà forma definitiva quando egli stesso quantizzerà il campo elettromagnetico.

Infine, si ottengono facilmente gli elementi di matrice di  $a$ , (e quindi quelli di  $a^\dagger$ , e poi per combinazione lineare anche quelli di  $q$ ,  $p$ ) nella base

degli autovettori  $v_n$  (supposti normalizzati) di  $N$ . Consideriamo dunque l'operatore di distruzione  $a$ . Basta ricordare che si ha

$$av_n = \alpha_n v_{n-1}$$

con un opportuno fattore  $\alpha_n$ . Ma sappiamo anche

$$\|av_n\|^2 = (av_n, av_n) = (v_n, a^\dagger av_n) = (v_n, Nv_n) = n\|v_n\|^2 = n,$$

sicché  $\alpha_n = \sqrt{n}$ . Questo ci dice che, nella base  $\{v_n\}$  formata dagli autovettori normalizzati di  $N$ , gli unici elementi di matrice nonnulli di  $a$  sono

$$a_{n-1,n} = (v_{n-1}, av_n) = \sqrt{n}. \quad (2.7.8)$$

**Significato dell'operatore numero in relazione all'equivalenza tra diverse realizzazioni delle regole di commutazione.** Si osservi che il procedimento ora descritto ha una implicazione ancora più profonda, connessa al teorema di von Neumann di cui parleremo più avanti, in relazione alla equivalenza del procedimento di Schroedinger con quello di Heisenberg, o più in generale dell'equivalenza unitaria di diverse realizzazioni delle regole di commutazione.

Si tratta di quanto segue. Ammettiamo di avere degli operatori  $p, q$ , agenti in un concreto spazio di Hilbert, e soddisfacenti le regole di commutazione  $[p, q] = -i\hbar$ . Si abbiano poi altri operatori  $p', q'$ , agenti in uno spazio concreto, a priori completamente diverso da quello precedente, ma ancora soddisfacenti le regole di commutazione  $[p', q'] = -i\hbar$ . Allora costruisco gli operatori  $a, a^\dagger$  e gli analoghi  $a', a'^\dagger$ , e anche  $N$  ed  $N'$ . Allora nei due diversi spazi ho rispettivamente le successioni  $\{v_n\}, \{v'_n\}$ , e posso stabilire una corrispondenza biunivoca nella maniera naturale, ovvero mediante  $v_n \rightarrow v'_n$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Quindi per linearità ho stabilito una corrispondenza biunivoca tra stati (ed anche tra operatori, nella maniera ovvia) che risulta essere unitaria, sicché le due concrete realizzazioni sono unitariamente equivalenti.

Un punto estremamente rilevante è che tale equivalenza vale per un qualunque sistema con un numero finito di gradi di libertà, ma non in generale per sistemi con infiniti gradi di libertà. come quelli che si incontrano nella teoria dei campi (di cui la corda vibrante è il prototipo). Questo fatto, dell'esistenza di rappresentazioni inequivalenti delle regole di commutazione, è di grande importanza nella teoria dei campi.

**Analoga con il calcolo dello spettro del momento angolare.** Vale la pena di osservare che un procedimento analogo a quello qui ricordato per l'energia dell'oscillatore armonico si ha anche nel caso del momento angolare, come esposto ad esempio nel libro di Dirac. Consideriamo il momento

angolare orbitale classico  $\mathbf{L} = \mathbf{x} \times \mathbf{p}$  di una particella, e ricordiamo che le parentesi di Poisson delle sue componenti soddisfano le relazioni (e le analoghe ottenute ciclando gli indici)

$$\{L_x, L_y\} = L_z \quad \{L_z, L^2\} = 0$$

dove  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ . Dalla regola di quantizzazione per le componenti della posizione e del momento si deducono allora le relazioni fra operatori

$$[\hat{L}_x, \hat{L}_y] = i\hbar\hat{L}_z \quad [\hat{L}_z, \hat{L}^2] = 0 .$$

Si introducono allora gli operatori non hermitiani

$$\hat{L}_+ = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \quad \hat{L}_- = \hat{L}_x - i\hat{L}_y$$

e operando in maniera molto analoga a quella seguita sopra si dimostra che gli autovalori di  $\hat{L}^2$  sono  $j(j+1)\hbar^2$  con  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ . Inoltre, dato  $j$ , si hanno  $2j+1$  autostati di  $\hat{L}_z$ , che risultano avere autovalori  $m\hbar$ , dove  $m = -j, -(j-1), \dots, j$ . Tralasciamo qui ogni discussione sullo spin dell'elettrone, introdotto da Pauli nel 1925. Qui facciamo solo notare come il momento angolare venga ad avere, in modulo, un valore minimo pari ad  $\hbar$ , come richiesto nella regola di quantizzazione di Bohr.

**Analogia con il calcolo dello spettro dell'atomo di idrogeno.** Gli autovalori dell'energia nel problema dell'atomo di idrogeno vengono di solito calcolati nei manuali seguendo il procedimento di Schroedinger. Vale la pena di fare presente che lo spettro può essere determinato anche con un calcolo di tipo algebrico, simile a quello sopra riportato per l'oscillatore armonico, e soprattutto simile a quello, cui si è anche accennato, del momento angolare. Proprio questo è il motivo per cui tale calcolo algebrico per gli autovalori dell'energia dell'atomo di idrogeno fu per la prima volta compiuto da Pauli stesso (lavoro 16, penultimo, della raccolta di van der Waerden <sup>53</sup>), cinque (5 !) giorni prima che venisse compiuto indipendentemente anche da Dirac (lavoro 17, l'ultimo, della raccolta di van der Waerden, in cui purtroppo non sono riprodotte le sezioni in cui viene compiuto il calcolo, in quanto già eseguito da Pauli).

## 2.8 Commutatori e parentesi di Poisson. La regola di quantizzazione alla Dirac $[f, g] = i\hbar\{f, g\}$

N.B. QUESTA SEZIONE E' SCRITTA IN UNA FORMA MOLTO PRELIMINARE.

<sup>53</sup> *On the hydrogen spectrum from the standpoint of the new quantum mechanics*, Zs. f. Phys. **36**, 334–363 (1926). Si vedano anche le lezioni di Born al MIT, *Problems of Atomic Dynamics*, Lecture 18, pag. 113.

Born e Jordan, e Dirac, compresero, per dirla con le parole di Weyl (pag. 95) che *le regole di commutazione*  $pq - qp = -i\hbar$  *sono la condizione necessaria e sufficiente perché le equazioni dinamiche siano le equazioni di Hamilton*. Cerchiamo di mostrare come si pervenga a questa conclusione, nella maniera più diretta e semplice possibile.

Seguiamo sostanzialmente Born e Jordan. L'osservazione centrale risale alla fondamentale intuizione di Heisenberg, che una osservabile generica, diciamola  $f$ , sia rappresentata da una matrice con elementi dipendenti dal tempo nel modo che ben conosciamo:

$$f_{mn}(t) = f_{mn}e^{i\omega_{mn}t} = f_{mn}e^{i(E_m - E_n)t/\hbar} .$$

(infatti, come diremmo oggi, siamo in rappresentazione di Heisenberg – nella base degli autovettori dell'energia –, e in descrizione di Heisenberg – evolvono gli operatori e non gli stati). Ora, questo implica che  $\dot{f}$ , la derivata temporale di  $f$ , sia rappresentata dalla matrice

$$\dot{f}_{mn}(t) = \frac{i}{\hbar}(E_m - E_n)f_{mn}(t) . \quad (2.8.1)$$

Introducendo ora il commutatore  $[f, H] = fH - Hf$ , si ha evidentemente  $[f, H]_{mn} = \sum_k (f_{mk}H_{kn} - H_{mk}f_{kn})$ . D'altra parte siamo nella “rappresentazione di Heisenberg”, in cui gli elementi di matrice sono riferiti alla base degli autovettori dell'energia, e dunque la matrice  $H_{mn}$  è diagonale,  $H_{mn} = E_n\delta_{mn}$  e dunque si ha

$$[f, H]_{mn} = (E_n - E_m)f_{mn} . \quad (2.8.2)$$

Per confronto delle (??) e (??), otteniamo allora la fondamentale legge dinamica per la evoluzione delle osservabili (o delle matrici, nel linguaggio di Heisenberg e sei suoi amici)

$$i\hbar\dot{f} = [f, H] . \quad (2.8.3)$$

Se ora confrontiamo questa legge di evoluzione quantistica con la corrispondente legge classica (equivalente alle equazioni di Hamilton)

$$\dot{f} = \{f, H\} ,$$

dove  $\{f, g\}$  è la parentesi di Poisson tra  $f$  e  $g$ , ovvero (denotiamo  $q = (q_1, \dots, q_n)$ ,  $p = (p_1, \dots, p_n)$ , e sottintendiamo la somma sull'indice  $i = 1, \dots, n$ )

$$\{f, g\} = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} \quad (2.8.4)$$

si vede subito che la regola di quantizzazione può essere espressa come la condizione

$$[f, g] = i\hbar\{f, g\} . \quad (2.8.5)$$

Si osservino le dimensioni. Il commutatore  $[f, g]$  ha le dimensioni del prodotto  $fg$ . La corrispondente parentesi di Poisson, ricordando la sua definizione (2.8.4) coinvolgente derivate rispetto a  $q$  e rispetto a  $p$ , ha le medesime dimensioni divise per le dimensioni del prodotto  $pq$ , cioè di una azione. Quindi i due membri della relazione (2.8.5) hanno le stesse dimensioni.

Ritourneremo sotto sulla regola di quantizzazione nella forma (2.8.5). Ma intanto illustriamo il profondo significato geometrico o cinematico del commutatore, che fu subito compreso da Dirac (si veda il paragrafo 3, *Quantum differentiation*, del suo lavoro). Egli si domanda: data una matrice (oggi diremmo una osservabile, descritta da un operatore in uno spazio di Hilbert)  $f$  (Dirac la denota con  $x$ , seguendo la notazione di Heisenberg) dipendente da un'altra matrice  $v$ , come possiamo definire in qualche maniera naturale la derivata di  $f$  rispetto a  $v$ ? Egli richiede che, fissata  $v$ , la derivata soddisfi due proprietà rispetto ad  $f$ , ovvero linearità e regola di Leibniz<sup>54</sup>, e dimostra in una pagina che alla matrice  $v$  corrisponde allora una matrice  $a$  tale che si abbia

$$\partial_v f = [f, a] \quad \text{dove} \quad [f, a] = fa - af .$$

Nel paragrafo successivo egli poi mostra, procedendo alla maniera di Heisenberg, che deve valere la relazione di quantizzazione (2.8.5) la quale, come sappiamo, è una generalizzazione della regola di Born e Jordan. Ricordiamo prima tuttavia un procedimento (che prendiamo da Weyl, pag. 94) che dimostra in un sol colpo i due punti dimostrati da Dirac nei suoi paragrafi 2 e 3, ovvero che la derivata rispetto ad un'osservabile è il commutatore con un'altra osservabile, e inoltre che essa viene fissata dalla regola di Born e Jordan.

In effetti, il risultato si ottiene subito almeno per i casi particolari delle due derivate  $\partial_q, \partial_p$  (per semplicità di notazione ci limitiamo ad un sol grado di libertà, ma la generalizzazione è ovvia), perché è allora ben naturale richiedere che si debba avere

$$\partial_q q = 1, \partial_q p = 0; \quad \partial_p p = 1, \partial_p q = 0 . \quad (2.8.6)$$

e allora si ottiene immediatamente

$$\partial_q f = \frac{1}{i\hbar} [f, p], \quad \partial_p f = -\frac{1}{i\hbar} [f, q], \quad (2.8.7)$$

Infatti, limitandoci a funzioni che sono polinomi in  $q, p$  (o sviluppi in serie di Taylor), si vede immediatamente che le derivate  $\partial_q f$  e  $\partial_p f$  sono univocamente determinate, a meno che non vi siano contraddizioni. Ma contraddizioni non si ottengono, perché si controlla immediatamente che le due derivate, costruite mediante le definizioni (2.8.7), soddisfano le proprietà richieste. La proprietà di Leibniz è

<sup>54</sup>Denotando con  $\partial_v$  la derivata, si richiede  $\partial_v(fg) = (\partial_v f)g + f\partial_v g$ . Rispetto al caso familiare, qui è essenziale l'ordinamento dei due fattori nei due termini.

soddisfatta proprio per le proprietà distributiva ed associativa della moltiplicazione matriciale; invece, le proprietà (2.8.6) risultano essere proprio una traduzione della regola di quantizzazione di Born e Jordan.

Osserviamo infine che in ambito classico si ha evidentemente

$$\partial_q f = \{f, p\} \quad \partial_p f = -\{f, q\} , \quad (2.8.8)$$

sicché le relazioni (2.8.7) risultano essere due casi particolari della regola generale di quantizzazione (2.8.5).

In conclusione, se particolarizziamo la legge dinamica generale (2.8.3) alle osservabili  $f(q, p) = q$ ,  $f(q, p) = p$ , e ricordiamo le relazioni (2.8.8) prendendo  $f = H$ , otteniamo che le osservabili  $q$  e  $p$  soddisfano le equazioni di moto

$$\dot{q} = \partial_p H \quad \dot{p} = -\partial_q H ,$$

formalmente uguali alle equazioni classiche di Hamilton. Questo è un punto abbastanza sottile, che talvolta risulta non facilmente assimilato dagli studiosi che si siano avvicinati alla meccanica quantistica lungo il percorso alla Schroedinger. Esso è ben riassunto da Weyl (pag. 95) con le seguenti parole:

*It is a universal trait of quantum theory to retain all the relations of classical physics: but whereas the latter interpreted these relations as conditions to which the values of physical quantities were subject in all individual cases, the former interprets them as conditions on the quantities themselves, or rather on the Hermitian matrices which represent them. This is the more significant formulation which the new quantum theory has given Bohr's correspondence principle.*<sup>55 56</sup>

## 2.9 Complementi: la regola di somma di Van Vleck in ambito classico

La teoria classica delle perturbazioni conduce ad una regola di somma simile a quella di Heisenberg, che inoltre è legata alle parentesi di Poisson delle coordinate  $q, p$ , in analogia con la lettura che Born e Jordan danno della regola di somma di Heisenberg. Analogia con la prescrizione di quantizzazione di Dirac con relazione tra parentesi di Poisson e commutatori.

### 2.10 Commenti

Dire anche che Heisenberg vuole calcolare le probabilità di transizione, nel senso di Einstein 1917. Problema generale. Calcolo delle intensità relative a un solo atomo, oppure a un sistema di atomi? Posizione di Einstein.

<sup>55</sup>Poi Weyl aggiunge che le regole di commutazione non possono essere realizzati in spazi di dimensione finita e impediscono che in uno spazio di dimensione infinita le osservabili  $q$  (o  $p$ ) abbiano solo uno spettro discreto.

<sup>56</sup>NOTA PER GLI AUTORI. AGGIUNGERE IL CALCOLO ALLA DIRAC