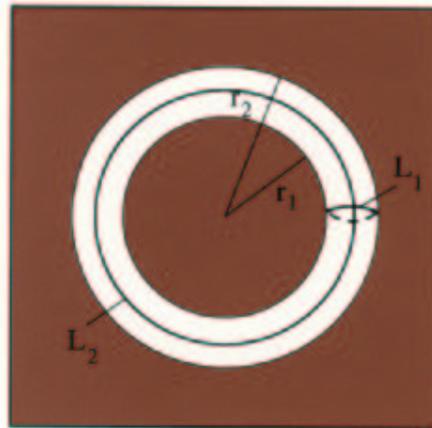


Sandro Graffi

**LE RADICI  
della  
QUANTIZZAZIONE**



QUADERNI DI FISICA TEORICA



Università degli Studi di Pavia  
Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica



QUADERNI DI FISICA TEORICA  
Collana curata da Sigfrido Boffi

Comitato Scientifico

Bruno Bertotti  
Italo Guarneri  
Alberto Rimini  
Marco Roncadelli



Sandro Graffi

**LE RADICI  
della  
QUANTIZZAZIONE**

Università degli Studi di Pavia  
Dipartimento di Fisica Nucleare e Teorica

Prima edizione: aprile 1993  
Prima edizione web: maggio 2005

ISBN 88-85159-09-5

## INDICE

Premessa .....	7
§ 1. Schema generale dell'esposizione .....	9
§ 2. Un riassunto della vecchia "teoria dei quanti". Il lavoro di Einstein del 1917 .....	11
§ 3. Quantizzazione canonica: rappresentazione di Schrödinger e teorema di unicità di von Neumann .....	25
§ 4. Quantizzazione nella rappresentazione di Bargmann. Evoluzione e stati coerenti .....	33
§ 5. Simboli di operatori e correzioni quantistiche .....	38
§ 6. Correzioni quantistiche alla formula di Bohr-Sommerfeld .....	42
§ 7. Forme normali quantistiche e teoria delle perturbazioni di Rayleigh-Schrödinger .....	47
§ 8. Perturbazioni classiche e quantiche: due teorie, un solo algoritmo .....	50
– Sulla quantizzazione di Sommerfeld e Epstein (Albert Einstein) .....	57



## PREMESSA

Le regole di quantizzazione di Bohr–Sommerfeld, per quanto arbitrarie e ingiustificate sul piano concettuale, obbediscono all’evidenza sperimentale che all’azione di un moto periodico siano permessi solo valori discreti. Perciò esse divennero lo strumento ideale per lo studio della fisica atomica nell’ambito di quella che oggi viene chiamata “la vecchia teoria dei quanti”. Implicita nella loro formulazione c’è l’ipotesi di separabilità dei contributi dei vari gradi di libertà all’integrale completo delle equazioni del moto, così da poter definire una coppia di variabili azione–angolo per ogni grado di libertà. In un lavoro del 1917, tanto importante quanto poco citato, qui tradotto dal tedesco, Albert Einstein supera questa limitazione con una modifica alle regole di Bohr–Sommerfeld che permette di esprimere le variabili d’azione per un arbitrario sistema canonicamente integrabile. Nell’odierna meccanica quantistica retta dall’equazione di Schrödinger si possono quantizzare invece solo le variabili dinamiche espresse mediante coordinate canoniche rettangolari. Si pone dunque il problema di stabilire una connessione tra i due metodi di quantizzazione.

In questo Quaderno Sandro Graffi, del Dipartimento di Matematica dell’Università di Bologna, affronta il problema di una quantizzazione esatta secondo una via da lui proposta di recente e che ha ricevuto notevole attenzione e interesse. La relazione tra i livelli quantistici esatti per l’energia e quelli definiti dalle regole di Bohr–Sommerfeld viene discussa tramite la costruzione del simbolo di un operatore che permette, ad ogni grado della teoria delle perturbazioni, di definire le correzioni quantiche in uno sviluppo in serie di potenze ascendenti di  $\hbar$ . Si può così ritrovare, in questo ambito, il limite classico della meccanica quantistica e riconoscere che la teoria delle perturbazioni classica e quella quantistica sono in realtà un solo algoritmo.

S. B.



## §1. Schema generale dell'esposizione

Per un complesso di motivi, tanto empirici quanto di principio <sup>1</sup>, nel formulare le leggi della fisica quantistica si deve ammettere quanto segue:

- (1) L'ambiente matematico che descrive gli stati microscopici di un sistema fisico è uno spazio di HILBERT, cioè uno spazio lineare (complesso) dotato di prodotto scalare, completo rispetto alla convergenza definita dalla norma indotta dal prodotto scalare medesimo;
- (2) Ad ogni grandezza fisica misurabile corrisponde un ben determinato operatore autoaggiunto che agisce nello spazio di HILBERT;
- (3) I valori che ogni grandezza può assumere in seguito a misura sono tutti e soli i punti dello spettro del corrispondente operatore autoaggiunto.

In questo formalismo il fenomeno della possibile quantizzazione dei valori delle grandezze fisiche è conseguenza immediata del fatto che lo spettro dei corrispondenti operatori autoaggiunti può essere, almeno in parte, discreto. Questo fenomeno, quando avviene, sarà di solito da attendersi per motivi fisici ben concreti, legati alle caratteristiche qualitative dei moti classici dei sistemi in esame. Il punto centrale in questo formalismo (che sostanzialmente è la formulazione della meccanica quantistica dovuta principalmente a VON NEUMANN <sup>2</sup>) è la legge di associazione fra stati e vettori Hilbertiani, e fra grandezze fisiche (“osservabili” o “variabili dinamiche”) e operatori autoaggiunti. Ogni costruzione concreta di una simile associazione in gergo si chiama una *rappresentazione* delle regole di commutazione canoniche. Ora il teorema

---

<sup>1</sup> Si vedano a questo proposito i quaderni di S. BOFFI: *Onde di materia e onde di probabilità, La meccanica delle onde, Le onde di De Broglie, Il principio di indeterminazione*, in questa stessa serie.

<sup>2</sup> Il celebre libro di JOHANN (come si firmava fino al 1932) o JOHN (come si firmava dopo) VON NEUMANN (1903–1957): *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*, pubblicato nel 1932 e di cui esistono traduzioni in tutte le principali lingue (ma non in italiano), costituisce a tutt'oggi il riferimento fondamentale in proposito. Esso espone in forma organica le ricerche sull'argomento dovute non solo a VON NEUMANN medesimo, ma a tutta quella parte della scuola matematica di Göttingen, allora nel suo pieno fulgore, che si interessava al problema. Lo stesso DAVID HILBERT (1862–1943), leader unanimemente riconosciuto di questa scuola, ha partecipato di persona alla formalizzazione della meccanica quantistica in termini degli operatori lineari negli spazi da lui stesso introdotti circa vent'anni prima in un contesto diverso, le equazioni integrali di FREDHOLM; si veda ad esempio il lavoro di DAVID HILBERT, JOHANN VON NEUMANN e LOTHAR NORDHEIM: *Über die Grundlagen der Quantenmechanik [Sui fondamenti della meccanica quantistica]*, *Mathematische Annalen* **98** (1927) 1–30.

di unicità di VON NEUMANN <sup>3</sup>, tanto famoso quanto misterioso, afferma in sostanza che la consueta rappresentazione di SCHRÖDINGER (“spazio delle  $q$ ”) è unica a meno di equivalenze unitarie. Pertanto si possono quantizzare solo le variabili dinamiche espresse nelle coordinate canoniche rettangolari, il che rappresenta un contrasto notevole con la cosiddetta “vecchia teoria dei quanti”, nota anche come teoria di BOHR-SOMMERFELD <sup>4</sup>. In quest’ultima, infatti, le variabili azione-angolo sono il tramite necessario per la quantizzazione. Questa contraddizione concettuale è a tutt’oggi irrisolta. Ovviamente se ne può uscire negandone a priori l’esistenza, cioè negando la necessità di riconciliare la teoria di BOHR-SOMMERFELD con quella “vera”, l’odierna meccanica quantistica retta dall’equazione di SCHRÖDINGER; d’altra parte si osserva che le regole di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD <sup>5</sup>, quando applicabili, danno un’approssimazione dei livelli energetici calcolati a partire dall’equazione di SCHRÖDINGER tanto migliore quanto più eccitato è il livello. Sorge dunque spontanea la domanda: è possibile rendersi conto (e, di conseguenza, sperare anche di dimostrare qualcosa) di come mai, e fino a che punto, i livelli energetici definiti dalla formula di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD approssimano quelli definiti dagli autovalori dell’equazione di SCHRÖDINGER? Questa domanda è una delle molte versioni in cui può essere posto il problema del limite classico della meccanica quantistica. Se ne conosce a tutt’oggi una risposta soddisfacente sì e no per sistemi ad un grado di libertà.

Per inquadrare l’intero argomento nella prospettiva necessaria è opportuno cominciare con un breve richiamo della formulazione che (col senno di poi) oggi si può dare della teoria di BOHR-SOMMERFELD, per poi passare a descrivere come si imposta il problema della quantizzazione nell’odierna meccanica quantistica per sistemi ad un numero finito di gradi di libertà. Queste premesse renderanno (sperabilmente) più chiara e motivata la ricostruzione del percorso intellettuale che ha dato origine tanto alla “vecchia” (pre SCHRÖDINGER) quanto alla “nuova” (da SCHRÖDINGER in poi) formulazione delle condizioni di quantizzazione, nonché l’impostazione del problema della relazione fra i livelli energetici definiti dai due procedimenti.

---

<sup>3</sup> o di WEYL-VON NEUMANN come enunciano alcuni autori, perché per dimostrarlo si considerano le regole di commutazione canoniche nella forma cosiddetta “integrata” introdotta da un altro degli allievi di DAVID HILBERT, forse il più famoso: HERMANN WEYL (1883-1955). Questa forma appare già nel suo celebre libro del 1928: *Gruppentheorie und Quantenmechanik* (traduzione inglese: *Group Theory and Quantum Mechanics*, Princeton University Press, 1930, ristampato dalla Dover Publications, New York, 1957).

<sup>4</sup> Il mistero sta nella restrizione imposta alla libertà di scelta delle coordinate canoniche, libertà che invece caratterizza la meccanica classica Hamiltoniana.

<sup>5</sup> In realtà sarebbe più preciso dire di BOHR-SOMMERFELD-DEBYE-PLANCK-EPSTEIN-SCHWARZSCHILD-EINSTEIN-KRAMERS-BURGERS-BORN come cercherò di far vedere in seguito commentando il lavoro di EINSTEIN.

## §2. Un riassunto della “vecchia teoria dei quanti”. Il lavoro di EINSTEIN del 1917

Il procedimento di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD può essere definito nella sua forma più generale nel modo seguente: consideriamo un sistema hamiltoniano classico completamente, canonicamente integrabile. Con questa locuzione intenderò che sono soddisfatte le condizioni del teorema di LIOUVILLE-ARNOLD: data la Hamiltoniana  $H(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  dove le coordinate  $(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv (p_1, \dots, p_N; q_1, \dots, q_N)$  sono canoniche,  $\{p_i, q_j\} = \delta_{i,j}$  (ma non necessariamente cartesiane od ortogonali) supponiamo che:

- (i) Il sistema ammetta  $N$  integrali primi  $F_i(\mathbf{p}, \mathbf{q}) : i = 1, \dots, N$  funzionalmente indipendenti ed in involuzione, cioè

$$\frac{\partial F_i}{\partial F_j} \neq 0 \quad \text{e} \quad \{F_i, F_j\} = 0, \quad i \neq j = 1, \dots, N;$$

- (ii) Le superficie di livello

$$F_i(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = J_i : i = 1, \dots, N$$

definiscono varietà differenziabili compatte, connesse e senza bordo.

È possibile allora associare ad ogni integrale primo  $F_i : i = 1, \dots, N$  un angolo  $\phi_i : i = 1, \dots, N$  in modo tale che

- (i) Le variabili  $(J_i, \phi_i) : i = 1, \dots, N$  sono canoniche:  $\{J_i, \phi_j\} = \delta_{i,j}$  (“variabili azione-angolo”) e sono legate alle variabili  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  da una trasformazione canonica;
- (ii) La Hamiltoniana, scritta in funzione delle  $(J_i, \phi_i) : i = 1, \dots, N$  tramite questa trasformazione, risulta una funzione delle sole variabili d’azione  $J_i : i = 1, \dots, N$ , cioè (con il consueto abuso di notazione)

$$H = H(J_1, \dots, J_N). \quad (2.1)$$

Si noti che se la Hamiltoniana ha la forma (2.1) le equazioni di Hamilton diventano

$$\begin{cases} \frac{dJ_i}{dt} = 0, & i = 1, \dots, N, \\ \frac{d\phi_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial J_i} \equiv \omega_i(J_1, \dots, J_N), \end{cases} \quad (2.2)$$

da cui, per  $i = 1, \dots, N : J_i = \text{cost.}$  e  $\phi_i = \omega_i(J_1, \dots, J_N)t + \phi_i^0$ . Dunque tutti i moti sono quasi periodici con vettore frequenza  $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{J}) \equiv (\omega_1(\mathbf{J}), \dots, \omega_N(\mathbf{J})) = \nabla_{\mathbf{J}} H(\mathbf{J})$ ,  $\mathbf{J} = (J_1, \dots, J_N)$ . Esempi standard di sistemi integrabili sono:

- (1) Il problema di Keplero per energie totali  $E < 0$ . In questo caso i tre integrali primi possono essere scelti, ad esempio, come il generatore infinitesimo  $J_3$  delle rotazioni attorno all'asse  $z$ , il generatore  $J_2$  delle rotazioni attorno alla linea dei nodi e l'azione  $J_1$  del moto radiale; non è possibile ottenere un'espressione esplicita della trasformazione canonica in termini di funzioni elementari, ma la Hamiltoniana si esprime sulle variabili azione-angolo nel modo seguente

$$H(J_1, J_2, J_3) = -\frac{K}{(J_1 + J_2 + J_3)^2}, \quad (2.3)$$

dove  $K$  è una costante che dipende dalle masse e dalla costante di gravitazione.

- (2) Ogni sistema di oscillatori lineari indipendenti, definito dalla Hamiltoniana

$$H(p_1, \dots, p_N, q_1, \dots, q_N) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2). \quad (2.4)$$

In questo caso la trasformazione che porta le variabili  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  nelle variabili azione-angolo si può scrivere esplicitamente: si ha infatti

$$J_i = \frac{1}{2\omega_i} (p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2), \quad \phi_i = \arctan \frac{\omega_i p_i}{q_i} \quad (2.5)$$

e la Hamiltoniana si scrive in funzione delle azioni nel modo seguente:

$$H(J_1, \dots, J_N) = \omega_1 J_1 + \dots + \omega_n J_n. \quad (2.6)$$

Allora la regola di quantizzazione comunemente nota come regola di BOHR-SOMMERFELD <sup>6</sup> afferma quanto segue:

#### REGOLA DI QUANTIZZAZIONE

*I livelli di energia di un sistema classicamente integrabile <sup>7</sup> si ottengono dalla (2.1) restringendo i valori delle azioni ai multipli interi positivi di  $\hbar$ , cioè si ha*

$$E_{n_1, \dots, n_N}^{BS} = H(n_1 \hbar, \dots, n_N \hbar). \quad (2.7)$$

<sup>6</sup> Sarebbe più preciso chiamarla, come cercheremo di motivare in seguito, di BSESEKBB, iniziali dei nomi di nota 5.

<sup>7</sup> Cioè completamente e canonicamente integrabile nel senso sopra richiamato.

Ad esempio, per il caso del problema newtoniano dei due corpi <sup>8</sup>, che descrive come sappiamo anche l'atomo idrogenoide, abbiamo dalla (2.3) i ben noti livelli

$$E_{n_1, n_2, n_3}^{BS} = -\frac{K}{(n_1 \hbar + n_2 \hbar + n_3 \hbar)^2} = -\frac{K}{(n \hbar)^2},$$

dove  $n = n_1 + n_2 + n_3$  è il numero quantico principale, mentre nel caso della (8) si ottiene l'altrettanto nota espressione

$$E_{n_1, \dots, n_N}^{BS} = \omega_1 n_1 \hbar + \dots + \omega_N n_N \hbar.$$

Esamineremo in seguito (e ciò costituirà appunto il momento centrale della discussione storica del lavoro di EINSTEIN) la relazione fra la condizione (2.7) e gli assai più familiari “integrali ciclici di SOMMERFELD”

$$\oint p_i dq_i = n_i \hbar, \quad i = 1, \dots, N.$$

Qui voglio limitarmi alle osservazioni seguenti:

- (1) il limite classico è *per definizione* il limite in cui  $n_i \rightarrow \infty$ ,  $\hbar \rightarrow 0$  con  $n_i \hbar \rightarrow J_i$ . Attraverso questo limite i valori quantizzati delle azioni riproducono il continuo dei valori classici;
- (2) La condizione di quantizzazione dei valori delle azioni è  $J_i = n_i \hbar$ , cioè la condizione originale di PLANCK e non, come si trova spesso scritto,  $J_i = (n_i + \frac{1}{2}) \hbar$ . Il termine  $\frac{1}{2} \hbar$  è, nel caso particolare dei moti periodici unidimensionali, il cosiddetto “indice di MASLOV” e rappresenta la prima correzione WKB: esso scompare al limite classico sopra definito;
- (3) Si noti che la quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD riproduce gli stati legati quantistici *esattamente* nel caso dell'atomo di idrogeno, e a meno dell'indice di MASLOV nel caso degli oscillatori armonici, il che è un altro modo di esprimere il fatto ben noto che “il WKB è esatto per l'oscillatore armonico”.
- (4) Come vedremo in molto maggior dettaglio in seguito, le condizioni di quantizzazione sono fra loro indipendenti, e quindi in numero di  $N$  pari

---

<sup>8</sup> Altri celebri esempi di sistemi completamente integrabili, a cui si può applicare il procedimento di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD appena descritto, sono l'atomo di idrogeno sotto l'azione di un campo elettrico esterno costante (effetto STARK-LOSURDO) e il problema dei due centri, o ione molecolare d'idrogeno. La trattazione secondo la teoria di BOHR-SOMMERFELD del primo problema è dovuta a P.S. EPSTEIN e a K. SCHWARZSCHILD, e quella del secondo è dovuta a W. PAULI. In entrambi i casi l'integrabilità deriva dalla possibilità di separare le variabili in opportune coordinate. Nel primo caso, che è esattamente il problema dei due corpi soggetto ad una ulteriore forza gravitazionale esterna costante, la separabilità in coordinate paraboliche è stata dimostrata da LAGRANGE fin dal 1776; nel secondo, che è il caso particolare del problema dei tre corpi in cui si immaginano fissi i due corpi primari, la separabilità in coordinate ellittiche risale ad EULERO.

al numero di gradi di libertà del sistema, qualora non intercorra alcuna relazione di risonanza fra le frequenze del sistema per nessun valore delle azioni, cioè qualora le componenti del gradiente  $\boldsymbol{\omega} = \nabla_J H(\mathbf{J})$  siano razionalmente indipendenti; ciò significa che l'equazione negli interi  $k_1, \dots, k_N$ :

$$k_1\omega_1 + \dots + k_N\omega_N = 0$$

ammette,  $\forall J_1, \dots, J_N$ , solo la soluzione banale  $k_1 = \dots = k_N = 0$ . In caso contrario le condizioni di quantizzazione sono meno del numero dei gradi di libertà, e il sistema è degenere. Ricordiamo che la degenerazione si dice *intrinseca* se si verifica per tutti i valori delle azioni, e *accidentale* se invece vale solo per alcuni. L'atomo di idrogeno rappresenta l'esempio canonico di degenerazione intrinseca, e difatti c'è una sola quantizzazione indipendente, quella del numero quantico principale. Anche gli oscillatori armonici danno origine ad un sistema intrinsecamente degenere qualora sussista almeno una relazione di risonanza fra le frequenze. Un esempio canonico di sistema integrabile che ammette risonanze accidentali è invece il cosiddetto *rotatore*, considerato per semplicità in due soli gradi di libertà. In questo caso la Hamiltoniana è:

$$H_0(J_1, J_2) = \frac{1}{2}(J_1^2 + J_2^2),$$

cosicché l'equazione  $\omega_1 k_1 + \omega_2 k_2 \equiv J_1 k_1 + J_2 k_2 = 0$  ammette la retta di soluzioni  $J_1/J_2 = -k_2/k_1$ .

Veniamo ora alla questione, tornata recentemente d'attualità<sup>9</sup>, della possibilità di una quantizzazione alla BOHR-SOMMERFELD per i sistemi non integrabili, che costituiscono evidentemente il caso generico dei sistemi Hamiltoniani. Qui la regola, nota in modo del tutto improprio come regola di quantizzazione EBK (Einstein<sup>10</sup>-Brillouin-Keller), e dovuta in realtà a BORN e alla sua scuola (BRODY), come sviluppo di idee originali di BOHR<sup>11</sup>, richiede l'introduzione della teoria canonica delle perturbazioni secondo il formalismo di POINCARÉ-LINDSTEDT-VON ZEIPPEL<sup>12</sup>.

<sup>9</sup> Uso questo aggettivo perché il problema è assai attuale in relazione al cosiddetto "caos quantistico": un esempio per tutti è il calcolo degli stati legati altamente eccitati dell'effetto ZEEMAN idrogenoide. Si veda a questo proposito la rassegna di D. DELANDE, *Chaos in Atomic and Molecular Physics* in *Chaos and Quantum Physics*, Proceedings Les Houches Summer School, 1990, ed. M.J. GIANNONI, A. VOROS, J. ZINN-JUSTIN, North-Holland, 1992.

<sup>10</sup> L'articolo di EINSTEIN tradotto in appendice non contiene alcun accenno ai sistemi non integrabili, contrariamente ad un'opinione assai diffusa (si veda ad esempio il libro di M. GUTZWILLER: *Chaos in Quantum and Classical Mechanics*, Springer Verlag, 1990).

<sup>11</sup> Si veda N. BOHR: *Quantum Theory of Line Spectra. Parts I,II,III*, Copenhagen, 1918-1922.

<sup>12</sup> Più precisamente, POINCARÉ-LINDSTEDT per il caso non risonante, e POINCARÉ-VON ZEIPPEL per il caso risonante. Si veda a questo proposito il libro di MAX BORN (*Vorlesungen*

Rinvio al §8 una esposizione, sia pure sommaria, del procedimento tecnicamente non banale, in particolar modo nel caso risonante, per generare la teoria canonica delle perturbazioni, detta anche serie canonica delle perturbazioni, o serie delle perturbazioni classica, o anche *forma normale* (di BIRKHOFF nel caso particolare in cui la Hamiltoniana non perturbata sia quella di un sistema di oscillatori armonici)<sup>13</sup>. Mi limito qui a riportarne il risultato più rilevante per quanto riguarda la quantizzazione. I sistemi che si possono trattare tramite la teoria canonica delle perturbazioni sono i cosiddetti sistemi *quasi integrabili*, cioè i sistemi che si possono scrivere come perturbazione (la cui “intensità” è misurata da un “piccolo parametro”, denotato di solito con  $\epsilon$ ) di sistemi integrabili. La loro Hamiltoniana sarà pertanto scrivibile sotto la forma

$$H(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}, \epsilon) = H_0(\mathbf{J}) + \epsilon V(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}), \quad (2.8)$$

dove  $H_0$  è il termine “libero” o imperturbato, e quindi integrabile (dipende solo dalle azioni) e  $V(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi})$  rappresenta la perturbazione. Un esempio tipico di sistema quasi integrabile è costituito dal problema dei tre corpi della meccanica celeste quando si consideri una delle tre masse molto più piccola delle altre due.

Poiché il sistema è integrabile quando la Hamiltoniana dipende solo dalle azioni, lo scopo della teoria canonica delle perturbazioni è quello di eliminare il più possibile la dipendenza dagli angoli nella (2.8), tramite la costruzione di una famiglia di trasformazioni canoniche, che dipenderà da  $\epsilon$ , il cui effetto sarà quello di portare la dipendenza dagli angoli dall’ordine 1 in  $\epsilon$  come nella (2.8) ad un ordine quanto più elevato si può: se risulterà poi possibile rimuoverla a tutti gli ordini  $p \in \mathbb{N}$  diremo che la teoria canonica delle perturbazioni esiste appunto a tutti gli ordini. Questo caso si verifica<sup>14</sup> qualora le componenti del vettore frequenza  $\boldsymbol{\omega} = \nabla_{\mathbf{J}} H(\mathbf{J})$  soddisfino non solo la condizione di razionale

---

*über Atommechanik*, Springer Verlag, Berlin, 1925 [traduzione inglese: *Mechanics of the Atom*, Bell, London, 1960]) e il contributo di V.I. ARNOLD, V. KOZLOV, A.I. NEISHTADT nel terzo volume della *Encyclopedia of Dynamical Systems*, ed. V.I. ARNOLD, Springer Verlag, 1988, che contiene anche un cenno di storia.

<sup>13</sup> La teoria canonica delle perturbazioni può essere generata in due modi: il primo, quello appunto di POINCARÉ–LINDSTEDT–VON ZEIPPEL, è basato su un procedimento ricorrente di linearizzazione dell’equazione di HAMILTON–JACOBI ed è esposto con particolare lucidità nel libro di MAX BORN, tanto nel caso non risonante che in quello risonante; il secondo, introdotto una ventina d’anni fa da HORI e DEPRIT, e detto della derivata di LIE, è quello della ricerca della trasformazione canonica integrante mediante il flusso di una Hamiltoniana intermedia. Questo metodo è stato particolarmente studiato e applicato dalla scuola di Milano.

<sup>14</sup> Formalmente, come si dirà fra poco.

indipendenza ma anche la cosiddetta *condizione diofantina*<sup>15</sup>

$$|k_1\omega_1 + \dots + k_N\omega_N|^{-1} \leq C(k_1^2 + \dots + k_N^2)^\gamma, \quad (2.9)$$

dove  $C$  e  $\gamma > d/2$  sono costanti positive (dipendenti da  $\mathbf{J}$ ). In tal caso si ha:

TEOREMA

Per ogni numero naturale  $p$  esiste una trasformazione canonica (dipendente da  $\epsilon$ ) che trasforma le variabili azione-angolo  $(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi})$  in un nuovo insieme di variabili azione-angolo  $(\mathbf{A}, \boldsymbol{\alpha})$  tali che la Hamiltoniana  $H_\epsilon = H_0(\mathbf{J}) + \epsilon V(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi})$ , riscritta nelle nuove variabili, assume la forma:

$$K_\epsilon = H_0(\mathbf{A}) + \sum_{k=1}^p N_k(\mathbf{A})\epsilon^k + \epsilon^{p+1} R_{p+1}(\mathbf{A}, \boldsymbol{\alpha}). \quad (2.10)$$

A questo punto per i sistemi quasi-integrabili ottenuti come perturbazione di sistemi integrabili *non risonanti* vale senz'altro la seguente

REGOLA DI QUANTIZZAZIONE:

$$E_{n_1, \dots, n_N}^{BS}(\epsilon) = H_0(n_1 \hbar, \dots, n_N \hbar) + \sum_{k=1}^{\infty} N_k(n_1 \hbar, \dots, n_N \hbar)\epsilon^k. \quad (2.11)$$

È bene notare subito che la formula (2.11) è puramente formale se non si discutono prima i seguenti due punti molto seri:

- (1) Ad eccezione dei casi particolari rappresentati o dagli oscillatori armonici, in cui le frequenze non dipendono dalle azioni, o da perturbazioni  $V(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi})$  che ammettono solo un numero finito di termini nel loro sviluppo in serie di FOURIER, la condizione diofantina non può essere imposta facendo variare le azioni  $\mathbf{J}$ , o equivalentemente le frequenze  $\boldsymbol{\omega}(\mathbf{J})$ , in insiemi aperti. Basti pensare che in due gradi di libertà la condizione diofantina<sup>16</sup> significa che il rapporto fra le due frequenze deve essere un numero irrazionale approssimato “non troppo bene” dai razionali, mentre arbitrariamente vicino ad ogni irrazionale c'è appunto un razionale. Dunque

---

<sup>15</sup> Questa condizione deve essere imposta per controllare che i cosiddetti *piccoli denominatori*, cioè il primo membro di (2.9), non diventino “troppo piccoli” cioè non tendano a zero troppo rapidamente. Se ciò avvenisse non si potrebbe costruire la teoria canonica delle perturbazioni, poiché gli algoritmi che la generano richiedono comunque l'integrazione di una equazione differenziale lineare a coefficienti costanti sul toro per serie di FOURIER; ora nei coefficienti della serie di FOURIER della soluzione formale di quest'ultima il primo membro della (2.9) compare a denominatore, e quindi non si può affermare niente sulla convergenza della serie in assenza di una condizione del tipo della (2.9) stessa.

<sup>16</sup> Dal matematico greco DIOFANTO (III secolo avanti Cristo), il primo ad occuparsi in maniera sistematica dell'approssimazione dei numeri irrazionali mediante i razionali.

affinché la restrizione delle azioni ai multipli interi di  $\hbar$  sia possibile dovremo restringerci ad uno dei due casi precedenti;

- (2) Anche se la serie canonica esiste a tutti gli ordini, essa sarà divergente, salvo casi particolari altamente non generici. Questo fatto segue da un celebre teorema di POINCARÉ<sup>17</sup>. Dunque, anche considerando rimossa la restrizione sulla scelta delle azioni, non è chiaro il significato della somma. Questo punto molto delicato è però discusso chiaramente nel già citato trattato di BORN: al pari di POINCARÉ egli interpreta la somma (2.11) come uno sviluppo asintotico, scegliendo come criterio per arrestare la somma in ultima analisi il confronto con i dati sperimentali. Oggi non si fa certo nulla di diverso con gli sviluppi perturbativi dell'elettrodinamica quantistica. La discussione più lucida su questo punto fondamentale in fisica è sicuramente ancora quella originale di POINCARÉ (*Méthodes Nouvelles*, Vol. II, Cap. VII, §118: *Significati diversi della parola convergenza*) che riporto per esteso (osservando che oggi si può forse più generalmente leggere “matematici” al posto di “geometri” e “fisici” al posto di “astronomi”): *C'è una specie di malinteso fra i geometri e gli astronomi al riguardo del significato della parola “convergenza”. I geometri, preoccupati del rigore assoluto e spesso troppo indifferenti alla lunghezza dei calcoli inestricabili di cui intravedono la possibilità, senza sognarsi di intraprenderli effettivamente, dicono che una serie è convergente quando la somma dei termini tende verso un limite determinato, anche se i primi termini diminuiscono molto lentamente. Gli astronomi, al contrario, hanno l'abitudine di dire che una serie converge quando i primi venti termini, per esempio, diminuiscono molto rapidamente, anche se i termini successivi dovessero crescere indefinitamente. Così, per prendere un esempio semplice, consideriamo le due serie che hanno per termine generale*

$$\frac{1000^n}{1 \cdot 2 \cdots n} \quad \text{e} \quad \frac{1 \cdot 2 \cdots n}{1000^n}.$$

*I geometri diranno che la prima serie converge, e anche rapidamente, perché il milionesimo termine è molto più piccolo del 999.999-esimo; ma considereranno la seconda divergente, perché il termine generale può crescere oltre ogni limite. Gli astronomi, al contrario,*

---

<sup>17</sup> Il teorema in questione afferma in sostanza che, sotto condizioni altamente generiche, una Hamiltoniana quasi integrabile  $H(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}, \epsilon)$  che si riduca a un problema integrabile per  $\epsilon = 0$  e che sia olomorfa in tutte le variabili  $(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}, \epsilon)$  non ammette altro integrale primo olomorfo in  $(\mathbf{J}, \boldsymbol{\phi}, \epsilon)$  oltre all'energia, cioè alla Hamiltoniana stessa. Se la teoria canonica delle perturbazioni convergesse, esisterebbero invece  $N$  integrali primi olomorfi, le nuove azioni  $A_i$ . Questo risultato viene enunciato da POINCARÉ come *Non existence des integrales uniformes* e costituisce il Capitolo VIII del primo volume dei *Méthodes Nouvelles de la Mécanique Céleste*, Paris, Gauthier Villars, 1892.

*considereranno divergente la prima serie, perché i primi 1000 termini vanno in crescendo, e la seconda convergente, perché i primi 1000 termini vanno in decrescendo e questa decrescenza all'inizio è molto rapida. Le due regole sono legittime: la prima nelle ricerche teoriche, la seconda nelle applicazioni numeriche. Ambedue devono regnare, ma in due territori separati di cui è importante conoscere bene le frontiere. Gli astronomi non le conoscono sempre in modo molto preciso, ma le oltrepassano raramente; l'approssimazione di cui si contentano li mantiene di solito molto al di qua; d'altra parte il loro istinto li guida e, se esso li ingannasse, il controllo dell'osservazione li avvertirebbe prontamente del loro errore.*

- (3) Rimanendo in quest'ordine di idee è possibile dimostrare tramite opportuni troncamenti della serie canonica <sup>18</sup> che tutti i moti quasi periodici generati dalla Hamiltoniana imperturbata  $H_0(\mathbf{J})$  rimangono stabili su scale di tempo esponenzialmente lunghe: tipicamente, dell'ordine  $\exp \epsilon^{-a}$  per un qualche  $a > 0$ . Questi risultati lasciano però aperto il problema assai più profondo di sapere se i moti imperturbati rimangono davvero stabili una volta introdotta la perturbazione, cioè rimangono quasi periodici per l'eternità e non solo per un intervallo di tempo sia pur esponenzialmente lungo. A questa domanda ha dato una risposta essenzialmente positiva, almeno per  $\epsilon$  piccolo, la teoria di KOLMOGOROV-ARNOLD-MOSER (brevemente, teoria KAM <sup>19</sup>). In questo contesto, quello della quantizzazione, la variante di maggior interesse della teoria KAM è quella di ARNOLD. Essa permette di costruire, tramite un procedimento diverso dalla teoria canonica delle perturbazioni ma ad essa collegato (la cosiddetta iterazione di KOLMOGOROV, nota anche come metodo di NEWTON, o metodo superconvergente), una trasformazione

---

<sup>18</sup> Il lavoro più importante apparso in tempi recenti a questo proposito sembra essere stato quello di N.N. NEKHOROSHEV: *An Exponential Estimate of the Stability Time for Nearly Integrable Hamiltonian Systems*, Russian Math. Surveys **31** (1977) 1-65, ampiamente ripreso dalla scuola italiana (BENETTIN, GALGANI, GALLAVOTTI, GIORGILLI e altri).

<sup>19</sup> I lavori originali sono quelli di A.N. KOLMOGOROV: *On conservation of conditionally periodic motions under small perturbation of the Hamiltonian*, Doklady Akad.Nauk SSSR **98** (1954) e *General Theory of dynamical systems and classical mechanics*, Proceedings Int. Congress of Mathematicians, Amsterdam, 1954 (ambedue in russo); V.I. ARNOLD: *Proof of A.N. Kolmogorov's Theorem on the preservation of quasi-periodic motions under small perturbations of the Hamiltonian*, Russian Math. Surveys **18** (1963) 9-36 e *Small denominators and problems of stability of the motion in classical and celestial mechanics*, Russian Math. Surveys **18** (1963) 85-192; J. MOSER: *On invariant curves of area preserving mappings of an annulus*, Nachr. Akad. Wiss. Göttingen II, Math. Phys. Kl. 1962, 1-20 e *A rapidly convergent iteration method and nonlinear partial differential equations*, Ann. Sc. Norm. Sup., Pisa, 1966. Esistono poi molte dimostrazioni ulteriori, in molte varianti, di questa teoria o di alcune sue parti. Due di queste, in italiano, sono contenute nei trattati di C. CERCIGNANI: *Spazio, tempo, movimento*, Zanichelli, Bologna, 1976, e G. GALLAVOTTI: *Meccanica Elementare*, Boringhieri, Torino, 1980, che possono essere molto utilmente consultati anche per la teoria canonica delle perturbazioni.

canonica che coniuga la Hamiltoniana  $H_\epsilon$  con una nuova Hamiltoniana, denotata con  $K^\infty(\mathbf{J})$ , che dipende solo dalle azioni. Il punto essenziale è che l'insieme di definizione di questa trasformazione, pur avendo misura di LEBESGUE che tende a diventare quella dell'intero spazio delle fasi per  $\epsilon \rightarrow 0$ , non può essere un insieme aperto: anzi, si tratta in generale di un insieme di CANTOR. In altre parole, scelta a caso una  $N$ -pla fissata di valori delle azioni, non è dato sapere a priori se esse apparterranno all'insieme di integrabilità o no.

Abbiamo visto, però, che non è assolutamente possibile accontentarsi di un risultato valido solo nel caso non risonante, perché sarebbe impossibile applicarlo ai sistemi esprimibili come perturbazioni dell'atomo di idrogeno: ad esempio, all'atomo di elio, che corrisponde esattamente, come tutti sanno, al problema classico dei tre corpi trattato come piccola perturbazione di quello dei due. A questo scopo occorre introdurre la cosiddetta teoria canonica delle perturbazioni *secolare* o *risonante*, e all'interno di questa occorre poi fare una distinzione importante fra il caso intrinseco e quello accidentale.

Cominciando con il caso intrinseco, osserviamo che se il sistema ammette  $N - r$  relazioni di risonanza è possibile eliminare, mediante una trasformazione canonica lineare, la dipendenza da  $N - r$  azioni, cosicché la Hamiltoniana imperturbata sarà funzione (con il consueto abuso di notazione) delle sole azioni  $J_1, \dots, J_r : H_0 = H_0(J_1, \dots, J_r)$ <sup>20</sup>. In generale la piccola perturbazione  $V$  dipenderà invece da tutte le azioni ( $J_1, \dots, J_N$ ); le variabili  $(J_i, \phi_i) : i = r + 1, \dots, N \equiv (\mathbf{J}_L, \boldsymbol{\phi}_L)$  sono dette variabili *lente* perché il loro moto è interamente governato dalla piccola perturbazione, che è d'ordine  $\epsilon$ <sup>21</sup>. Le restanti variabili sono dette ovviamente *veloci* ( $\mathbf{J}_V, \boldsymbol{\phi}_V$ ). Indichiamo con  $\bar{V}(\mathbf{J}_V, \mathbf{J}_L, \boldsymbol{\phi}_L)$  la media della piccola perturbazione  $V$  sulle variabili veloci. Si ha allora:

#### TEOREMA

*Supponiamo che, per ogni fissato valore delle azioni veloci  $\mathbf{J}_V$  la Hamiltoniana  $\bar{V}(\mathbf{J}_V, \mathbf{J}_L, \boldsymbol{\phi}_L)$ , considerata come funzione delle variabili canoniche lente  $(\mathbf{J}_L, \boldsymbol{\phi}_L)$ , sia completamente e canonicamente integrabile*

<sup>20</sup> Esempio: le variabili di DELAUNAY del problema dei due corpi:  $\Theta = J_3$  (proiezione del momento angolare lungo l'asse  $z$  normale al piano dell'eclittica),  $G = J_1 + J_2$  (modulo del momento angolare diretto lungo la normale al piano dell'orbita:  $\Theta = G \cos i$ ,  $i$  l'angolo d'inclinazione fra il piano dell'eclittica e quello dell'orbita),  $L = G + \Theta$  (radice quadrata del prodotto della massa ridotta con il semiasse maggiore dell'orbita) con i corrispondenti angoli  $\tau$  (longitudine della linea dei nodi nel piano dell'eclittica),  $g$  (longitudine dell'asse maggiore dell'ellisse nel piano dell'orbita) e  $\ell$  (anomalia media del moto radiale, o epoca del passaggio al perielio). In queste variabili si ha ovviamente  $H_0(L, G, \Theta) = H_0(L) = -KL^{-2}$ .

<sup>21</sup> Pertanto le variazioni degli elementi che non si muovono se non per effetto della perturbazione, come ad esempio la longitudine dei nodi e dell'asse maggiore nel caso Kepleriano, sarà osservabile solo su tempi molto lunghi, dell'ordine dei secoli nel caso appena ricordato, che corrisponde alla precessione degli equinozi. Da qui la ragione del termine *secolare*.

nel senso del teorema di LIOUVILLE–ARNOLD. Allora le formule (2.10) e (2.11) conservano la loro validità nel senso seguente:

- (1) La trasformazione canonica integrante del teorema di LIOUVILLE–ARNOLD agisce ovviamente come l'identità sulle variabili veloci, e  $N_1(\mathbf{A})$  è semplicemente la Hamiltoniana  $\bar{V}(\mathbf{J}_V, \mathbf{J}_L, \boldsymbol{\phi}_L)$  riespressa su queste nuove variabili, che eliminano la dipendenza dagli angoli;
- (2) Per renderci conto di come appaiono le rimanenti  $r$  condizioni di quantizzazione, e di come esse rimuovano la molteplicità, consideriamo il caso particolare di due gradi di libertà. Qui ci sono due azioni,  $J_V = A_V$  e  $A_L$ . Quello che in realtà si dimostra è che la regione di integrabilità nello spazio delle azioni è quella per cui  $A_L < A_V$ . Pertanto: la prima condizione di quantizzazione è, come sopra,  $A_V = n_1 \hbar$  e fa intervenire solo la parte imperturbata; d'altra parte, fissato il valore quantizzato di  $A_V$ , la seconda condizione è  $A_L = n_2 \hbar$  con  $n_2 = 1, \dots, n_1$  e, per ogni valore fissato di  $n_1$ , la formula (2.11) dà esattamente  $n_1$  autovalori diversi rimuovendo così la molteplicità.

Il caso delle risonanze accidentali è assai più complicato. Anch'esso è trattato diffusamente nel libro di BORN<sup>22</sup>. Riassumendo brevemente, possiamo dire che in questo caso la trasformazione canonica lineare che disaccoppia le variabili lente da quelle veloci agisce solo localmente nello spazio delle azioni, cioè in un piccolo intorno dell'azione risonante, e in questo intorno rende la Hamiltoniana libera indipendente dalle azioni lente. Il prezzo da pagare è però la ridefinizione della perturbazione, in cui ora entra anche il pezzo di Hamiltoniana libera calcolato "lontano dalle azioni risonanti". Il risultato di tutto ciò è che in generale non c'è più da attendersi uno sviluppo in serie di potenze intere della piccola perturbazione  $\epsilon$ , ma in generale in potenze di  $\epsilon^{1/m}$ , dove  $m \geq 2$  è l'ordine di annullamento delle derivate delle frequenze nei punti critici, cioè alle azioni risonanti. Scritta la teoria canonica delle perturbazioni la si quantizza al solito modo, eliminando la molteplicità con il medesimo procedimento precedentemente descritto per il caso della degenerazione intrinseca. Dopo questo breve cenno non ritorneremo più su questo caso.

Concludo questo capitolo ritornando all'applicazione forse più importante della teoria canonica delle perturbazioni nel caso intrinsecamente risonante, e cioè al problema dei tre corpi della meccanica celeste. La medesima Hamiltoniana è in fisica microscopica quella dell'atomo di elio, come è stato già ricordato<sup>23</sup>. L'ultimo capitolo del più volte citato libro di BORN descrive in

<sup>22</sup> Riprendendo direttamente i metodi introdotti da POINCARÉ nel Cap. XIX dei *Methodes Nouvelles de la Mecanique celeste*: serie di BOHLIN.

<sup>23</sup> L'applicazione a questo caso offre ulteriori difficoltà oltre a quelle accennate in precedenza. Anzitutto la Hamiltoniana imperturbata non è quella del problema dei due corpi, ma quella corrispondente a due simili sistemi, considerati indipendenti; inoltre la degenerazione rappresenta un caso di *degenerazione limite*, sul quale non insistiamo. La prima difficoltà viene eliminata fin dall'inizio considerando solo il caso particolare che classicamente corrisponde al cosiddetto

dettaglio il calcolo dei termini spettrali dell'atomo di elio, tanto per la serie dell'ortoelio quanto per quella del paraelio, mediante la teoria canonica delle perturbazioni risonanti <sup>24</sup>. Vale senz'altro la pena di riportare in dettaglio le conclusioni di questo calcolo e le conseguenze che BORN stesso ne trae. Anzitutto, la restrizione al caso del problema dei tre corpi planare ristretto circolare si fa perché essa permette di descrivere i livelli molto eccitati, rappresentandoli mediante una forma del tipo di BALMER. I valori predetti sono però sballati di un ordine di grandezza rispetto a quelli osservati. BORN pone l'osservazione che segue a chiusura del suo trattato <sup>25</sup>:

*“L'applicazione consistente dei principi della teoria dei quanti stabiliti nel Cap. II <sup>26</sup> cioè il calcolo del moto secondo le leggi della meccanica classica e la scelta degli stati stazionari a partire dai moti classici attraverso la determinazione delle variabili d'azione come multipli interi della costante di PLANCK conduce all'accordo con l'esperienza solo nei casi in cui si tratta del moto di un singolo elettrone; essa fallisce subito appena si passi alla considerazione del moto di ambedue gli elettroni nell'atomo di elio.*

Questo non è sorprendente. Infatti i principi impiegati non sono fondamentalmente fra loro coerenti. Mentre nel descrivere l'interazione fra atomi e radiazione la condizione delle frequenze di BOHR fa intervenire una legge alle differenze invece della legge differenziale classica, nel caso dell'interazione fra più elettroni si opera finora sempre con la legge differenziale classica. La metamorfosi *sistematica* della meccanica classica in una meccanica atomica discontinua è lo scopo verso il quale deve tendere la teoria dei quanti.”

Queste parole, scritte probabilmente nei primi mesi del 1924, si possono considerare come l'atto di morte della “vecchia teoria dei quanti”, nel senso della presa d'atto definitiva che essa non poteva costituire la teoria “vera” della fisica microscopica di quei tempi.

Se ora ci chiediamo quale sia stata l'influenza del lavoro di EINSTEIN su tutto questo sviluppo della teoria semiclassica la risposta è: nessuna. Non se ne trova traccia, infatti, non solo nel libro di BORN ma nemmeno in quello, meno avanzato ma certamente più diffuso, di SOMMERFELD, *Atombau und Spektrallinien [Costituzione dell'atomo e righe spettrali]*, da sempre considerato il classico del settore. Siamo quindi obbligati a domandarci, con

---

*problema dei tre corpi planare ristretto circolare* in cui due dei tre corpi, detti *primari*, sono vincolati a percorrere un'orbita Kepleriana circolare, la cui energia è qui quantizzata secondo la regola solita, mentre il terzo si muove sotto l'azione del potenziale Newtoniano da loro generato.

<sup>24</sup> In effetti BORN riporta i risultati originali ottenuti da lui stesso e da WERNER HEISENBERG, allora suo assistente a Göttingen: si veda M. BORN, W. HEISENBERG, *Zeitschrift für Physik* **16** (1923) 229.

<sup>25</sup> I corsivi sono miei.

<sup>26</sup> Del trattato in questione.

GUTZWILLER<sup>27</sup>: come mai un contributo del fisico più famoso dell'epoca sul problema di maggior attualità nella fisica di allora è stato del tutto ignorato? Per GUTZWILLER questo fatto è inesplicabile. Alla luce di quanto esposto sopra, invece, io penso che se ne possa trovare un motivo.

Cominciamo dunque col richiamare brevemente i risultati principali di EINSTEIN. Egli parte dall'osservazione seguente: in un grado di libertà la condizione di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD, detta anche dell'integrale ciclico di SOMMERFELD, o integrale d'azione, che riscriviamo di seguito per comodità

$$\begin{cases} J = \oint p dq = nh, \\ p = \sqrt{2m(E - V(q))}, \end{cases} \quad (2.12a)$$

dove l'integrale di circuito significa l'integrale esteso all'intervallo fra i due punti di inversione del moto di energia  $E$ , è ben definita, nel senso che è invariante rispetto ad ogni trasformazione canonica. In  $l$  gradi di libertà invece, *pur ammettendo che il sistema sia integrabile nel senso ricordato nel §2, e che tutti i moti siano quindi quasi-periodici*, non si possono assumere in generale come  $l$  condizioni di quantizzazione indipendenti le generalizzazioni immediate di (2.12a), vale a dire le condizioni

$$\oint p_i dq_i = n_i h : i = 1, \dots, l, \quad (2.12b)$$

dove l'integrale  $i$ -esimo si intende esteso all'intervallo compreso fra due punti di inversione<sup>28</sup> della coordinata  $i$ -esima. Infatti la (2.12a) è invariante per trasformazioni canoniche perché, come ovvio in un solo grado di libertà, la forma  $pdq$  è sempre esatta, cioè esiste  $G$  tale che  $d(pdq) = dp \wedge dq = dG$ , mentre invece le (2.12b) non lo sono, giacché dall'invarianza della 1-forma naturale su  $\mathbb{R}^{2l}$ ,  $\omega = \sum_{i=1}^l p_i dq_i$ , cioè dalla condizione di differenziabilità esatta della 2-forma simplettica

$$d(\omega) = \sum_{i=1}^l dp_i \wedge dq_i = dG \quad (2.13)$$

non segue affatto l'invarianza delle singole 1-forme  $p_i dq_i$ . In altre parole, in generale le (2.12b) non definiscono affatto le variabili d'azione del sistema<sup>29</sup>. Dopo di ciò EINSTEIN passa a chiedersi quali siano queste condizioni di quantizzazione invarianti; equivalentemente, quali siano le espressioni invarianti degli integrali d'azione. La risposta che egli dà, con ragionamenti non troppo

<sup>27</sup> *Loc. cit.*, p. 233.

<sup>28</sup> Che in generale potrebbero non esistere, salvo il caso della separabilità di cui in seguito.

<sup>29</sup> Si ricordi che il sistema deve essere integrabile.

dettagliati dal punto di vista matematico ma a mio parere del tutto rigorosi dal punto di vista sostanziale, è esattamente quella che si trova nei libri odierni <sup>30</sup>:

$$J_i = \int_{\gamma_i} \omega : \quad i = 1, \dots, l, \quad (2.14)$$

dove le  $\gamma_i : i = 1, \dots, l$  sono le  $l$  curve topologicamente inequivalenti sulla varietà di dimensione  $l$  definita dagli  $l$  integrali primi (che, come sappiamo col senno di poi dal teorema di LIOUVILLE–ARNOLD, sono topologicamente equivalenti a tori di dimensione  $l$ ). Dunque in questo lavoro EINSTEIN corregge, con molto tatto, un errore sostanziale di SOMMERFELD (condiviso come vedremo anche da PLANCK e da EPSTEIN, ma non da SCHWARZSCHILD).

Osserviamo ora che, se le (2.12b) in generale non definiscono le variabili di azione di un sistema integrabile, in un caso particolare molto importante lo fanno. Questo caso particolare è quello in cui il sistema integrabile lo sia per separazione delle variabili, il che equivale a dire (salvo finezze su cui non insistiamo) che l'equazione di HAMILTON–JACOBI stazionaria per il sistema in esame sia integrabile per separazione delle variabili <sup>31</sup>. Se ciò risulta possibile, l'integrazione viene ricondotta a quella di  $l$  equazioni differenziali ordinarie del secondo ordine, ciascuna delle quali ammette un integrale primo. Essenzialmente, quindi, ci si riporta alla costruzione delle variabili d'azione per un sistema di  $l$  Hamiltoniane indipendenti ad un solo grado di libertà, e le variabili d'azione risultano così definite dalle (2.12b), che in questo caso equivalgono a  $l$  condizioni (2.12a) indipendenti. Ora, (si veda sempre la bibliografia citata nelle note precedenti) in *tutti e soli* i sistemi canonicamente integrabili fino ad allora noti è possibile costruire *esplicitamente* le variabili azione–angolo, ed esprimere *esplicitamente* la Hamiltoniana come funzione delle azioni, se e solo se l'equazione di HAMILTON–JACOBI è integrabile per separazione delle variabili <sup>32</sup>. Poiché, dato un sistema quasi–integrabile, per costruirne la teoria canonica delle perturbazioni occorre conoscere esplicitamente le coordinate azione–angolo del problema imperturbato, ne segue che in pratica tutti i casi in cui la regola di quantizzazione di BOHR–SOMMERFELD

<sup>30</sup> Si veda ad esempio il più classico di tutti, quello di V.I. ARNOLD: *Metodi matematici della meccanica classica*, Editori Riuniti, Roma, 1977, §50C, formula (5).

<sup>31</sup> La classificazione dei casi in cui l'equazione di HAMILTON–JACOBI può essere integrata per separazione delle variabili è uno dei problemi più classici della meccanica analitica. I risultati principali sono stati ottenuti dalla scuola italiana (GIACINTO MORERA, TULLIO LEVI–CIVITA, PIETRO BURGATTI, GIULIO DALL'ACQUA, CATALDO AGOSTINELLI, per citare solo gli autori più importanti). Si veda ad esempio il classico trattato di E. WHITTAKER (allievo anch'egli di LEVI–CIVITA): *Analytical Dynamics*, Cambridge University Press, 1932. Per una bibliografia pressoché completa dei lavori successivi dovuti alla scuola italiana si veda il trattato di C. AGOSTINELLI e A. PIGNEDOLI: *Meccanica Analitica* (2 Voll.), Mucchi, Modena, 1988.

<sup>32</sup> Solo da meno di trent'anni fa sono stati individuati diversi sistemi integrabili ma non separabili (ad esempio, il reticolo di TODA o il sistema di CALOGERO) grazie all'introduzione di strumenti tecnici nuovi in questo campo quali lo “scattering inverso” e la “coppia di LAX”.

è applicabile sono proprio quelli in cui il sistema è integrabile per separazione delle variabili oppure una sua perturbazione. Dunque la conclusione di EINSTEIN, pur fondamentale dal punto di vista concettuale, era ininfluenza dal punto di vista concreto, perché non esisteva alcun esempio in cui le condizioni di quantizzazione (2.14) di EINSTEIN fossero applicabili dove non lo erano le (2.12b) di SOMMERFELD. Non è per nulla sorprendente, a mio parere, che il lavoro di EINSTEIN non abbia avuto seguito nella letteratura fisica di quei tempi: non era infatti utilizzabile per affrontare alcun problema concreto. Più sorprendente è forse il fatto che, nel corso di tutti gli anni dal 1917 fino ad oggi, nessuno abbia mai attribuito a lui la formula che esprime le variabili d'azione per un arbitrario sistema canonicamente integrabile.

Le condizioni di quantizzazione espresse come integrali di circuito di SOMMERFELD<sup>33</sup> (2.12b) erano state immediatamente dopo ricavate anche da P. DEBYE, MAX PLANCK<sup>34</sup>, P.S. EPSTEIN e K. SCHWARZSCHILD<sup>35</sup>. Nel lavoro citato, poi, K. SCHWARZSCHILD fu il primo a considerare il caso generale, e quindi anche la degenerazione, ed a notare che *per i sistemi separabili* le condizioni di SOMMERFELD sono invarianti. Questo lavoro fondamentale non è però citato da EINSTEIN. Il procedimento di quantizzazione nel caso generale di un sistema integrabile con un numero arbitrario di gradi di libertà ed un numero parimenti arbitrario di relazioni di risonanza (che è essenzialmente quello brevemente descritto nel §2) è dovuto a due allievi di PAUL EHRENFEST, e cioè J.M. BURGERS e H.A. KRAMERS<sup>36</sup>. L'applicazione sistematica della teoria canonica delle perturbazioni alla quantizzazione è infine dovuta, sviluppando idee originali di BOHR, a MAX BORN e alla sua scuola<sup>37</sup> e a P.S. EPSTEIN<sup>38</sup>.

---

<sup>33</sup> Il lavoro originale è A. SOMMERFELD, Sitzungsberichte der K. Bay. Akad. 1915, p. 425.

<sup>34</sup> In connessione con le sue ricerche su una migliore derivazione della sua classica formula del 1900 sulla radiazione di corpo nero, si veda PLANCK, Verhandlungen der Deutschen Phys. Ges. 17, pp. 407 e 438.

<sup>35</sup> Gli ultimi due autori si occupavano della teoria dell'effetto STARK (si veda P.S. EPSTEIN, Annalen der Physik 50 (1916) 489 e K. SCHWARZSCHILD, Sitzungsberichte der Berl. Akad. (1916) p. 548). In questi lavori vengono calcolati i livelli di BS mediante la già ricordata separabilità dell'equazione di HAMILTON-JACOBI in coordinate paraboliche. L'anno successivo K. SCHWARZSCHILD, nato nel 1893, otteneva la soluzione delle equazioni di EINSTEIN che porta il suo nome, e moriva in conseguenza di una malattia polmonare contratta prestando servizio sul fronte russo.

<sup>36</sup> I risultati sono contenuti nelle loro tesi di dottorato: si veda J.M. BURGERS: *Het Atoommodel van RUTHERFORD-BOHR [Il modello atomico di RUTHERFORD-BOHR]*, Diss., Leyden (1918), e H.A. KRAMERS: *Intensity of Spectral Lines*, Diss., Leyden (1919). J.M. BURGERS e H.A. KRAMERS sono forse più noti per altri risultati: il primo per l'equazione a derivate parziali parabolica non lineare che porta il suo nome che, essendo solubile, costituisce un modello importante per diversi problemi di meccanica dei fluidi; il secondo è il K del metodo WKB.

<sup>37</sup> Si veda M. BORN e E. BRODY, Zeitschrift für Physik 6 (1921) 140.

<sup>38</sup> Zeitschrift für Physik 8 (1922) 211.

### §3. Quantizzazione canonica: rappresentazione di Schrödinger e teorema di unicità di Von Neumann

Proseguendo nello schema che ci siamo dati, richiamiamo ora come si imposta matematicamente il problema della quantizzazione nell'odierna meccanica quantistica per sistemi ad un numero finito di gradi di libertà.

È ben noto che la fisica, tanto tramite analisi concettuali (ad esempio, l'onda pilota di DE BROGLIE), quanto tramite osservazioni concrete sulla natura ondulatoria della materia, conduce a fondare la descrizione quantistica dei sistemi microscopici ad un numero finito di gradi di libertà su alcuni postulati di natura strettamente matematica. Non occorre qui riportare per esteso e con la massima precisione tutti gli assiomi su cui poggia la formulazione matematica della meccanica quantistica. Per i nostri scopi basterà ricordare i seguenti postulati, espressi in forma volutamente poco formalizzata: i principi di sovrapposizione, corrispondenza e indeterminazione conducono ad ammettere quanto segue:

- (1) Gli stati (puri) di un sistema quantistico corrispondente ad un dato sistema Hamiltoniano classico sono vettori di norma uno in uno spazio di HILBERT complesso separabile;
- (2) Le variabili dinamiche classiche, cioè le funzioni delle coordinate canoniche, sono in corrispondenza univoca con gli operatori lineari autoaggiunti che agiscono nello spazio di HILBERT di cui al punto (1);
- (3) Se ad una variabile dinamica  $f$  è univocamente associato l'operatore autoaggiunto  $F$ , la cui misura spettrale è denotata con  $E_F(\lambda)$ , allora la distribuzione di probabilità del risultato di una misura di  $F$  sullo stato  $\psi$  vale  $\langle \psi, E_F(\lambda)\psi \rangle$ , cosicché l'aspettazione matematica del risultato, (o *valor medio sullo stato*  $\psi$ ) è data da <sup>39</sup>

$$\langle F \rangle = \langle \psi, F\psi \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d\langle \psi, E_F(\lambda)\psi \rangle.$$

Questi principi non specificano come costruire questa corrispondenza univoca, cioè come trovare esplicitamente lo spazio di HILBERT astratto (lo spazio dei vettori *ket*, secondo la locuzione di DIRAC) e, una volta trovato, come individuare la corrispondenza tra gli operatori autoaggiunti che ivi agiscono e le variabili dinamiche classiche. Sappiamo però che il ragionamento originale che portò Schrödinger a scrivere la sua equazione, basato sull'onda di materia di DE BROGLIE, stabilisce questa corrispondenza nel caso particolare della Hamiltoniana classica del tipo  $H_c(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{q})$ : i vettori di stato sono in tal caso identificabili con le funzioni  $\psi(\mathbf{q}) \in L^2(\mathbb{R}^3)$  (“funzioni d’onda”) e

---

<sup>39</sup> Per definizione di misura spettrale, l'integrando è in realtà diverso da zero solo sul supporto dello spettro di  $F$ .

l'equazione stazionaria di SCHRÖDINGER

$$H\psi \equiv (-\hbar^2\Delta + V)\psi = E\psi \quad (3.1)$$

può essere immediatamente ottenuta (formalmente) considerando in  $L^2(\mathbb{R}^3)$  l'operatore  $H$  la cui espressione differenziale si ottiene sostituendo alle variabili canoniche  $\mathbf{p}$  l'operatore  $\hat{p} = -i\hbar\nabla$  e alle variabili  $q_i : i = 1, 2, 3$  l'operatore di moltiplicazione  $\hat{q}_i$  per tale variabile, denotato sempre con tradizionale abuso di notazione ancora con  $q_i$ :  $\hat{q}_i = q_i$ . È immediato calcolare il commutatore fra  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$ :  $[\hat{p}_i, \hat{q}_j] \hat{=} i\hbar\delta_{i,j}$ , cioè  $[\hat{p}_i, \hat{q}_j] = i\hbar\{q_i, p_j\}$  dove, al solito,  $\{q, p\}$  denota la parentesi di POISSON delle coordinate canoniche  $(p, q)$ . La corrispondenza biunivoca fra variabili dinamiche ed operatori autoaggiunti può dunque essere costruita nel modo seguente: sia  $A(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  una variabile dinamica, cioè, come si è detto, una qualsiasi funzione (decente) delle coordinate canoniche  $(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ . Allora l'operatore che ad essa corrisponde in  $L^2(\mathbb{R}^3)$  ha l'espressione differenziale  $A(-i\hbar\nabla, \mathbf{q})$ .

Prima di procedere oltre è importante precisare due cose: primo, poiché gli operatori  $\hat{p}\hat{q}$  non commutano, mentre le variabili dinamiche classiche  $\mathbf{q}, \mathbf{p}$  ovviamente sì, se la  $f(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  contiene "termini misti", cioè termini che non sono funzioni delle sole  $\mathbf{p}$  o delle sole  $\mathbf{q}$ <sup>40</sup>, allora per ottenere sempre il medesimo operatore si deve generalizzare il procedimento precedente con la seguente regola, dovuta a WEYL: si scrive dapprima il termine misto in una forma che faccia apparire le  $\mathbf{p}$  e le  $\mathbf{q}$  in modo simmetrico, e si "quantizza" quest'ultima espressione, cioè si scrive l'operatore differenziale formale che le corrisponde, nel modo precedente. Ad esempio, l'operatore differenziale che corrisponde alla variabile dinamica  $pq$  sarà  $\frac{1}{2}(\hat{p}\hat{q} + \hat{q}\hat{p})$  poiché  $pq = qp = \frac{1}{2}(qp + pq)$ . Secondo: se le variabili dinamiche classiche sono a valori reali, questo procedimento associa loro degli operatori differenziali solo *formalmente* autoaggiunti in  $L^2$ . L'effettiva autoaggiunzione va verificata caso per caso, e ciò di solito costituisce un problema matematico non banale. Si consideri ad esempio il caso che si incontra più di frequente, cioè quello in cui la Hamiltoniana classica non dipende dal tempo (e quindi coincide con l'energia del sistema) ed ha la forma  $H = \mathbf{p}^2 + V(\mathbf{q})$ . L'operatore ad esso associato dalla corrispondenza precedentemente descritta è come ben noto l'operatore energia quantistico, la cui espressione formale è  $H = -\hbar^2\Delta + V(\mathbf{q}) \equiv T + V$ , con il consueto significato delle notazioni. Dal punto di vista matematico questa espressione è puramente formale se non si specifica il dominio  $D(H) \subset L^2$  su cui essa deve agire<sup>41</sup>. L'individuazione del dominio, cioè della varietà lineare di funzioni (eventualmente generalizzate) sottoinsieme di  $L^2$  su cui definire  $H$

<sup>40</sup> Oppure di  $p_i, q_j$  con  $i \neq j$ , come ad esempio per il momento angolare:  $L_1 = p_3q_2 - p_2q_3, L_2 = p_1q_3 - p_3q_1, L_3 = p_1q_2 - p_2q_1$ .

<sup>41</sup> È bene tenere presente che la specificazione del dominio non è una sottigliezza matematica del tutto ininfluenza sulla fisica. Al contrario, operatori definiti dalla *medesima* espressione

in modo che coincida con il proprio aggiunto, o almeno che abbia una unica estensione che goda di tale proprietà <sup>42</sup>, è precisamente il punto di verifica non banale, perché dipende in maniera delicata dalle proprietà del potenziale  $V$  e quindi in ultima analisi dalla natura fisica del problema. Proprio per questo non ci si deve aspettare che una qualsiasi espressione differenziale formale del tipo  $H = -\hbar^2\Delta + V$  possa essere realizzata in uno ed un solo modo come operatore autoaggiunto in  $L^2$ . Questo non è vero, per esempio, quando  $V$  è il potenziale di una forza che classicamente sarebbe sufficiente a spingere il punto all'infinito in un tempo finito <sup>43</sup>.

Quanto sopra costituisce la soluzione di SCHRÖDINGER delle regole di commutazione canoniche, e definisce quella che in gergo si chiama rappresentazione di SCHRÖDINGER delle regole di commutazione canoniche, o “rappresentazione delle  $q$ ”. In altre parole, sono stati esplicitamente individuati uno spazio di HILBERT (lo spazio  $L^2$ , per l'appunto), i cui vettori sono gli stati (puri) quantistici, e degli operatori  $\hat{p} = -i\hbar\nabla_q$   $\hat{q} = q$  che soddisfano le regole canoniche di commutazione,

$$[\hat{q}_j] \hat{=} i \quad \hbar\{p_i, q_j\} \equiv i\hbar I, \quad (3.2)$$

a partire dai quali si può associare in maniera univoca un operatore formalmente autoaggiunto  $\hat{f}$  in  $L^2$  tramite la regola di SCHRÖDINGER-WEYL.

È del tutto spontaneo chiedersi se questa rappresentazione sia o no unica: siamo proprio costretti a fare la meccanica quantistica in questo ambiente (spazio dei *ket* =  $L^2$  delle coordinate, variabili dinamiche  $\rightarrow$  operatori differenziali <sup>44</sup>) o possiamo scegliercene un altro? Una prima risposta ovvia è: no, ce n'è almeno un altro, quello che i fisici chiamano “rappresentazione delle  $p$ ”, o degli impulsi, e i matematici spazio duale rispetto alla trasformazione di FOURIER: qui come è noto le  $\hat{p}$  e le  $\hat{q}$  si scambiano il ruolo. Ben più significativa è l'osservazione che la prima realizzazione concreta delle (3.2) non è avvenuta tramite le funzioni d'onda di SCHRÖDINGER, cioè tramite la *meccanica ondulatoria* ma tramite la rappresentazione degli stati quantistici come

---

differenziale, ma su domini *differenti*, possono avere proprietà drammaticamente diverse. Ad esempio l'operatore  $\hat{p} = -i\hbar\partial_q$  *non* è autoaggiunto, e il suo spettro coincide con l'intero piano complesso, se lo si considera come operatore in  $L^2(0, 1)$  definito su tutte le funzioni derivabili nulle agli estremi (fisicamente, la situazione della buca infinita) mentre è autoaggiunto, e il suo spettro consiste nei punti  $\{2\pi n : n = 0, \pm 1, \pm 2 \dots\}$  se invece lo si considera definito su tutte le funzioni derivabili che assumono lo stesso valore agli estremi (fisicamente, la situazione del rotatore)

<sup>42</sup> Gli operatori che ammettono una sola estensione autoaggiunta si dicono *essenzialmente autoaggiunti*.

<sup>43</sup> Per questioni di tal genere, e più in generale per il problema dell'autoaggiunzione, si veda ad esempio il trattato di M. REED e B. SIMON: *Methods of Modern Mathematical Physics*, Vol. II, Cap. X.

<sup>44</sup> Pseudodifferenziali, se la variabile dinamica non è un polinomio in  $(p, q)$ ; per questo concetto si veda il successivo §6.

vettori nello spazio di HILBERT  $\ell^2$ , lo spazio lineare formato da tutti i vettori  $u$  costituiti da successioni a termini complessi:  $u = \{a_k\} : k = 0, 1, \dots$ , tali che  $\|u\|^2 \equiv \sum_{k=0}^{\infty} |a_k|^2 < +\infty$ . In questo spazio (si consideri per semplicità il caso di un solo grado di libertà) gli operatori agiscono come matrici infinite; è un fatto ben noto (e comunque verificabile facilmente) che le due matrici infinite tridiagonali

$$P = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 0 & 1 & \ddots & \ddots \\ 0 & 1 & 0 & 1 & \ddots \\ 0 & \ddots & 1 & 0 & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

e

$$Q = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ -1 & 0 & 1 & \ddots & \ddots \\ 0 & -1 & 0 & 1 & \ddots \\ 0 & \ddots & -1 & 0 & 1 \\ \vdots & \ddots & \ddots & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

soddisfano le relazioni di commutazione (3.2). Questa formulazione della meccanica quantistica, in cui lo spazio di HILBERT è lo spazio  $\ell^2$  e gli operatori  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$  le matrici infinite  $P$  e  $Q$ , è quella originaria di BORN, HEISENBERG e P. JORDAN ed è nota come *meccanica delle matrici*<sup>45</sup>. Tuttavia queste tre rappresentazioni sono unitariamente equivalenti, e quindi in realtà sono un semplice cambiamento di coordinate: infatti la trasformazione di FOURIER è una trasformazione unitaria di  $L^2$  in sé, e lo spazio  $\ell^2$  è unitariamente equivalente a  $L^2$  identificando ogni  $f \in L^2$  con la successione  $\{f_n\} : n = 0, 1, \dots$  dei suoi coefficienti di FOURIER rispetto ad un qualsiasi sistema ortonormale completo. Considerando in modo naturale come appartenenti alla stessa classe di equivalenza le rappresentazioni fra loro unitariamente equivalenti, cioè che possono essere ricondotte l'una all'altra mediante una semplice rotazione degli assi, è chiaro che il problema diventa allora quello di sapere se lo spazio di HILBERT astratto dei ket di DIRAC<sup>46</sup> può ammettere una realizzazione concreta non unitariamente equivalente a  $L^2$ , e se a loro volta gli operatori  $\hat{p}\hat{q}$  ammettono una rappresentazione non unitariamente equivalente alla

<sup>45</sup> Si veda in proposito il quaderno di S. BOFFI: *Il principio di indeterminazione*.

<sup>46</sup> Il fatto che le tre realizzazioni concrete della meccanica quantistica ricordate sopra, rispettivamente la meccanica ondulatoria nello spazio delle coordinate o in quello degli impulsi e la meccanica della matrici, siano tre rappresentazioni equivalenti di una formulazione astratta, cioè "indipendente dalle coordinate", che si può dare a tale teoria, costituisce appunto il fatto saliente della formulazione di VON NEUMANN in termini di spazi Hilbertiani astratti o, equivalentemente, di quella di DIRAC in termini dei vettori bra e ket.

derivazione e alla moltiplicazione, rispettivamente; tutto ciò pur richiedendo (postulato della quantizzazione canonica) che continuino a valere le regole di commutazione canoniche (3.2):

$$[\widehat{p}q] = i \hbar \{p, q\}. \quad (3.3)$$

Usando l'anglicismo di abbreviare con CCR (canonical commutation relations) la locuzione *regole di commutazione canoniche*, la quantizzazione canonica si traduce dunque nel seguente problema matematico:

PROBLEMA DELLA CLASSIFICAZIONE DELLE RAPPRESENTAZIONI IRRIDUCIBILI DELLE CCR

*Dato un sistema di coordinate canoniche  $(\zeta, \eta) : \{\zeta, \eta\} = I$ , trovare tutte le rappresentazioni irriducibili delle CCR, cioè classificare (a meno di equivalenze unitarie) tutti gli spazi di HILBERT separabili  $\mathcal{H}$  di funzioni di una sola delle variabili canoniche (ad esempio,  $\eta$ ) e tutti gli operatori autoaggiunti  $\widehat{\zeta}$  e  $\widehat{\eta}$  che ivi agiscono in modo tale che  $\widehat{\eta}$  agisca come una moltiplicazione della funzione per  $\eta$ , che  $\widehat{\zeta}$  agisca come una derivazione rispetto a  $\eta$ , e che infine risulti*

$$[\widehat{\zeta}, \widehat{\eta}] = i \hbar \{\zeta, \eta\}. \quad (3.4)$$

Nel caso dei sistemi ad un numero finito di gradi di libertà<sup>47</sup> questo problema è stato risolto da VON NEUMANN fin dal 1928, partendo dalla cosiddetta forma di WEYL delle regole di commutazione canoniche, che fra poco richiamerò. La soluzione afferma che *non vi sono* altre rappresentazioni irriducibili delle regole di commutazione canoniche oltre a quella di SCHRÖDINGER:  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2$ ,  $\widehat{\zeta} = \widehat{p} = -i \hbar \partial_q$ ,  $\widehat{\eta} = \widehat{q} = q$ .

Vale forse la pena di fare qualche riflessione sul significato di questo teorema prima di enunciarlo in forma precisa. Esso è una delle molte varianti in cui può presentarsi il “mistero della quantizzazione” (locuzione di EDWARD NELSON), perché sostanzialmente implica che si può definire la meccanica quantistica a partire dalla meccanica classica solo scrivendo quest'ultima nelle coordinate canoniche “cartesiane”, o “rettangolari”  $(p, q) : \eta = q, \zeta = p$ . In gergo, solo queste coordinate possono essere quantizzate. Consideriamo infatti, in luogo delle  $(q, p)$  delle variabili azione-angolo  $(A, \phi) : \eta = \phi, \zeta = A$ . Dal punto di vista della meccanica classica questa scelta di variabili è del tutto ininfluenza perché si può sempre passare dalle une alle altre con una trasformazione canonica, che lascia come è noto le parentesi di Poisson invariate.

<sup>47</sup> Il fatto che il numero dei gradi di libertà sia finito è critico in questo contesto. Se è infinito, possono esserci “rappresentazioni inequivalenti”. Per una discussione particolarmente lucida della relazione fra queste ultime e il cosiddetto fenomeno di VAN HOVE, noto anche come “teorema di HAAG” della teoria dei campi quantizzati, si veda A.S. WIGHTMAN: *Introduction to some aspects of the relativistic dynamics of quantized fields*, in *Cargèse Lectures in Theoretical Physics*, ed. M. LEVY, Gordon and Breach, 1963.

Tuttavia questa libertà classica è soffocata in meccanica quantistica dal teorema di VON NEUMANN: infatti, procedendo canonicamente, essendo  $\phi$  la coordinata, che è definita mod  $2\pi$ , lo spazio di Hilbert sarà  $L^2(S^1)$ <sup>48</sup>, e gli operatori canonici sarebbero  $\widehat{\eta} = \phi$ ,  $\widehat{\zeta} = -i\hbar\partial_\phi$ . Una simile quantizzazione è però proibita: è ovvio infatti<sup>49</sup> che non esiste alcuna trasformazione unitaria che colleghi la terna  $L^2(S^1), \widehat{\eta}, \widehat{\zeta}$  con la terna  $L^2(\mathbb{R}), \widehat{q}, \widehat{p}$ . Un esempio ulteriore, molto interessante proprio in questo contesto, chiarisce ancor meglio la situazione. Si consideri il cosiddetto *oscillatore quartico*, cioè il sistema unidimensionale retto dalla Hamiltoniana  $H(p, q) = p^2 + q^4$ . È facile dimostrare che in variabili azione-angolo  $A, \phi$  la medesima Hamiltoniana si scrive come  $H(A) = C \cdot A^{4/3}$ , dove  $C$  è una costante e

$$A = \frac{1}{\pi} \int_{-\sqrt[4]{E}}^{\sqrt[4]{E}} \sqrt{E - q^4} dq.$$

Se fosse possibile la quantizzazione in variabili azione-angolo precedentemente descritta, i livelli energetici di SCHRÖDINGER sarebbero  $C \cdot (n\hbar)^{4/3}$ :  $n \in \mathbb{N}$  perché si avrebbe  $\widehat{H(A)} = (-i\hbar\partial_\phi)^{4/3}$  che agisce su  $L^2(S^1)$ <sup>50</sup>. È noto però che tale successione non è la successione degli autovalori  $\{E_n\}$  di  $\widehat{H(p, q)}$ , cioè dell'operatore di SCHRÖDINGER

$$H = -\hbar^2 \frac{d^2}{dq^2} + q^4 \quad (3.5)$$

che agisce su  $L^2(\mathbb{R})$ . Anzi, sappiamo che la successione precedente altro non è che quella dei livelli di BOHR-SOMMERFELD del problema:

$$\{E_n^{BS}\} = (n\hbar)^{4/3} : n \in \mathbb{N}. \quad (3.6)$$

Questo esempio fa vedere in maniera molto diretta la difficoltà intrinseca del problema della relazione fra i livelli energetici definiti dalla formula di BOHR-SOMMERFELD e quelli “veri”, cioè quelli definiti dagli autovalori dell'equazione di SCHRÖDINGER stazionaria: la formula di BOHR-SOMMERFELD richiede le variabili azione-angolo, mentre la quantizzazione canonica richiede le coordinate canoniche cartesiane. La scelta fra i due sistemi di coordinate, libera prima della quantizzazione, non lo è più dopo.

<sup>48</sup>  $S^1 = \mathbb{R}(\text{mod } 2\pi)$  è la circonferenza unitaria, di modo che  $L^2(S^1)$  è il seguente insieme di funzioni:  $\{u | u \in L^2(0, 2\pi) | u(0) = u(2\pi)\}$

<sup>49</sup> Basti osservare che lo spettro di  $\widehat{\zeta}$  è l'insieme discreto  $\{n : n \in \mathbb{Z}\}$  mentre lo spettro di  $\widehat{p} = -i\hbar\partial_q$  è tutto l'asse reale.

<sup>50</sup> Qui si considera in qualche modo risolto il problema di dovere considerare solo gli autovalori positivi di  $-i\hbar\partial_\phi$ .

Questa limitazione a priori sulla scelta delle coordinate canoniche necessaria per potere costruire il procedimento di quantizzazione *canonica* ha delle conseguenze forse ancora più serie. La prima è l'impossibilità, in generale, di potere quantizzare *canonicamente* i sistemi meccanici soggetti a vincoli bilaterali perfetti. Infatti le coordinate lagrangiane di simili sistemi, e di conseguenza quelle canoniche, non saranno mai equivalenti a coordinate cartesiane globalmente definite. È bene sottolineare che si parla qui di quantizzazione *canonica*. Esistono beninteso altri modi di "quantizzare" che possono essere applicati a casi più generali, e che si riducono a quello canonico quando vale anche quest'ultimo: ad esempio, si può postulare che il propagatore dell'equazione di SCHRÖDINGER sia espresso dall'integrale di FEYNMAN o anche, se il sistema da quantizzare consiste nel moto su una varietà Riemanniana, che l'energia cinetica quantizzata sia il corrispondente operatore di LAPLACE-BELTRAMI (mentre il potenziale quantizzato è il consueto operatore di moltiplicazione). Lo svantaggio di simili metodi sta nel fatto che essi non definiscono la quantizzazione di ogni osservabile classica, ma semplicemente associano al sistema classico, per così dire, un oggetto quantistico primario. Dedurre da questo la quantizzazione delle osservabili non è banale e, quand'anche risultasse possibile, può dar luogo a serie ambiguità.

Torniamo ora al problema dell'unicità delle rappresentazioni delle regole di commutazione canoniche. Per enunciarlo, è conveniente scrivere queste ultime nella forma cosiddetta *integrata*, o di WEYL. Sappiamo (e del resto si vede subito) che  $\hat{p}$  genera le traslazioni nelle  $q$  mentre  $\hat{q}$  genera le traslazioni nelle  $p$ . In altre parole se denotiamo con

$$U(t) = e^{i\hat{q}t}, \quad V(t) = e^{i\hat{p}t} : t \in \mathbf{R}$$

i gruppi unitari fortemente continui <sup>51</sup>  $L^2$  generati da  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$ , rispettivamente, si ha:

$$U(t)f(q) = e^{itq}f(q) \quad V(t)f(q) = f(q+t)$$

e quindi

$$U(s)V(t)f(q) = e^{isq}f(q+t) = e^{ist}V(t)U(s)f(q) = e^{i(s+t)}f(q+t). \quad (3.7)$$

Pertanto i gruppi unitari  $U(t)$  e  $V(t)$  generati da  $\hat{q}$  e  $\hat{p}$ , che sono operatori unitari e quindi continui, cioè limitati, soddisfano le relazioni di commutazione

$$U(s)V(t) = e^{ist}V(t)U(s), \quad (3.8)$$

---

<sup>51</sup> Il teorema di STONE mette in corrispondenza biunivoca operatori autoaggiunti in uno spazio di Hilbert  $\mathcal{H}$  e gruppi unitari fortemente continui  $U(t) : t \in \mathbf{R}$  che agiscono nel medesimo spazio: ogni gruppo continuo è generato come l'esponenziale di un (unico) operatore autoaggiunto  $H$ ,  $U(t) = \exp(-iHt)$ , e viceversa l'esponenziale di ogni operatore autoaggiunto genera un gruppo unitario fortemente continuo. Si noti inoltre che, poiché l'equazione di si scrive, nel caso autonomo, sotto la forma  $H\psi = i\partial_t\psi$ , il teorema di STONE assicura l'esistenza e l'unicità della soluzione per qualsiasi dato iniziale  $\psi_0$  sotto la forma  $\psi(t) = \exp(-iHt)\psi_0$  purché l'operatore energia  $H$  sia autoaggiunto.

che sono dette regole di commutazione canoniche nella forma di WEYL, o brevemente relazioni di WEYL <sup>52</sup>. Il problema dell'unicità o meno delle rappresentazioni delle regole di commutazione canoniche può pertanto essere riformulato così:

PROBLEMA DELLA CLASSIFICAZIONE DELLE RAPPRESENTAZIONI IRRIDUCIBILI DELLE REGOLE DI COMMUTAZIONE CANONICHE

*Classificare (a meno di equivalenze unitarie) tutti gli spazi di HILBERT separabili  $\mathcal{H}$  e tutti i gruppi fortemente continui di operatori unitari  $U(t)$  e  $V(t) : t \in \mathbb{R}$  che ivi agiscono in modo tale che siano soddisfatte le relazioni di commutazione*

$$U(s)V(t) = e^{ist}V(t)U(s).$$

Ebbene il teorema di VON NEUMANN <sup>53</sup> afferma che, a meno di equivalenze unitarie,  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^\epsilon$ ,  $V(t)$  agisce come una traslazione della quantità  $t$ , e  $U(t)$  come una traslazione della quantità  $s$  nella trasformata di Fourier. Poiché la traslazione di una quantità  $s$  nell'argomento della trasformata di Fourier di una  $f \in L^2$  equivale a moltiplicare per  $e^{iqs}$  la  $f$  stessa, il teorema di VON NEUMANN afferma dunque che ogni gruppo unitario  $U(t)$  deve essere unitariamente equivalente a  $\exp(it\hat{q})$  e ogni gruppo unitario  $V(t)$  a  $\exp(it\hat{p})$ . Passando ai generatori, che per il teorema di STONE sono in corrispondenza biunivoca con i gruppi unitari stessi <sup>54</sup>, possiamo concludere che la rappresentazione di SCHRÖDINGER in cui  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2$ ,  $\hat{\zeta} = \hat{p} = -i\hbar\partial_q$ ,  $\hat{\eta} = \hat{q} = q$  è unica a meno di equivalenze unitarie. La dimostrazione originale di VON NEUMANN non è di facile lettura. Ne sono state ottenute in seguito svariate altre; una particolarmente semplice è quella di J. DIXMIER <sup>55</sup>. La classe di equivalenza unitaria delle regole di commutazione canoniche è tutt'altro che banale. Abbiamo già visto che essa contiene la trasformazione di FOURIER. Vogliamo ora descrivere la sola altra rappresentazione in termini di "funzioni d'onda" esplicitamente nota, quella di BARGMANN, nota anche come rappresentazione di FOCK-BARGMANN.

<sup>52</sup> La ragione principale per cui si considerano le (3.8) invece delle regole di commutazione canoniche nella forma solita (3.2) è che in tal modo si ha a che fare con operatori limitati e non si devono discutere questioni di domini. L'equivalenza fra le due forme offre però qualche sottigliezza. Si veda ad esempio il già citato Cap. X del trattato di REED e SIMON.

<sup>53</sup> J. VON NEUMANN: *Die Eindeutigkeit der Schrödingerschen Operatoren [L'unicità degli operatori di Schrödinger]*, *Mathematische Annalen* **104** (1931) 570–578.

<sup>54</sup> Riguardo alle commutazioni il passaggio dai gruppi continui ad un parametro ai loro generatori infinitesimi può presentare delle sottigliezze: si vedano le note al già citato paragrafo del trattato di REED e SIMON.

<sup>55</sup> Si veda J. DIXMIER: *Sur l'équation  $PQ - QP = I$* , *Compositio Mathematica*, 1957. Questa dimostrazione però richiede l'ulteriore ipotesi tecnica (che sembra d'altra parte naturale dal punto di vista fisico, e che è ovviamente soddisfatta da  $\hat{p}$  e  $\hat{q}$ ) che i due generatori abbiano un dominio comune di essenziale autoaggiunzione.

#### §4. Quantizzazione nella rappresentazione di Bargmann. Evoluzione e stati coerenti

Consideriamo per semplicità il caso di un singolo grado di libertà. Date le consuete coordinate canoniche  $(q, p) \in \mathbb{R}^2$ , formiamo le combinazioni lineari

$$z = \frac{\omega q + ip}{\sqrt{2}} \equiv \zeta, \quad \bar{z} = \frac{\omega q - ip}{\sqrt{2}} \equiv \eta.$$

Con l'abituale identificazione di  $\mathbb{R}^2$  con il piano complesso  $\mathbb{C}$  questa trasformazione corrisponde a una rotazione di assi di un angolo  $\pi/4$  nel piano complesso. Si vede subito che questa trasformazione manda la forma simplettica  $dp \wedge dq$  in  $id\zeta \wedge d\eta$  (ovvero:  $\{\zeta, \eta\} = -i$ ) e dunque è canonica perché il modulo del suo determinante Jacobiano è 1<sup>56</sup>. La Hamiltoniana  $H_0 = \frac{1}{2}(p^2 + \omega^2 q^2)$  dell'oscillatore armonico diventa in queste variabili  $H_0 = \omega\zeta\eta = \omega\bar{z}z$ , cosicché le equazioni di HAMILTON (vedi nota) danno immediatamente il flusso che fa seguito ad ogni dato iniziale  $(\bar{z}, z)$ . Esso è infatti:  $z \rightarrow ze^{i\omega t}$ ;  $\bar{z} \rightarrow \bar{z}e^{i\omega t}$ , cioè una rotazione uniforme<sup>57</sup> di angolo  $\omega t$  nel piano complesso. D'altra parte questo risultato non deve sorprendere: le variabili canoniche  $(J, \phi)$ , cioè le variabili azione-angolo, altro non sono che modulo e fase del numero complesso  $z$ .

Osserviamo ora che la quantizzazione canonica delle variabili  $\zeta, \eta$  dà origine agli operatori di creazione e distruzione  $a^*, a$  dell'oscillatore armonico. Infatti:

$$\hat{\zeta} = a^* = \frac{1}{\sqrt{2}}(\omega\hat{q} + i\hat{p}), \quad \hat{\eta} = a = \frac{1}{\sqrt{2}}(\omega\hat{q} - i\hat{p}).$$

Poiché si ha  $[\hat{\zeta}, \hat{\eta}] = \hbar = i\{\hat{\zeta}, \hat{\eta}\}$  e  $S = a^*a + \frac{1}{2}\hbar = \hat{\zeta}\hat{\eta} + \frac{1}{2}\hbar$ , viene spontaneo domandarsi se non si possa fare questa "rotazione di  $\pi/4$ " anche in meccanica quantistica, cioè se, cambiando variabili, non si possa far agire  $\hat{\zeta}$  come una pura moltiplicazione e  $\hat{\eta}$  come una pura derivazione. Tale questione è stata affrontata per la prima volta da V. A. FOCK proprio in connessione con la sua costruzione dello spazio dei vettori di stato della teoria dei campi quantizzati<sup>58</sup>

<sup>56</sup> L'apparenza della  $i$  sulla forma simplettica è dovuta al fatto che la trasformazione in questione è complessa. Essa fa apparire una moltiplicazione globale per  $i$  nelle parentesi di POISSON delle coordinate  $\zeta, \eta$ , e ciò vale anche per il gradiente simplettico: in altre parole nelle coordinate  $\zeta, \eta$  le equazioni di HAMILTON si scrivono così:

$$\dot{\zeta} = i\nabla_{\eta}H(\zeta, \eta), \quad \dot{\eta} = -i\nabla_{\zeta}H(\zeta, \eta).$$

<sup>57</sup> Cioè la stessa per ogni dato iniziale  $z$ : si tratta della ben nota proprietà di isocronia dell'oscillatore armonico.

<sup>58</sup> Si veda V. A. FOCK, *Verallgemeinerung und Lösung der Diracschen statistischen Gleichung* [Generalizzazione e soluzione dell'equazione statistica di Dirac], *Z. für Physik* **49** (1928) 339–357.

e risolta completamente da V. BARGMANN nel 1962<sup>59</sup>. L'osservazione originale di FOCK è che in effetti l'equazione  $[\hat{\zeta}, \hat{\eta}] = \hbar$  ha la soluzione  $\hat{\zeta} = \hbar \partial_{\eta} = \hbar \partial_z$ ,  $\hat{\eta} = \eta = z$  (quest'ultimo è, ancora una volta, l'operatore di moltiplicazione per la variabile  $z$ ). Occorre però determinare lo spazio di HILBERT sul quale fare agire questi operatori, nonché la sua connessione con il consueto spazio  $L^2$ . A questo proposito l'idea guida di BARGMANN è stata quella di accorgersi che, se si vuole che le funzioni d'onda  $f$  siano funzioni della sola  $z$ :  $f = f(z)$ , deve necessariamente essere  $\partial f / \partial \bar{z} = 0$  e quindi  $f(z)$  deve essere una funzione olomorfa intera di  $z$ . La rappresentazione va dunque cercata in uno spazio di funzioni olomorfe intere, e la soluzione di BARGMANN è la seguente:

TEOREMA (BARGMANN)

Si consideri per ogni  $\psi \in L^2(\mathbb{R})$  la trasformata integrale

$$f(z) = (\sqrt{\pi} \hbar)^{-1/2} \int_{\mathbb{R}^2} \exp \left[ -\frac{(z^2 + q^2)}{2 \hbar} + 2 \frac{\sqrt{2} z q}{\hbar} \right] \psi(q) dq. \quad (3.9)$$

Allora si ha:

- (1) L'operatore  $U : \psi \mapsto U\psi$  definito da  $(U\psi)(z) \equiv f$  è un operatore unitario fra  $L^2(\mathbb{R})$  e lo spazio Hilbertiano di BARGMANN  $\mathcal{F}$  definito da tutte le funzioni olomorfe intere  $u(z)$  su  $\mathbb{C}$  tali che risulti finita la norma al quadrato

$$\|u\|_{\mathcal{F}} \equiv \int_{\mathbb{R}^2} |u(z)|^2 \exp \left( \frac{-|z|^2}{\hbar} \right) dz d\bar{z} \quad (3.10a)$$

che deriva dal prodotto scalare

$$\langle u, v \rangle_{\mathcal{F}} = \int_{\mathbb{R}^2} u(z) \overline{v(z)} \exp \left( \frac{-|z|^2}{\hbar} \right) dz d\bar{z}, \quad (3.10b)$$

dove, con  $z = x + iy$ ,  $dz d\bar{z} = dx dy$ .

- (2) Le immagini unitarie attraverso  $U$  degli operatori canonici  $\hat{q}, \hat{p}$  e degli operatori di creazione e distruzione sono date dai seguenti operatori massimali in  $\mathcal{F}$

$$\begin{cases} (U\hat{q}U^{-1}f)(z) = \frac{1}{\sqrt{2}}(z + \hbar d_z)f(z), \\ (U\hat{p}U^{-1}f)(z) = \frac{1}{\sqrt{2}}(z - \hbar d_z)f(z), \\ (Ua^*U^{-1}f)(z) = zf(z), \\ (UaU^{-1}f)(z) = \hbar d_z f(z). \end{cases} \quad (3.11)$$

<sup>59</sup> Il lavoro originale è V. BARGMANN (1908–1989): *On a Hilbert space of Analytic Functions and an Associated Integral Transform*, Commun. Pure Appl. Math. **14** (1962) 187–214. Esso costituisce ancora di gran lunga, a mio parere, la migliore esposizione dell'argomento, e ad esso rimando senz'altro per la dimostrazione di tutte le proprietà che elencherò in seguito.

(3) L'immagine unitaria  $S_0 = UT_0U^{-1}$  nello spazio di BARGMANN  $\mathcal{F}$  dell'operatore

$$T_0 = \frac{1}{2} \left( -\hbar^2 \frac{d^2}{dq^2} + \omega^2 q^2 \right)$$

in  $L^2(\mathbf{R})$  dell'oscillatore armonico quantistico (definito sul dominio massimale) è data da

$$S_0 f = \hbar \omega z \frac{df(z)}{dz} + \frac{1}{2} \hbar \omega. \quad (3.12)$$

Le formule (3.11) rappresentano in un certo senso la quantizzazione della "rotazione di angolo  $\pi/4$ " che trasforma canonicamente le coordinate  $(p, q)$  nelle coordinate canoniche complesse  $\zeta, \eta$ . Infatti, nell'abuso di notazione di denotare ancora con  $\hat{\zeta}$  e  $\hat{\eta}$  le loro immagini unitarie nello spazio di BARGMANN, le (3.12) ci dicono immediatamente che in  $\mathcal{F}$  si ha  $\hat{\zeta}f = zf(z)$  e  $\hat{\eta} = \hbar df(z)/dz$ . Come si voleva, dunque, è stata identificata una rappresentazione in cui  $\hat{\zeta}$  agisce come pura moltiplicazione e  $\hat{\eta}$  come pura derivazione.

La formula (3.12), insieme alla regola di quantizzazione di WEYL, permette di ottenere la quantizzazione di ogni osservabile olomorfo reale  $f(\zeta, \eta)$  come un operatore (formalmente) autoaggiunto  $\hat{f}$  in  $\mathcal{F}$ . Un algoritmo per applicare con facilità la regola di quantizzazione di WEYL, e che permette dunque di costruire l'operatore quantizzato, è il prodotto simmetrico di BEREZIN e SHUBIN<sup>60</sup>.

- (1) Si denoti con  $\Pi_S(A^m B^n)$  il prodotto simmetrico delle potenze  $m$ -esima e  $n$ -esima, rispettivamente, di due operatori non commutanti  $A$  e  $B$ , formalmente definito come il coefficiente di  $\frac{(m+n)!}{m!n!} x^m y^n$  nello sviluppo di  $(Ax + By)^{m+n}$ ,  $(x, y) \in \mathbf{R}$ ;
  - (2) Si denoti con  $\hat{u} = \Pi_S(\hat{\zeta}^m \hat{\eta}^n)$  la quantizzazione (come operatore massimale in  $\mathcal{F}$ ) dell'osservabile classico  $u(\zeta, \eta) = \zeta^m \eta^n$  definita appunto dal prodotto simmetrico fra  $\hat{\zeta}^m$  e  $\hat{\eta}^n$ ;
- S e allora è dato l'osservabile classico olomorfo intero

$$f(\zeta, \eta) = \sum_{m,n=0}^{\infty} f_{mn} \zeta^m \eta^n,$$

la sua quantizzazione canonica (di WEYL)  $\hat{f}$  è definita come

$$\hat{f} = \sum_{m,n=0}^{\infty} f_{mn} \Pi_S(\hat{\zeta}^m \hat{\eta}^n). \quad (3.13)$$

<sup>60</sup> Si veda appunto il trattato di F. A. BEREZIN e M. S. SHUBIN: *The Schrödinger Equation*, Kluwer, 1991, che descrive dettagliatamente la costruzione della quantizzazione degli osservabili nella rappresentazione di BARGMANN brevemente riassunta in seguito.

Ovviamente la prescrizione del prodotto simmetrico può essere applicata direttamente nella rappresentazione di SCHRÖDINGER per ottenere gli operatori quantizzati secondo la regola di WEYL.

Definito il procedimento per associare univocamente un operatore in  $\mathcal{F}$  ad ogni osservabile classico <sup>61</sup>, discutiamo ora un altro aspetto della quantizzazione che assume una forma particolarmente illuminante se lo si esamina nella rappresentazione di BARGMANN. Consideriamo in  $\mathcal{F}$  l'equazione di SCHRÖDINGER dipendente dal tempo per l'oscillatore armonico, che per la (3.12) si scriverà <sup>62</sup>:

$$\hbar\omega z \frac{\partial f(z, t)}{\partial z} = -i \hbar \frac{\partial f(z, t)}{\partial t}. \quad (3.14a)$$

Assegnata una qualunque condizione iniziale  $f_0(z) \in \mathcal{F}$ , la soluzione di (3.14a) che ad essa si riduce per  $t = 0$  è evidentemente la seguente

$$f(z, t) = f_0(ze^{i\omega t}). \quad (3.14b)$$

Definendo al solito come propagatore al tempo  $t$  quell'operatore, denotato con  $U(t)$ , che associa allo stato iniziale quantistico  $f_0$  la corrispondente soluzione dell'equazione di SCHRÖDINGER dipendente dal tempo all'istante  $t$ , le formule (3.14a,b) mostrano che nello spazio di BARGMANN il propagatore dell'oscillatore armonico ammette la rappresentazione

$$U(t)f_0 = f_0(ze^{i\omega t}). \quad (3.15)$$

L'interpretazione fisica di quest'ultima formula è di grande interesse per quanto riguarda la quantizzazione. Poiché  $z = (q + ip)/\sqrt{2}$ , e l'applicazione  $z \mapsto ze^{i\omega t}$  è come abbiamo visto la soluzione delle equazioni di HAMILTON dell'oscillatore armonico, cioè associa ad ogni dato iniziale nello spazio delle fasi  $z$  il suo evoluto  $ze^{i\omega t}$  lungo il moto classico, si vede subito che l'evoluzione quantistica è, in ogni istante  $t$ , determinata *esattamente* da quella classica. In altre parole, per determinare l'evoluzione quantistica dell'oscillatore armonico, conoscendo quella classica di ogni dato iniziale, possiamo procedere in due modi equivalenti: *prima quantizzare* (cioè date le condizioni iniziali  $z$ , distribuirle secondo la funzione d'onda  $f_0(z)$ ) e *poi fare evolvere* lo stato quantistico facendo agire il propagatore  $U(t)$ , oppure *prima fare evolvere* le condizioni iniziali lungo il moto classico, e *poi quantizzare*. Con entrambi i procedimenti si ottiene lo stato  $f_0(ze^{i\omega t})$ . Possiamo formalizzare

---

<sup>61</sup> Per semplicità olomorfo.

<sup>62</sup> Trascuriamo d'ora in poi la costante additiva  $\frac{1}{2}\hbar\omega$ . Si vede facilmente che, per quanto riguarda l'evoluzione, ciò equivale a fissare l'istante iniziale a  $t = -\frac{1}{2}$  anziché a  $t = 0$ .

algebricamente questa osservazione affermando che il seguente diagramma è commutativo:

$$\begin{array}{ccc}
 f_0(z) & \xrightarrow{\text{evoluzione al tempo } t} & f_0(ze^{i\omega t}) \\
 \uparrow \text{quantizzazione} & & \uparrow \text{quantizzazione} \\
 z & \xrightarrow{\text{evoluzione al tempo } t} & ze^{i\omega t}
 \end{array}$$

In parole: *Per l'oscillatore armonico, l'evoluzione temporale commuta con la quantizzazione.*

Questa proprietà è ben lungi dall'essere valida in generale; anzi, nel caso di sistemi conservativi con potenziali che crescono all'infinito questa è una proprietà caratteristica dell'oscillatore armonico allo stesso livello in cui lo è l'isocronia, che rappresenta la vera ragione profonda della sua validità. Essa infatti implica come abbiamo visto che ogni dato iniziale  $z$  compie una rotazione uniforme nel piano complesso, con velocità angolare costante  $\omega$ . Dunque la trasformazione che ad ogni dato iniziale associa il suo evoluto, che è canonica come conseguenza della teoria di HAMILTON–JACOBI, è anche lineare; ora è noto che *le sole trasformazioni canoniche che lasciano invarianti la quantizzazione, cioè che forniscono rappresentazioni fra loro unitariamente equivalenti delle CCR, sono quelle lineari (reali o complesse)*<sup>63</sup>.

Torniamo ora al propagatore dell'oscillatore armonico, e facciamo vedere come la proprietà di permutabilità fra evoluzione e quantizzazione, che conserva la *coerenza* degli stati, permetta di rappresentare  $U(t)$  sotto la forma più consueta di operatore integrale il cui nucleo sarà appunto formato dagli *stati coerenti*. La trasformata di BARGMANN inversa del nucleo che otterremo sarà il consueto propagatore dell'oscillatore armonico quantistico nella rappresentazione delle  $q$ , che si può costruire o con la formula di MEHLER a partire dagli autostati consueti oppure con l'integrale sui cammini di FEYNMAN<sup>64</sup>.

---

<sup>63</sup> Il primo a notare che la quantizzazione poteva essere invariante (a meno di equivalenze unitarie) solo rispetto al sottogruppo delle trasformazioni canoniche lineari sembra essere stato L. VAN HOVE: *Sur Certaines représentations unitaires d'un groupe infini des transformations*, Memoires Academie Royale de Belgique, Classe de Sciences **26** (1951). Comunque questo risultato è esplicitamente dimostrato nel già citato lavoro di BARGMANN e l'invarianza della quantizzazione di WEYL rispetto a trasformazioni canoniche lineari reali o complesse è discussa in BEREZIN–SHUBIN, *loc. cit.* Il fatto che l'isocronia, insieme ad una condizione naturale di normalizzazione, sia una proprietà caratteristica dell'oscillatore ad un grado di libertà si può trovare, ad esempio, nel classico L.D. LANDAU, E.M. LIFSHITZ, *Meccanica*, Editori Riuniti (ultima ristampa: 1988). L'estensione di tale proprietà a più gradi di libertà e le questioni quantistiche collegate non sono immediatamente ovvie. Si veda ad esempio J. CHAZARAIN: *Spectre d'un Hamiltonien Quantique et Mécanique Classique*, Comm. Part. Diff. Equations **10** (1980), 252–297 e anche A. PARMEGGIANI: *On the Parametrix for a Class of Operators with Potentials of Quadratic Growth*, Annali di Matematica **152** (1988) 237–258.

<sup>64</sup> Si veda ad esempio il quaderno di M. RONCADELLI e A. DEFENDI: *I cammini di Feynman*, in questa stessa serie.

Osserviamo che l'insieme di vettori

$$u_n(z) \equiv |n\rangle = \frac{1}{[\pi^{1/2} \hbar n!]^{1/2}} \left( \frac{z}{\sqrt{\hbar}} \right)^n : \quad n = 0, 1, \dots \quad (3.16)$$

costituisce un sistema ortonormale in  $\mathcal{F}$  (basta integrare in coordinate polari) e completo (per il teorema di TAYLOR, dato che i vettori in  $\mathcal{F}$  sono funzioni olomorfe intere). Da ciò è facile dedurre che la famiglia continua di vettori in  $\mathcal{F}$ ,

$$e_w(z) = \exp \frac{\bar{w}z}{\hbar} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\bar{w}^n z^n}{n! \hbar^n} = \exp \bar{w}a^* |0\rangle : \quad w \in \mathbb{C}, \quad (3.17)$$

gode delle proprietà seguenti

$$(a) e_w(z e^{i\omega t}) = e_{w e^{i\omega t}}(z), \quad (b) f(w) = \int \overline{e_w(z)} f(z) \exp \left( -\frac{|z|^2}{\hbar} \right) dz d\bar{z},$$

che li identificano come *stati coerenti*. Per la proprietà (a), infatti, la coerenza definita dalla somma (3.17) viene mantenuta dall'evoluzione; la proprietà (b) implica che al variare di  $w$  la famiglia  $e_w(z)$  definisce un insieme completo in  $\mathcal{F}$  (un vettore ortogonale a tutti loro è necessariamente il vettore nullo) e inoltre fa vedere che essi sono l'analogo delle funzioni  $\delta$  in  $\mathcal{F}$  perché essi costituiscono un *nucleo autoriproduttore*: il valore della funzione  $f$  al punto  $w$  può essere ottenuto integrando  $f(z)$  rispetto allo stato coerente. Dunque da (3.15) si deduce immediatamente l'espressione del nucleo integrale del propagatore:

$$(U(t)f_0)(z) \equiv f(z, t) = \int \mathcal{H}(z, w; t) f_0(w) \exp \left( -\frac{|z|^2}{\hbar} \right) dz d\bar{z},$$

$$\mathcal{H}(z, w; t) = \overline{e_w e^{i\omega t}(z)}.$$

Usando poi il fatto che l'antitransformata di BARGMANN dei vettori  $|n\rangle$  riproduce le consuete funzioni di HERMITE, e applicando la formula di MEHLER, non è difficile ricavare dall'ultima formula l'espressione consueta del propagatore e dalla terza delle (2.9) quella altrettanto consueta degli stati coerenti dell'oscillatore armonico.

## §5. Simboli di operatori e correzioni quantistiche

Si è vista nel paragrafo precedente la regola per associare univocamente ad ogni osservabile classico (che è, ricordiamo, una qualsiasi funzione regolare a valori reali delle coordinate canoniche) un operatore formalmente autoaggiunto nello spazio di Hilbert della rappresentazione scelta, che d'ora in poi

restringeremo senz'altro allo spazio  $L^2$  o a quello di FOCK–BARGMANN. Se, viceversa, dato un operatore formalmente autoaggiunto, possiamo determinare un osservabile classico che, una volta quantizzato secondo la regola precedente, riproduce l'operatore, diremo che esso è il suo *simbolo*. A questo proposito è bene fare esplicitamente alcune osservazioni.

- (a) Non è detto che tutti gli operatori che agiscono sul dato spazio di HILBERT ammettano un simbolo;
- (b) Non necessariamente un dato operatore quantistico ammette come simbolo la funzione delle coordinate canoniche che descrive la stessa grandezza fisica in meccanica classica;
- (c) La corrispondenza fra operatori e simboli *non conserva* la struttura di algebra delle osservabili classiche: in altre parole, il simbolo del commutatore di due operatori in generale non coincide con la parentesi di Poisson dei loro simboli, e per di più in generale il simbolo del prodotto di due operatori (anche coincidenti) non è dato dal prodotto dei simboli di due operatori.

Alcuni esempi semplici aiuteranno a capire meglio queste osservazioni. Considerando ad esempio la rappresentazione di SCHRÖDINGER su  $L^2(\mathbb{R}; dq)$ , è ovvio che il simbolo dell'operatore massimo di moltiplicazione  $Q^n : n \in \mathbb{N}$  è l'osservabile classico  $q^n$ , che quello dell'operatore massimo di derivazione  $P = -i \hbar d/dq$  è l'osservabile  $p$ , che quello dell'operatore  $T = -\frac{1}{2} \hbar^2 d^2/dq^2$  (energia cinetica) l'osservabile  $p^2$ , e quello dell'operatore di SCHRÖDINGER stazionario (Hamiltoniano quantistico)  $-\hbar^2 d^2/dq^2 + V(q)$  la Hamiltoniana classica  $p^2 + V(q)$ . D'altra parte se  $\psi(q) \in C^2(\mathbb{R}) \cap L^2$  si ha subito

$$[T, Q^4]\psi = -\frac{1}{2} \hbar^2 \frac{d^2}{dq^2}(q^4\psi) + \frac{1}{2} \hbar^2 q^4 \frac{d^2\psi}{dq^2} = -\hbar^2(6q^2\psi + 4q^3 \frac{d}{dq}\psi),$$

mentre  $\{\frac{1}{2}p^2, q^2\} = 4pq^3$ . Dunque si vede subito che (anche non applicando la simmetrizzazione di WEYL) il commutatore  $[T, Q^4]$  è *diverso* da  $i \hbar$  per la quantizzazione della parentesi di POISSON: c'è un termine correttivo (del primo ordine in  $\hbar$ ). Questo esempio semplicissimo ci fa vedere un'altra cosa molto importante: dato un operatore quantistico  $A$  che rappresenta la quantizzazione di una variabile dinamica che classicamente è espressa dall'osservabile  $a(p, q)$ , non ci si deve aspettare in generale che quest'ultima funzione sia il simbolo dell'operatore, ma solo il suo *simbolo principale*: in altre parole, detto  $\mathcal{A}$  il simbolo di  $A$  (supporremo d'ora in poi che un qualsiasi operatore che corrisponde ad una ben determinata variabile dinamica ammetta sempre simbolo <sup>65</sup>) ci attendiamo che esso abbia uno sviluppo in serie di potenze

---

<sup>65</sup> Questa condizione non è in realtà veramente restrittiva; per la sua discussione si veda BEREZIN–SHUBIN, *loc. cit.*

ascendenti di  $\hbar$  del tipo

$$\mathcal{A}(p, q; \hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j a_j(q, p), \quad (5.1)$$

dove il termine di ordine 0 in  $\hbar$ ,  $a_0(q, p) \equiv a(q, p)$ , è il già definito *simbolo principale* e i termini successivi  $a_j(q, p) : j \geq 1$  sono detti *simboli di ordine superiore* o *correzioni quantistiche*. Nello spazio di FOCK–BARGMANN ci si attende ovviamente uno sviluppo della medesima forma, con le coordinate canoniche  $(\zeta, \eta)$  al posto delle  $(p, q)$ .

Fin qui si è proceduto del tutto formalmente dal punto di vista matematico, mentre i problemi sono sostanziali. Occorre infatti:

- (1) Anzitutto, prima ancora di esaminare questioni di dominio, ecc., determinare l'azione stessa degli operatori che si ottengono dalle funzioni classiche  $a_j(q, p) : j \geq 0$  mediante applicazione della regola di quantizzazione di SCHRÖDINGER–WEYL. Infatti se le funzioni  $a_j(q, p) : j \geq 0$  sono polinomi nelle  $p$  i corrispondenti operatori agiranno come consueti operatori differenziali, ma quale sarà l'azione nel caso generale?
- (2) Una volta risolto il punto (1), determinare quale senso assegnare allo sviluppo (5.1) a seconda delle proprietà dei simboli  $a_j(q, p) : j \geq 0$ ;
- (3) Assegnato l'operatore  $A$ , determinare il suo simbolo sotto la forma (5.1).

La trattazione di questi problemi oltrepassa di gran lunga i limiti di questa esposizione. Basterà qui ricordare che tutti e tre sono stati sostanzialmente risolti nell'ambito della moderna teoria degli *operatori pseudodifferenziali*, che permette di dare un senso preciso tanto all'azione degli operatori generati dai simboli  $a_j(q, p) : j \geq 0$  tramite quantizzazione canonica quanto allo sviluppo formale (5.1)<sup>66</sup>. Il simbolo di ogni operatore  $A$  è poi costruibile sotto la forma (5.1) ogni volta che sia noto un sistema completo di stati coerenti, come nel caso dello spazio  $L^2$  o dello spazio di BARGMANN, e indicando ad esempio con  $|q, p; \hbar\rangle : (q, p) \in \mathbb{R}^2$  l'insieme abituale degli stati coerenti in  $L^2$  (che si può ottenere, ad esempio, per trasformazione inversa di BARGMANN dagli stati  $\{e_w z\} : w = q + ip$  definiti nel §4) si ha (si veda ad esempio la rassegna di VOROS nella letteratura citata nell'ultima nota)

$$\mathcal{A}(p, q; \hbar) = \langle q, p; \hbar | A | q, p; \hbar \rangle. \quad (5.2)$$

<sup>66</sup> Il calcolo degli operatori pseudodifferenziali è nato proprio in connessione con la meccanica quantistica circa trent'anni fa, così come la teoria spettrale per gli operatori non limitati altri trent'anni prima. La letteratura sull'argomento è pertanto vastissima. Il trattato pionieristico è considerato quello di V.P. MASLOV: *Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques*, Dunod, 1972 (traduzione francese dell'originale russo del 1965). Ottime rassegne successive sono ad esempio quelle di A. VOROS: *Developpements semiclassiques*, Thèse, Université de Paris–Sud, Orsay, 1977; M.V. FEDORYUK–V.P. MASLOV: *Semiclassical Approximation in Quantum Mechanics*, Reidel, 1981; C. FEFFERMAN: *The Indeterminacy Principle*, Bull. Amer. Math. Soc. **31** (1983) 1–87; D. ROBERT: *Autour de l'approximation semiclassique*, Birkhäuser, 1987; G. FOLLAND: *Harmonic Analysis in Phase Space*, Princeton University Press, 1988.

Operatori pseudodifferenziali il cui simbolo ammette la forma (5.1) si dicono di *tipo semiclassico*: si riducono come abbiamo già visto ad operatori differenziali consueti quando ogni coefficiente è una funzione polinomiale delle  $p$  e la serie si tronca. Questo è il caso, come si evince anche dagli esempi precedenti, per gli operatori che descrivono l'energia, il momento della quantità di moto, ecc.; in questo caso lo sviluppo (5.1) ha un solo termine, cioè il simbolo coincide col simbolo principale, che ovviamente è un polinomio nelle  $p$ . Dove compaiono allora i simboli di ordine superiore, cioè le correzioni quantistiche?

Un primo fatto importante è che gli operatori pseudodifferenziali di tipo semiclassico formano un'algebra con unità. In altre parole non solo i prodotti ma anche gli inversi, quando esistono, sono ancora operatori pseudodifferenziali di tipo semiclassico, i cui simboli soddisfano leggi di composizione ben definite. Ora anche se il simbolo dell'operatore di SCHRÖDINGER dell'energia  $S = -\hbar^2 d^2/dq^2 + V(q)$  coincide con il suo simbolo principale, la Hamiltoniana classica  $H = p^2 + V(q)$ , la stessa cosa non è vera ad esempio per il risolvente  $R(z, S) = (S - zI)^{-1} : z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  o per il propagatore  $U(t) = e^{itS} : t \in \mathbb{R}$ . Si dimostra anzi che questi operatori ammettono sì come simbolo principale le osservabili classiche  $(H(q, p) - z)^{-1}$  e  $e^{itH(q, p)}$ , rispettivamente, ma anche che tutte le correzioni quantistiche  $a_j(q, p) : j \geq 1$  nel loro sviluppo (5.1) sono diverse da 0.

Un secondo fatto forse ancora più profondo è legato al comportamento delle relazioni fra operatori e simboli rispetto alle trasformazioni canoniche classiche. Abbiamo già osservato che la quantizzazione di due osservabili classiche ottenibili l'una dall'altra per trasformazione canonica non dia origine a due operatori unitariamente equivalenti. La corrispondenza fra operatori e simboli permette di chiarire molto meglio questo punto. Vale infatti il seguente teorema fondamentale, dovuto originalmente al matematico russo EGOROV<sup>67</sup>, che, enunciato per semplicità in un solo grado di libertà nella rappresentazione di SCHRÖDINGER, sebbene valga in ogni numero finito di gradi di libertà ed in ogni rappresentazione, afferma:

TEOREMA (EGOROV)

*Sia  $A$  un operatore pseudodifferenziale di tipo semiclassico in  $L^2$ , di simbolo  $\mathcal{A}(p, q; \hbar) = a_0(p, q) + \hbar a_1(p, q) + \dots$ , e sia  $C : (p, q) \leftrightarrow (p', q')$  una trasformazione canonica da  $\mathbb{R}^2$  a  $\mathbb{R}^2$ . Allora*

- (i) Esiste in  $L^2$  un operatore pseudodifferenziale di tipo semiclassico  $B$  unitariamente equivalente ad  $A$  e di simbolo principale  $b_0(p', q') \equiv a_0(C^{-1}(p', q'))$ ;*
- (ii) Inversamente, se  $A$  e  $B$  sono due operatori pseudodifferenziali di tipo semiclassico unitariamente equivalenti, esiste una trasformazione*

---

<sup>67</sup> YU. V. EGOROV: *Canonical transformations and pseudodifferential operators*, Transactions Moscow Mathematical Society **24** (1971) 1–28.

canonica tale che i loro simboli principali  $a_0(p, q)$  e  $b_0(p', q')$  sono l'immagine l'uno dell'altro attraverso di essa.

Questo teorema chiarisce dunque il ruolo delle correzioni quantistiche assieme al motivo per cui è stata introdotta una simile locuzione: occorre aggiungerle se, una volta fissato il procedimento di quantizzazione, si vogliono ottenere operatori fra loro unitariamente equivalenti che quantizzino variabili dinamiche classiche immagine l'una dell'altra attraverso una trasformazione canonica: infatti le operazioni di quantizzazione e di trasformazione canonica non commutano (a meno che la trasformazione non sia lineare, come abbiamo ricordato nel §4).

### §6. Correzioni quantistiche alla formula di BOHR-SOMMERFELD

L'associazione fra operatori e simboli, che mette in particolare luce l'esistenza delle correzioni quantistiche, ci permette di affrontare la questione centrale enunciata nei §§1 e 2, e cioè la relazione fra i livelli quantistici esatti (gli autovalori dell'operatore di SCHRÖDINGER stazionario) e quelli definiti dalla formula di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD.

Cominciamo col notare che la discussione delle relazioni fra simboli e operatori del paragrafo precedente, condotta per semplicità nella rappresentazione di SCHRÖDINGER, vale senza alcun cambiamento anche in quella di BARGMANN ove, ricordiamo, le osservabili classiche sono tutte le funzioni olomorfe intere  $f(\zeta, \eta)$  delle variabili canoniche complesse  $(\zeta, \eta) : \bar{\zeta} = \eta$ . I simboli degli operatori pseudodifferenziali di tipo semiclassico saranno dunque funzioni del tipo <sup>68</sup>:

$$\mathcal{A}(\zeta, \eta; \hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j(\zeta, \eta) \hbar^j. \quad (6.1)$$

Di particolare interesse è il simbolo  $H_0(\zeta, \eta) = \omega\zeta\eta$ . Il suo quantizzato secondo la regola di WEYL è infatti l'operatore di SCHRÖDINGER dell'oscillatore armonico quantistico nella rappresentazione di BARGMANN:

$$S_0 = \hbar\omega z \frac{d}{dz} + \frac{1}{2} \hbar. \quad (6.2)$$

Indicando ancora una volta con  $|n\rangle$  gli autostati di  $S_0$ , si ha subito

$$\langle n, S_0 n \rangle = E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (6.3)$$

---

<sup>68</sup> In realtà, dal punto di vista tecnico, per trattare questo caso occorre un adattamento tutt'altro che immediato del calcolo pseudodifferenziale classico. La teoria degli operatori pseudodifferenziali olomorfi in spazi di tipo BARGMANN che ne consegue è stata sviluppata da J. SJÖSTRAND: *Singularités analytiques microlocales*, Astérisque, 1983.

D'altra parte sappiamo che  $\zeta\eta = J$ ,  $J$  essendo la variabile d'azione definita nel §2; dunque  $H_0(\zeta, \eta) = H_0(J)$ . In parole dunque la (6.3) afferma quanto segue: gli elementi diagonali del simbolo sugli autostati dell'oscillatore armonico, che sono come è ovvio gli autovalori, coincidono con i livelli energetici dati dalla formula di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD (con indice di MASLOV incluso <sup>69</sup>). Osserviamo ora che questa proprietà resta vera per un qualsiasi operatore il cui simbolo sia funzione di  $\zeta, \eta$  solo attraverso il prodotto  $\zeta\eta$ , il che lo rende funzione dell'oscillatore armonico stesso. Se infatti l'operatore  $F$  ammette la funzione  $f(\zeta\eta, \hbar)$  come simbolo, i suoi autovalori saranno dati da

$$E_n(F) = f\left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar, \hbar\right) \quad (6.4)$$

e quest'ultima è una formula di quantizzazione alla BOHR-SOMMERFELD come discusso nel §2 perché, ancora,  $\zeta\eta = J$ . Siamo ora in grado di cominciare ad impostare in termini quantitativi il problema fondamentale enunciato fin dall'inizio della relazione fra i livelli energetici definiti dalla formula di BS ed i livelli quantistici esatti (cioè degli autovalori  $E_n(S)$  dell'operatore di SCHRÖDINGER stazionario  $S$ ) o, equivalentemente, della determinazione delle correzioni alla formula di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD.

Dato infatti l'operatore di SCHRÖDINGER  $S(z, \hbar d/dz)$  che proviene dalla quantizzazione di WEYL dell'osservabile  $s(\zeta, \eta)$ , si può provare a costruire una trasformazione unitaria  $U$  tale che il simbolo dell'operatore trasformato  $\Sigma = USU^{-1}$  abbia la forma

$$\tilde{\Sigma}(\zeta\eta, \hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j \sigma_j(\zeta\eta). \quad (6.5)$$

Se questa costruzione fosse possibile, l'operatore  $\Sigma$  diventerebbe funzione dell'oscillatore armonico, e pertanto:

$$E_n(S, \hbar) = \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j \sigma_j\left(\left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\right) \quad (6.6)$$

D'altra parte il simbolo principale di  $\Sigma$  sarebbe  $\sigma_0(\zeta\eta) = \sigma_0(J) \equiv H(J)$  (nel consueto abuso di notazione di denotare con lo stesso simbolo la Hamiltoniana scritta nelle nuove variabili) che è la Hamiltoniana classica espressa come funzione dell'azione  $J = \zeta\eta$ , e quindi il termine di grado 0 in  $\hbar$  coinciderebbe con la formula di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD, mentre i termini

---

<sup>69</sup> L'inclusione o l'esclusione dell'indice di MASLOV, o correzione WKB, non è essenziale nella discussione che seguirà, perché si possono considerare indifferentemente gli operatori  $S_0$  o  $S_0 - \frac{1}{2} \hbar$ .

successivi ne rappresenterebbero le correzioni. Potremmo in altri termini riscrivere la (6.6) sotto la forma

$$E_n(S, \hbar) = E_n^{BS}(\hbar) + \sum_{j=1}^{\infty} \hbar^j E_n^j(\hbar), \quad (6.7a)$$

dove

$$E_n^{BS}(\hbar) = H\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\right) : n = 0, \dots \quad (6.7b)$$

sono appunto il livelli di BOHR-SOMMERFELD, e

$$E_n^j(\hbar) = \sigma_j\left(\left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\right) : n = 0, \dots \quad (6.7c)$$

rappresenterebbero le correzioni che, sommate ai livelli di BOHR-SOMMERFELD, dovrebbero riprodurre quelli esatti. Le formule (6.7a,b,c), se ottenibili, darebbero una soluzione completa del problema perché costituirebbero una *formula di quantizzazione esatta*. Infatti la conoscenza di *una sola funzione dell'azione classica*, e precisamente il simbolo  $\tilde{\Sigma}(\zeta\eta, \hbar) = \tilde{\Sigma}(J, \hbar)$ , permetterebbe di determinare *tutti i livelli energetici* mediante la regola di quantizzazione dell'azione classica  $J = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar$ . È chiaro inoltre che le correzioni alla formula BOHR-SOMMERFELD sarebbero tanto più trascurabili quanto più ci si avvicina al limite classico  $n \rightarrow \infty$ ,  $\hbar \rightarrow 0$ ,  $n\hbar \rightarrow J$ . Si noti che abbiamo fatto questo ragionamento nella rappresentazione di BARGMANN per comodità di esposizione. Avremmo potuto equivalentemente impostare la discussione nella rappresentazione di SCHRÖDINGER cercando una trasformazione unitaria tale che il simbolo dell'operatore trasformato  $\Theta = USU^{-1}$  abbia la forma

$$\Theta\left(\frac{1}{2}(p^2 + \omega_2 q^2); \hbar\right) = \sum_{j=0}^{\infty} \hbar^j \theta_j\left(\frac{1}{2}(p^2 + \omega_2 q^2)\right). \quad (6.8)$$

Chiarito che cosa sarebbe auspicabile ottenere, dobbiamo ovviamente chiederci se e quando sia possibile costruire una trasformazione unitaria che diagonalizzi il dato operatore di SCHRÖDINGER stazionario in modo tale che il nuovo simbolo abbia la forma voluta. Poiché assumiamo costantemente che il dato operatore di SCHRÖDINGER sia diagonalizzabile, e sappiamo che la trasformazione unitaria che lo porta in forma diagonale è unica <sup>70</sup>, è chiaro che potremo aspettarci un simbolo trasformato della forma (6.5) solo per quegli operatori  $S$  che commutino con l'oscillatore armonico, e che quindi ne risultino una funzione. Si tratta dunque con ogni evidenza di una classe estrememante

---

<sup>70</sup> Per l'unicità è essenziale supporre che lo spettro di  $S$  sia semplice, cioè che tutti i suoi autovalori abbiano molteplicità 1. Questo è sempre vero nel caso unidimensionale, e lo supporremo vero anche nei casi pluridimensionali che tratteremo in seguito.

ristretta di operatori di SCHRÖDINGER. Bisogna poi osservare che, per loro natura, gli sviluppi in serie di potenze di  $\hbar$  dei simboli degli operatori differenziali di tipo semiclassico vanno considerati come sviluppi asintotici più che come sviluppi convergenti. Questo comporta la concessione *a priori* di un errore avente sviluppo in serie di potenze nullo in  $\hbar$ , di modo che le formule di quantizzazione esatte nel senso sopra definito non saranno più tali in generale, ma valide, come si dice in gergo, modulo  $\hbar^\infty$ . Ciò significa che l'errore che si commette sostituendo agli autovalori esatti la serie (6.7b) troncata all'ordine  $N$  è di ordine  $\hbar^{N+1}$  per ogni  $N$  naturale. D'ora in poi parlando di formula di quantizzazione esatta la intenderemo sempre in questo senso <sup>71</sup>.

Ci chiediamo ora: è possibile, magari usando tecniche diverse, o richiedendo risultati meno forti, ampliare la classe degli operatori per cui valga una formula di quantizzazione esatta nel senso della (6.7b)? Sempre nel caso unidimensionale, cioè per operatori di SCHRÖDINGER che quantizzano Hamiltoniane classiche del tipo  $H = p^2 + V(q)$  essendo  $V(q)$  un potenziale olomorfo, la formula (6.7b) è ottenibile con metodi di equazioni differenziali ordinarie tipo "WKB a tutti gli ordini" <sup>72</sup>. In questo caso ovviamente l'azione  $J$  da quantizzare alla BOHR-SOMMERFELD è quella corrispondente alla Hamiltoniana  $H$ , cioè

$$J = \frac{1}{2\pi} \int_{q_-(E)}^{q_+(E)} \sqrt{E - V(q)} dq,$$

dove  $q_\pm(E)$  sono i punti d'inversione dei moti classici di energia  $E$  (per semplicità supporremo che ce ne siano solo due <sup>73</sup>), e le correzioni quantistiche, cioè i coefficienti delle potenze di  $\hbar^j$  con  $j \geq 1$  sono ancora esprimibili tramite quantità classiche (essenzialmente combinazioni di prodotti di derivate fino all'ordine  $j$  della quantità  $\sqrt{E - V(q)}$ ). Non è però possibile, in generale, ottenere tramite una simile costruzione un simbolo di un operatore pseudodifferenziale semiclassico.

Per i sistemi a più gradi di libertà il problema si presenta assai più complicato già al livello della quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD medesima, prima ancora di considerare le correzioni quantistiche. Come abbiamo visto, infatti, per cominciare la regola di quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD è definita solo per i sistemi classicamente integrabili, che sono un caso altamente particolare in più gradi di libertà (mentre sono il caso generale in un

<sup>71</sup> Il problema della determinazione dei termini di ordine  $\hbar^\infty$  è di una sottigliezza sorprendente, come hanno messo in evidenza ad esempio R. BALIAN, G. PARISI e A. VOROS nel caso dell'oscillatore quartico (si vedano le referenze in A. VOROS: *The return of the quartic oscillator. The complex WKB method*, Ann. Inst. H. Poincaré **39** (1983) 211–338.

<sup>72</sup> Un'ottima referenza per questo argomento è ancora il lavoro sopra citato di A. VOROS.

<sup>73</sup> Essendo il potenziale olomorfo, questa ipotesi equivale a richiedere che il moto classico non ammetta separatrici.

solo grado di libertà, perché stiamo al solito assumendo che i sistemi siano conservativi, e quindi l'integrale primo dell'energia esiste sempre). Anche in questa ipotesi estremamente restrittiva, tuttavia, la relazione fra i livelli di BOHR-SOMMERFELD e quelli esatti non è del tutto chiara: è noto infatti che vicino ad ogni livello definito dalla formula di BOHR-SOMMERFELD ce n'è uno esatto, ma non si sa il viceversa: potrebbero esistere livelli esatti non approssimabili alla BOHR-SOMMERFELD. Se si vogliono poi affrontare casi più generali, per prima cosa occorrerà considerare piccole perturbazioni di sistemi integrabili (i cosiddetti sistemi quasi-integrabili; sappiamo che in realtà queste restrizioni non sono troppo gravose, perché classi assai vaste di sistemi fisicamente interessanti possono essere ricondotte al caso quasi-integrabile) nelle condizioni in cui sia applicabile la versione di ARNOLD della teoria KAM ricordata nell'osservazione (3) del §2, dopo l'enunciato della regola di quantizzazione. Verrebbe spontaneo a questo punto pensare di quantizzare alla BOHR-SOMMERFELD la Hamiltoniana KAM  $K^\infty(\mathbf{J}, \epsilon)$  e di ottenere così una prima approssimazione dei livelli esatti. Un simile procedimento cozza tuttavia contro due ostacoli concettuali. Il primo è il fatto che, come abbiamo ricordato, in generale non è dato sapere se un certo valore  $\mathbf{J}^*$  delle azioni assegnato a priori appartenga all'insieme su cui è definita la Hamiltoniana KAM  $K^\infty(\mathbf{J}, \epsilon)$ : ora l'operazione di quantizzazione consiste esattamente nell'assegnare a priori i valori delle azioni imponendo loro di essere multipli interi di  $\hbar$ . Se anche il primo ostacolo fosse sormontabile, i livelli che si otterrebbero approssimerebbero forse la "maggior parte" di quelli esatti ma non tutti, perché come abbiamo visto la Hamiltoniana KAM non è definita sull'intero spazio delle azioni, e quindi esistono infinite celle di volume non minore di  $\hbar^N$  nello spazio delle fasi a cui essa non assegna alcun valore dell'energia. La rimozione del primo ostacolo sarebbe un passo preliminare verso una formulazione quantistica della teoria KAM, che a tutt'oggi manca. In tal caso si potrebbe rinunciare a sormontare il secondo, ed accontentarsi di una formula di quantizzazione che approssimi "la maggior parte" dello spettro, se non tutto.

Comunque a tutt'oggi queste difficoltà non sono superate, e volendo descrivere lo spettro dei sistemi quasi-integrabili tramite una formula di quantizzazione si deve procedere ancora come BORN e i suoi allievi, cioè quantizzare alla BOHR-SOMMERFELD ogni ordine della teoria classica delle perturbazioni. Ora ci chiediamo ancora una volta: quale sarà la relazione fra i livelli definiti da una simile quantizzazione di BOHR-SOMMERFELD della forma normale classica e i livelli esatti? Se fosse possibile costruire una forma normale quantistica, la risposta sarebbe intuitiva: i livelli semiclassici sopra definiti rappresenterebbero l'approssimazione all'ordine 0 in  $\hbar$  dei livelli della forma normale quantistica, ed avrebbe un senso porsi il problema della costruzione delle correzioni quantistiche alla forma normale classica. Vediamo dunque come si può impostare il problema dell'esistenza di una siffatta forma nor-

male, della sua relazione con lo spettro dell'operatore di SCHRÖDINGER e, se possibile, della sua costruzione.

### §7. Forme normali quantistiche e teoria delle perturbazioni di RAYLEIGH-SCHRÖDINGER

Consideriamo d'ora in poi, per semplicità di esposizione, solo i sistemi quasi integrabili che possano essere scritti come perturbazione olomorfa di un sistema di oscillatori armonici indipendenti in  $N$  gradi di libertà<sup>74</sup>. Denoteremo ancora con:

$$H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = \frac{1}{2}(\mathbf{p}^2 + \boldsymbol{\omega}^2 \mathbf{q}^2) \quad (7.1a)$$

la Hamiltoniana di un sistema di  $N$  oscillatori armonici indipendenti, essendo  $\mathbf{p} = (p_1, \dots, p_N)$ ;  $\mathbf{q} = (q_1, \dots, q_N)$ , e  $\boldsymbol{\omega} = (\omega_1, \dots, \omega_N)$  il vettore delle frequenze. Dato un potenziale olomorfo  $V(\mathbf{q})$ , denoteremo poi con

$$H_\epsilon(\mathbf{p}, \mathbf{q}) = H_0(\mathbf{p}, \mathbf{q}) + \epsilon V(\mathbf{q}) \quad (7.1b)$$

la Hamiltoniana perturbata. Siano poi ancora  $T_0$  e  $T_\epsilon$  gli operatori di Schrödinger in  $L^2(\mathbb{R}^N)$  corrispondenti a  $H_0$  e ad  $H_\epsilon$ , definiti come sappiamo dalle seguenti azioni massimali sulle funzioni  $u(\mathbf{x})$ ,  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$ :

$$T_0 u = \frac{1}{2}(-\hbar^2 \Delta + \boldsymbol{\omega}^2 \mathbf{q}^2)u, \quad (7.2a)$$

$$T u = T_0 u + V(\mathbf{q})u, \quad (7.2b)$$

e infine  $S_0$  e  $S_\epsilon$  le loro immagini unitarie nello spazio di BARGMANN  $\mathcal{F}_N = \mathcal{F} \otimes \dots \otimes \mathcal{F}$ , definite dalle seguenti azioni massimali sulle funzioni  $f(\mathbf{z}) \in \mathcal{F}_N$  delle  $N$  variabili complesse  $(z_1, \dots, z_N) = \mathbf{z}$ :

$$S_0 f = \omega_1 z_1 \frac{\partial f}{\partial z_1} + \omega_1 \frac{1}{2} \hbar + \dots + \omega_N z_N \frac{\partial f}{\partial z_N} + \omega_N \frac{1}{2} \hbar \equiv \langle \boldsymbol{\omega} \mathbf{z}, \nabla_{\mathbf{z}} \rangle f + \frac{1}{2} \hbar |\boldsymbol{\omega}|, \quad (7.3a)$$

$$S_\epsilon f = S_0 f + V \left( \frac{z_1 + \hbar \partial_{z_1}}{\sqrt{2\omega_1}}, \dots, \frac{z_N + \hbar \partial_{z_N}}{\sqrt{2\omega_N}} \right) f. \quad (7.3b)$$

Questi operatori corrispondono, come abbiamo già visto, alla quantizzazione di WEYL nello spazio di BARGMANN delle Hamiltoniane canonicamente equivalenti a  $H_0$  ed  $H_\epsilon$  espresse nelle coordinate canoniche  $(\zeta, \eta)$  dalle funzioni seguenti (consueto abuso di notazione)

$$H_0(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}; \boldsymbol{\omega}) = \langle \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta} \rangle; \quad H_\epsilon = H_0(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}; \boldsymbol{\omega}) + \epsilon V(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}). \quad (7.3c)$$

<sup>74</sup> Si noti che questo caso è meno particolare di quanto non appaia a prima vista: infatti vi si possono ricondurre tutti i sistemi descritti da Hamiltoniane olomorfe reali aventi minimi non degeneri, o, equivalentemente, che ammettano almeno un punto di equilibrio stabile.

Un primo esempio di *forma normale quantistica* l'abbiamo già visto: si tratta della formula (6.5). Essa infatti esprime il simbolo dell'operatore diagonalizzato unitariamente equivalente a quello dato in termini del simbolo dell'oscillatore armonico. Abbiamo anche visto, però, che non c'è assolutamente da aspettarsi che una formula simile, già molto particolare in un solo grado di libertà, valga nel caso generale. Infatti già il termine di ordine 0, cioè il simbolo principale, non può essere definito su insiemi aperti come abbiamo appena ricordato. Dunque non c'è da aspettarsi di potere realizzare il simbolo esatto dell'operatore come una forma normale definita da uno sviluppo in potenze ascendenti di  $\hbar$ . Quello che possiamo tentare di fare, invece, è di limitarci a considerare la teoria delle perturbazioni, e di cercare di generare le correzioni quantistiche alla forma normale classica. In altre parole potremmo cercare di realizzare in ogni ordine della teoria delle perturbazioni quello che non possiamo realizzare sul problema esatto: costruire la soluzione quantistica come quantizzazione esatta di quella classica il che significa, ripetiamo, ottenere la soluzione quantistica quantizzando alla BOHR-SOMMERFELD quella classica e determinare tutte le correzioni in serie di potenze ascendenti di  $\hbar$  che sommate al termine di BOHR-SOMMERFELD riproducono l'espressione quantistica.

Nel contesto in discussione, le perturbazioni olomorfe di un sistema di oscillatori armonici, il problema della quantizzazione esatta della serie delle perturbazioni quantistica si può formulare nel modo seguente:

Si assuma che le frequenze  $\omega_i : i = 1, \dots, N$  siano non-risonanti. Ciò assicura che lo spettro di  $S_0$ , denotato al solito con  $\sigma(S_0)$ , e che consiste nell'insieme di autovalori  $\{E_n(\hbar) = \hbar \langle n, \omega \rangle \mid \mathbf{n} = (n_1, \dots, n_N) : n_k = 1, \dots \mid k = 1, \dots, N\}$ , è semplice, cioè tutti gli autovalori hanno molteplicità 1. Si noti che abbiamo ommesso l'addendo costante  $\frac{1}{2} \hbar |\omega|$ , e così faremo sempre d'ora in poi.

Sotto quest'ultima ipotesi, data la natura del potenziale perturbante, esiste come noto a tutti gli ordini la teoria delle perturbazioni quantistica degli stati legati (detta equivalentemente teoria delle perturbazioni degli autovalori di RAYLEIGH-SCHRÖDINGER)<sup>75</sup>, *non degenerare* attorno ad ogni autovalore  $E_n(\hbar)$  di  $S_0$ , cioè esiste uno sviluppo formale in serie di potenze di  $\epsilon$  del tipo

$$E_n(\hbar, \epsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} E_k(\mathbf{n}, \hbar) \epsilon^k, \quad E_0(\mathbf{n}, \hbar) = E_n(\hbar). \quad (7.4)$$

Si noti che a priori la quantità  $E_n(\hbar, \epsilon)$  al primo membro denota solo una qualsiasi funzione di cui la serie al secondo rappresenta uno sviluppo asintotico nel senso di POINCARÉ. Essa esiste sempre, ma può non avere niente

---

<sup>75</sup> Un'ottima referenza a questo proposito è il §XII del Vol. IV del già citato trattato di REED-SIMON.

a che fare con gli autovalori di  $S(\epsilon)$ , che d'altra parte potrebbero benissimo a loro volta non esistere senza ulteriori ipotesi sulla natura del potenziale  $V$ . Anche l'esposizione di questi aspetti assai sottili della teoria delle perturbazioni va oltre gli scopi di questo quaderno <sup>76</sup>; qui assumeremo per semplicità che  $E_n(\hbar, \epsilon)$  sia per ogni  $n$  un autovalore di  $S(\epsilon)$  che ammetta la serie a secondo membro come sviluppo asintotico. Comunque i risultati che ricorderemo non richiedono questa ipotesi, perché si riferiscono alla quantizzazione dell'algoritmo perturbativo come oggetto a sé stante.

Sotto le medesime ipotesi, come sappiamo, esiste anche la serie canonica delle perturbazioni, che in questo caso, ricordiamo, prende il nome di forma normale di BIRKHOFF e verrà denotata nel modo seguente:

$$H^\infty(\mathbf{J}, \epsilon) \sim \sum_{k=0}^{\infty} N_k(\mathbf{J}) \epsilon^k; \quad \mathbf{J} = (J_1, \dots, J_N), \quad (7.5)$$

dove, ancora una volta, lo sviluppo in serie a secondo membro è in generale divergente <sup>77</sup> e  $H^\infty(\mathbf{J}, \epsilon)$  una qualsiasi funzione che l'ammetta come sviluppo asintotico; se tale funzione è la Hamiltoniana KAM, occorre ricordare che l'insieme delle azioni  $\mathbf{J}$  per cui tale sviluppo è valido *non è aperto e varia al variare di  $\epsilon$* .

Diremo allora che la serie delle perturbazioni (7.4) ammette *quantizzazione esatta* oppure che essa è scrivibile come *forma normale quantistica* se è possibile determinare delle funzioni olomorfe  $Q_k^j(\mathbf{J})$ :  $k, j = 1, \dots$  delle azioni classiche  $\mathbf{J}$  tali che risulti

$$E_k(\mathbf{n}, \hbar) = N_k(\mathbf{n}, \hbar) + \sum_{j=1}^{\infty} Q_k^j(\mathbf{n}, \hbar) \hbar^j, \quad (7.6)$$

dove le serie a secondo membro devono rappresentare almeno uno sviluppo asintotico delle corrispondenti funzioni  $E_k(\mathbf{n}, \hbar)$ , e costituiscono così le correzioni quantistiche al termine di BOHR-SOMMERFELD rappresentato da  $N_k(\mathbf{n}, \hbar)$ .

Vedremo che nelle ipotesi fatte sarà possibile ricavare la formula (7.6), mediante il procedimento seguente:

- (1) Scrivendo lo sviluppo perturbativo operatoriale per l'operatore diagonalizzato  $\Sigma(\epsilon) = US(\epsilon)U^{-1}$ :

$$\Sigma(\epsilon) = \sum_{k=0}^{\infty} D_k \epsilon^k, \quad D_0 = S_0, \quad (7.7)$$

<sup>76</sup> Oltre alla già citata referenza al trattato di REED-SIMON si può vedere in proposito l'articolo di rassegna di B. SIMON: *Large Orders in Perturbation Theory and Summability*, Int. J. Quantum Chemistry **XXII** (1982) 1-77.

<sup>77</sup> Se il numero di gradi di libertà è almeno due; per sistemi ad un grado di libertà essa è in generale convergente, diversamente dal caso quantistico, a causa dell'integrabilità.

si costruiscono ricorsivamente gli operatori diagonali  $D_k : k = 1, \dots$

- (2) Si dimostra che ciascun operatore diagonale  $D_k : k = 1, \dots$  ammette simbolo  $\Delta_k(\zeta, \eta; \hbar)$  esprimibile sotto forma (6.5), cioè esistono funzioni olomorfe  $\delta_k^j(\omega\zeta\eta) : k, j = 1, \dots$  tali che:

$$\Delta_k(\zeta, \eta; \hbar) = N_k(\omega\zeta\eta) + \sum_{j=1}^{\infty} \delta_k^j(\omega\zeta\eta) \hbar^j, \quad k, j = 1, \dots, \quad (7.8)$$

dove si è usata l'abbreviazione:

$$\omega\zeta\eta = (\omega_1 \zeta_1 \eta_1, \dots, \omega_N \zeta_N \eta_N).$$

- (3) Ragionando come nel §5, se vale la (7.8) si ricava immediatamente la formula di quantizzazione esatta (7.6) tramite le identificazioni seguenti:

$$N_k(n \hbar) = \langle n, \widehat{N}_k(\omega\zeta\eta)n \rangle; \quad Q_k^j(n \hbar) = \langle n, \widehat{\delta}_k^j(\omega\zeta\eta)n \rangle. \quad (7.9)$$

Questo procedimento di quantizzazione esatta della teoria canonica delle perturbazioni è stato messo in opera in due lavori recenti <sup>78</sup> ai quali rinvio per i dettagli. Mi limiterò ad esporre, nel prossimo paragrafo, il punto di partenza, costituito da un modo di costruire la teoria delle perturbazioni quantistica leggermente differente da quello consueto, e formalmente identico all'algoritmo di LIE per generare la teoria canonica delle perturbazioni.

### §8. Perturbazioni classiche e quantiche: due teorie, un solo algoritmo

Nella teoria delle perturbazioni quantistica (detta di RAYLEIGH–SCHRÖDINGER) si vuole diagonalizzare  $S(\epsilon)$  sulla base imperturbata cercando un operatore unitario <sup>79</sup>  $X_\epsilon$  tale che

$$X_\epsilon S(\epsilon) X_\epsilon^{-1} = K_\epsilon,$$

dove  $K_\epsilon$  commuta con  $S_0$ . Denotando con

$$W_\epsilon = \int_0^\epsilon W(x) dx$$

<sup>78</sup> Si veda S. GRAFFI, T. PAUL: *The Schrödinger Equation and Canonical Perturbation Theory*, Commun. Math. Phys. **108** (1987) 87–104 e M. DEGLI ESPOSTI, S. GRAFFI, J. HERCZYNSKI: *Exact Quantization of the Lie Algorithm in the Bargmann Representation*, Annals of Physics **208** (1991) 364–393.

<sup>79</sup> Si noti che è stata cambiata la notazione dell'operatore unitario diagonalizzante da  $U(\epsilon)$  a  $X_\epsilon$ , e dell'operatore diagonale da  $D(\epsilon)$  a  $K(\epsilon)$ .

il generatore autoaggiunto di  $X_\epsilon$ ,  $X_\epsilon = e^{iW_\epsilon/\hbar}$ , si ottengono subito, per ogni operatore  $A$  in  $\mathcal{F}$ , le ben note equazioni (formali)

$$\frac{d}{d\epsilon} X_\epsilon = -\frac{i}{\hbar} X_\epsilon W_\epsilon, \quad X_0 = I, \quad (8.1)$$

$$\frac{d}{d\epsilon} X_\epsilon A X_\epsilon^{-1} = \frac{i}{\hbar} X_\epsilon [A, W_\epsilon] X_\epsilon^{-1}. \quad (8.2)$$

Per generare la teoria delle perturbazioni di RAYLEIGH-SCHRÖDINGER operatoriale poniamo, nel senso delle serie di potenze formali,

$$W_\epsilon = \sum_{j=0}^{\infty} \epsilon^j W_{j+1}, \quad X_\epsilon A X_\epsilon^{-1} = \sum_{j=0}^{\infty} \epsilon^j T_j A \quad (8.3)$$

e definiamo

$$D_{W_j} A = [A, W_j], \quad W_0 = I, \quad D_{W_0} = 0. \quad (8.4)$$

Inserendo la (8.4) e la (8.3) nella (8.2) e imponendo l'uguaglianza dei coefficienti di  $\epsilon^n$  negli sviluppi di ambo i membri, si ottiene

$$T_n = \frac{i}{n\hbar} \sum_{j=1}^n T_{n-j} D_{W_j} \quad (n = 1, 2, \dots \text{ e } T_0 = I). \quad (8.5)$$

Poniamo ora  $A = S_0(\hbar) + \epsilon V = S(\epsilon)$  e cerchiamo di costruire lo sviluppo in serie formale di  $K_\epsilon$ :

$$K_\epsilon = \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon^\ell K_\ell. \quad (8.6)$$

Pertanto, imponendo ancora l'uguaglianza dei coefficienti delle medesime potenze di  $\epsilon$ , e richiedendo che si abbia  $X_\epsilon S(\epsilon) X_\epsilon^{-1} = K_\epsilon$ , si ottengono facilmente, in virtù di (8.2), (8.3), (8.4) e (8.5), le equazioni ricorrenti

$$K(\hbar, \boldsymbol{\omega}, 0) = K_0 = S_0(\hbar), \quad T_\ell K_0 + T_{\ell-1} V = K_\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots, \quad (8.7a)$$

cioè

$$\frac{i}{\ell\hbar} [K_0, W_\ell] + V_\ell = K_\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots, \quad (8.7b)$$

dove

$$V_1 = V; \quad V_\ell = T_{\ell-1} V + \frac{i}{\ell\hbar} \sum_{j=1}^{\ell-1} T_{\ell-j} D_{W_j} K_0, \quad \ell = 1, 2, \dots \quad (8.8)$$

A loro volta queste equazioni vengono risolte sulla base ortonormale  $|\mathbf{n}\rangle \equiv f_{\mathbf{n}} = f_{\mathbf{n}}(z) = \frac{z^{\mathbf{n}}}{\sqrt{\hbar^N \mathbf{n}!}}$  :  $n = 0, 1, \dots$  in  $\mathcal{F}$ , dove si sono usate le abbreviazioni

$$z^{\mathbf{n}} = z_1^{n_1} \dots z_N^{n_N}; \quad \mathbf{n}! = n_1! \dots n_N!$$

Abbiamo infatti

$$\left. \begin{aligned} \langle f_{\mathbf{m}} | W_{\ell} f_{\mathbf{n}} \rangle &= i \hbar \ell \frac{\langle f_{\mathbf{m}} | V_{\ell} f_{\mathbf{n}} \rangle}{E_{\mathbf{m}} - E_{\mathbf{n}}}, \quad \mathbf{m} \neq \mathbf{n} \\ \langle f_{\mathbf{m}} | [T_0, W_{\ell}] f_{\mathbf{m}} \rangle &= 0 \\ \langle f_{\mathbf{m}} | K_{\ell} f_{\mathbf{n}} \rangle &= \langle f_{\mathbf{m}} | V_{\ell} f_{\mathbf{n}} \rangle \delta_{\mathbf{m}, \mathbf{n}} \end{aligned} \right\} \quad (8.9)$$

e pertanto

$$E_{\ell}(\mathbf{n}, \hbar) = \langle f_{\mathbf{n}} | K_{\ell} f_{\mathbf{n}} \rangle = \langle f_{\mathbf{n}} | V_{\ell} f_{\mathbf{n}} \rangle. \quad (8.10)$$

Si genera invece la teoria classica delle perturbazioni cercando una trasformazione canonica  $(\boldsymbol{\zeta}_1, \boldsymbol{\eta}_1) = \chi_{\epsilon}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$  ed una funzione  $N(\mathbf{J}, \epsilon)$  tali che

$$(\langle \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta} \rangle + \epsilon V(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})) \circ \chi_{\epsilon} = N(\mathbf{J}, \epsilon) = N(\boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\eta}, \epsilon)$$

(Qui manteniamo la notazione  $(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$  per indicare le variabili canoniche “nuove”). L’algoritmo di LIE<sup>80</sup> consiste nel determinare  $\chi_{\epsilon}$  come il flusso di una Hamiltoniana ausiliaria non autonoma  $W_{\epsilon}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$  in cui  $\epsilon$  rappresenta il “tempo”. Dato ogni osservabile olomorfo  $f(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$  on  $\mathbb{C}^{2N}$  e data ogni Hamiltoniana olomorfa  $w(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$ , si indichi con  $t_{\epsilon}$  l’operatore di composizione con  $\chi_{\epsilon}$  :  $(t_{\epsilon} f)(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}) = (f \circ \chi_{\epsilon})(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$  e con  $(\mathcal{L}_w f)(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}) = \{f, w\}(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$  la derivata di LIE rispetto al flusso generato da  $w$ .

L’equazione da risolvere è pertanto

$$t_{\epsilon}(\langle \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta} \rangle + \epsilon V(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})) = t_{\epsilon}(\langle \boldsymbol{\omega} \boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta} \rangle + \epsilon V(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})) = N(\boldsymbol{\zeta} \boldsymbol{\eta}, \epsilon) = N(\mathbf{J}, \epsilon). \quad (8.11)$$

Si osservi ora che, per ogni osservabile olomorfo  $f$ , si può scrivere

$$\left( \frac{d}{d\epsilon} f \right) (\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}) = t_{\epsilon}(\{f, W_{\epsilon}\})(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}) = t_{\epsilon}(\mathcal{L}_w f)(\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta})$$

---

<sup>80</sup> L’algoritmo in questione è in realtà stato introdotto da T. HORI, A. DEPRIT e J.R. CARY (si veda ad esempio J.R. CARY, *Lie Transform Perturbation Theory for Hamiltonian Systems*, Physics Reports **79** (1981) 129–211) che gli hanno dato il nome di metodo di LIE perché esso fa intervenire, come vedremo, una derivazione lungo il flusso generato da una Hamiltoniana da costruirsi, che appunto definisce la trasformazione canonica cercata; tale derivazione costituisce un caso particolare della derivazione lungo le curve integrali dei campi vettoriali introdotta dal matematico norvegese SOPHUS LIE nell’ultimo decennio del secolo scorso.

perché  $\epsilon$  è il “tempo” e  $\chi_\epsilon$  il flusso generato dalla Hamiltoniana  $W_\epsilon$ :

$$\frac{d}{d\epsilon}\eta = i\nabla_\zeta W_\epsilon, \quad \frac{d}{d\epsilon}\zeta = -i\nabla_\eta W_\epsilon, \quad (8.12)$$

che porta i dati iniziali  $(\zeta_1, \eta_1)$  al punto  $(\zeta, \eta)$  nel “tempo”  $\epsilon$ . Sviluppamo ora  $W_\epsilon, t_\epsilon, N(\zeta, \eta, \epsilon)$  in serie di potenze (formali) di  $\epsilon$ :

$$W_\epsilon = \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon^\ell w_{\ell+1}, \quad t_\epsilon = \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon^\ell t_\ell, \quad N(\zeta, \eta, \epsilon) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon^\ell N_\ell(\zeta, \eta), \quad (8.13)$$

da cui  $\frac{d}{d\epsilon}t_\epsilon = \sum_{\ell=0}^{\infty} \epsilon^{\ell-1} \ell t_\ell$ . Sostituendo la (8.12) in quest’ultima equazione e imponendo ancora una volta l’uguaglianza dei coefficienti delle potenze di  $\epsilon$  di uguale ordine negli sviluppi di ambo i membri, otteniamo

$$\ell t_\ell = \sum_{j=1}^{\ell} t_{\ell-j} \mathcal{L}_{w_j}, \quad t_0 = I_d, \quad (8.14)$$

cosicché, sviluppando ambo i membri della (8.11) e ricordando la (10c):

$$t_\ell \langle \omega \zeta, \eta \rangle + t_{\ell-1} v = N_\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots : \quad N_0 = \langle \omega \zeta, \eta \rangle, \quad (8.15)$$

da cui, per la (8.14):

$$\frac{1}{\ell} \{ \langle \omega \zeta, \eta \rangle, w_\ell \} + v_\ell = N_\ell, \quad \ell = 1, 2, \dots, \quad (8.16)$$

$$v_1 = v, \quad v_\ell = t_{\ell-1} v + \frac{1}{\ell} \sum_{j=1}^{\ell-1} t_{\ell-j} \mathcal{L}_{w_j} \langle \omega \zeta, \eta \rangle, \quad \ell = 2, 3, \dots \quad (8.17)$$

Per risolvere queste equazioni cerchiamo di determinare lo sviluppo in serie di TAYLOR delle funzioni incognite (nelle variabili  $(\zeta, \eta)$ ): dato lo sviluppo di TAYLOR di  $v_\ell$ ,

$$v_\ell = \sum_{\alpha, \beta=0}^{\infty} v_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \zeta^\alpha \eta^\beta, \quad v_1 \equiv v = \sum_{\alpha, \beta=0}^M v_{\alpha, \beta} \zeta^\alpha \eta^\beta, \quad (8.18a)$$

la cui costruzione fa intervenire  $w_j$  e  $N_j$  solo fino all’ordine  $j = \ell - 1$ , i coefficienti degli sviluppi di TAYLOR di  $w_\ell$  e  $N_\ell$ ,

$$w_\ell = \sum_{\alpha, \beta=0}^{\infty} w_{\alpha, \beta}^{(\ell)} \zeta^\alpha \eta^\beta, \quad N_\ell = \sum_{\alpha=0}^{\infty} N_\alpha^{(\ell)} \zeta^\alpha \eta^\alpha = \sum_{\alpha=0}^{\infty} N_\alpha^{(\ell)} \mathcal{J}^\alpha, \quad (8.18b)$$

saranno dati da

$$w_{\alpha, \beta}^{(\ell)} = i \frac{v_{\alpha, \beta}^{(\ell)}}{\langle \omega, (\beta - \alpha) \rangle}, \quad \alpha \neq \beta; \quad N_{\alpha}^{(\ell)} = v_{\alpha, \alpha}^{(\ell)}. \quad (8.18c)$$

Se  $V$  è un polinomio, le serie di TAYLOR (8.18 a,b) si riducono a somme finite.

Si osservi ora che le equazioni ricorrenti classiche (8.15–17) coincidono con quelle quantiche (8.5–8) purché si operino le sostituzioni seguenti:

$$\begin{cases} \langle \omega \zeta, \eta \rangle \rightarrow \langle \widehat{\omega \zeta}, \eta \rangle = S_0; & \mathcal{L}_{w_j} \rightarrow D_{W_j}; & v^{(\ell)} \rightarrow V^{(\ell)}; \\ w_{\ell} \rightarrow W_{\ell}; & N_{\ell} \rightarrow K_{\ell}. \end{cases} \quad (8.19)$$

La prima quantizzazione è esatta. Le rimanenti sono formali. Dunque la serie quantica è la quantizzazione formale di quella classica. Nel già citato lavoro di DEGLI ESPOSTI, GRAFFI, HERCZYNSKI si prova appunto che la prima è la quantizzazione esatta della seconda: gli operatori quantistici  $K_{\ell}, V_{\ell}, W_{\ell}$  in  $\mathcal{F}$  sono rappresentabili come la quantizzazione esatta dei corrispondenti coefficienti classici  $N_{\ell}, v_{\ell}, w_{\ell}$ . Più precisamente, possiamo riassumere il risultato sotto la forma seguente:

#### TEOREMA

Sia  $v(\mathbf{q})$  un polinomio di grado  $M$ . Allora, dato  $\ell = 1, 2, \dots$  esistono dei polinomi costruiti per ricorrenza, denotati con

$$\zeta \eta \mapsto N_j^{(\ell)}(\zeta \eta), \zeta, \eta \mapsto v_j^{(\ell)}(\zeta, \eta), \zeta, \eta \mapsto w_j^{(\ell)}(\zeta, \eta), j = 1, 2, \dots, M(\ell - 1)$$

tali che

$$K_{\ell} = \widehat{N}_{\ell} + \sum_{j=1}^{M(\ell-1)} \hbar^j \widehat{N}_j^{(\ell)}, \quad (8.20a)$$

$$V_{\ell} = \widehat{v}_{\ell} + \sum_{j=1}^{M(\ell-1)} \hbar^j \widehat{v}_j^{(\ell)}, \quad (8.20b)$$

$$w_{\ell} = \widehat{w}_{\ell} + \sum_{j=1}^{M(\ell-1)} \hbar^j \widehat{w}_j^{(\ell)}. \quad (8.20c)$$

#### OSSERVAZIONI.

- (1) L'ipotesi che la perturbazione sia un polinomio non è essenziale. La si fa principalmente per semplificare i calcoli, che, qualora lo sviluppo di TAYLOR di  $v$  avesse infiniti termini, sarebbero particolarmente laboriosi anche se concettualmente semplici.
- (2) Al contrario, è essenziale l'ipotesi della razionale indipendenza delle frequenze, che equivale alla non degenerazione dello spettro imperturbato.

Il problema dell'estensione di questo risultato al caso risonante è tuttora aperto <sup>81</sup>.

- (3) Per ottenere il risultato, l'utilizzo della rappresentazione di BARGMANN è assolutamente essenziale. Solo essa infatti permette di scrivere le equazioni quantistiche sotto forma di equazioni alle derivate parziali lineari a coefficienti costanti immediatamente risolubili per serie di TAYLOR come le equazioni ricorrenti classiche (8.15–17), alle quali si riducono per  $\hbar = 0$ .
- (4) Un ulteriore punto critico, che permette di costruire la ricorrenza su  $\hbar$  dopo quella su  $\epsilon$ , è la seguente trascrizione nella rappresentazione di BARGMANN, tramite il prodotto simmetrico di BEREZIN–SHUBIN, della formula di MOYAL <sup>82</sup>, assai interessante di per se stessa, per il simbolo completo del commutatore di due operatori  $F = \widehat{f}, G = \widehat{g}$  di simboli  $f(\zeta, \eta), g(\zeta, \eta)$ :

$$\frac{i}{\hbar}[\widehat{f}, \widehat{g}] = \sum_{i=0}^{\infty} \hbar^i \{f, g\}_{(j)}, \quad (8.21)$$

dove  $\{f, g\}_{(j)} = 0, j = 1, 3, 5, \dots$ , e

$$\{f, g\}_{(j)} = i \frac{2^{-j}}{(j+1)!} \sum_{s=0}^j (-1)^s \binom{j}{s} \sum_{|\alpha|=j-s, |\beta|=s} \{\partial_{\eta}^{\beta} \partial_{\zeta}^{\alpha} f - \partial_{\eta}^{\alpha} \partial_{\zeta}^{\beta} g\}$$

$$j = 0, 2, \dots \quad (8.22)$$

Qui, al solito, si è usata l'abbreviazione:

$$\partial_{\eta}^{\alpha} = \partial_{\eta_1}^{\alpha_1} \dots \partial_{\eta_N}^{\alpha_N}.$$

---

<sup>81</sup> Per alcuni risultati parziali in questa direzione si veda S. GRAFFI: *Exact Quantization of Canonical Perturbation Theory*, in *Probabilistic Methods in Mathematical Physics* (ed. F. GUERRA, M.I. LOFFREDO, C. MARCHIORO), World Scientific, Singapore (1992), pp. 233–243.

<sup>82</sup> Si veda J.E. MOYAL: *Quantum Mechanics as a Statistical Theory*, Proc. Camb. Phil. Soc. **45** (1949) 99–1224.



(Albert Einstein)

**1. Formulazione a tutt'oggi.** Non sussiste più alcun dubbio sul fatto che per sistemi meccanici periodici ad un grado di libertà la condizione di quantizzazione abbia la forma

$$\int p dq = \int p \frac{dq}{dt} dt = nh \quad (1)$$

(SOMMERFELD e DEBYE). Qui l'integrale deve essere esteso ad un intero periodo del moto;  $q$  denota la coordinata, e  $p$  il corrispondente impulso del sistema. Per di più i lavori sulla teoria degli spettri di SOMMERFELD dimostrano con certezza che per sistemi con più gradi di libertà si devono introdurre più condizioni di quantizzazione al posto della singola condizione (1), in generale altrettante ( $\ell$ ) quante il numero dei gradi di libertà che il sistema possiede. Queste  $\ell$  condizioni sono espresse da SOMMERFELD così:

$$\int p_i dq_i = n_i h. \quad (2)$$

Poiché questa formulazione non è indipendente dalla scelta delle coordinate, essa può sussistere solo per una determinata scelta delle coordinate. Solo se si applica questa scelta, e le  $q_i$  sono funzioni periodiche del tempo, il sistema (2) contiene un'affermazione determinata sul moto.

Dobbiamo un ulteriore progresso concettuale a EPSTEIN e SCHWARZSCHILD. Il primo fonda la sua regola per la scelta delle coordinate  $q_i$  di SOMMERFELD sul teorema di JACOBI, che notoriamente può essere enunciato in questo modo: Sia  $H[H(q_i, p_i)]$  la Hamiltoniana, funzione delle  $q_i, p_i, t$  che genera le equazioni canoniche

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad (3)$$

---

<sup>83</sup> *Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein*, Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft **19** (1917) 82–92. Conferenza tenuta nella seduta dell'11 maggio 1917 della Deutsche Physikalische Gesellschaft.

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad (4)$$

e che – nel caso non contenga il tempo esplicitamente – coincide con la funzione energia <sup>[1]</sup>; se  $J(t, q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n)$  è un integrale completo dell'equazione a derivate parziali di HAMILTON-JACOBI, allora la soluzione delle equazioni canoniche ha l'espressione:

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha_i} = \beta_i, \quad (6)$$

$$\frac{\partial J}{\partial q_i} = p_i. \quad (7)$$

Se  $H$  non contiene esplicitamente il tempo, come assumeremo in seguito, la (5) può essere soddisfatta mediante la posizione

$$J = J^* - ht, \quad (8)$$

dove  $h$  è una costante e  $J^*$  non ha più dipendenza esplicita dal tempo  $t$ . Pertanto le (5), (6) vengono sostituite dalle equazioni

$$H\left(q_i, \frac{\partial J^*}{\partial q_i}\right) = h, \quad (5a)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial J^*}{\partial \alpha_i} = \beta_i, \\ \frac{\partial J^*}{\partial h} = t - t_0, \end{cases} \quad (6a)$$

$$\frac{\partial J^*}{\partial q_i} = p_i, \quad (7a)$$

dove tuttavia la prima delle equazioni (6a) rappresenta ora  $\ell - 1$  equazioni, e dove al posto di  $\alpha_n$  va sostituita la costante  $h$  e al posto di  $\beta_n$  la costante  $-t_0$ .

Secondo il procedimento di EPSTEIN si devono ora scegliere le coordinate  $q_i$  in modo tale che esista un integrale completo della (5a) della forma

$$J^* = \sum_i J_i(q_i), \quad (8a)$$

---

<sup>[1]</sup> Infatti in questo caso si ha

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i = 0. \quad (5)$$

dove  $J_i$  dipende da  $q_i$  ma non dai rimanenti  $q$ . Le condizioni di quantizzazione di SOMMERFELD (2) devono pertanto valere per queste coordinate, nel caso in cui le  $q_i$  siano funzioni periodiche di  $t$ .

A causa dei grandi successi conseguiti dall'estensione di SOMMERFELD-EPSTEIN alla quantizzazione di sistemi con più gradi di libertà, rimane tuttavia non soddisfacente il fatto che essa sia applicabile solo mediante separazione delle variabili, ciò che non ha nulla a che fare con il problema della quantizzazione. Nel seguito verrà descritta una piccola modificazione della condizione di SOMMERFELD-EPSTEIN, che evita questo inconveniente. Ne accennerò qui i concetti basilari per poi svolgerli più da vicino in quanto seguirà.

**2. Formulazione modificata.** Mentre  $pdq$  è un invariante, cioè è indipendente dalla scelta della coordinata  $q$ , nei sistemi ad un grado di libertà, nei sistemi a più gradi di libertà i singoli prodotti  $p_i dq_i$  non sono invarianti; pertanto la condizione di quantizzazione (2) non possiede alcun significato invariante. Invariante è solo la somma  $\sum_i p_i dq_i$  estesa a tutti gli  $\ell$  gradi di libertà. Per dedurre ora da questa somma una pluralità di condizioni di quantizzazione invarianti, si può procedere nel modo seguente. Si considerino i  $p_i$  come funzione dei  $q_i$ . Detto geometricamente, si può allora considerare  $p_i$  come un vettore (di carattere "covariante") nello spazio  $\ell$ -dimensionale delle  $q_i$ . Se si traccia nello spazio delle  $q_i$  una qualsiasi curva chiusa, che non è affatto detto che debba coincidere con una "traiettoria" del sistema meccanico, allora l'integrale

$$\int \sum_i p_i dq_i \quad (9)$$

esteso a tale curva è un invariante. Se le  $p_i$  sono funzioni qualsivoglia delle  $q_i$ , allora in generale ad ogni curva chiusa corrisponde un valore diverso dell'integrale (9). Se invece il vettore  $p_i$  deriva da un potenziale, cioè se valgono le relazioni

$$\frac{\partial p_i}{\partial q_k} - \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0 \quad (10)$$

e, rispettivamente,

$$p_i = \frac{\partial J^*}{\partial q_i}, \quad (10a)$$

allora l'integrale (9) assume lo stesso valore su tutte le curve chiuse che possono essere ricondotte l'una all'altra in modo continuo. Pertanto l'integrale (9) si annulla su tutte le curve che possono essere ridotte ad un punto mediante una deformazione continua. Se tuttavia lo spazio delle  $q_i$  da considerare ammette connessione multipla, allora esistono curve chiuse che non possono essere ridotte ad un punto mediante deformazioni continue; se pertanto  $J^*$  non è una funzione univoca (ma ad infiniti valori) delle  $q_i$ , allora l'integrale (9) sarà in generale diverso da zero per una tale curva. Ci sarà tuttavia un numero finito di

curve chiuse nello spazio  $q$  alle quali si possono ridurre mediante deformazione continua tutte le curve chiuse nello spazio. In questo senso è pertanto possibile prescrivere un numero finito di condizioni

$$\int \sum_i p_i dq_i = n_j h \quad (11)$$

come condizioni di quantizzazione. Secondo la mia opinione queste condizioni devono essere sostituite alle condizioni di quantizzazione (2). Dovremo aspettarci che il numero di equazioni (10), che non si lasciano ridurre l'una all'altra, sia uguale al numero di gradi di libertà del sistema. Se è minore, incontreremo un caso di "degenerazione".

L'idea guida fin qui delineata (in modo intenzionalmente incompleto) sarà ora esposta in modo un po' più dettagliato.

**3. Derivazione immediata dell'equazione differenziale di HAMILTON-JACOBI.** Dato un punto  $P$  nello spazio delle coordinate, se sono note le sue coordinate  $Q_i$  e le corrispondenti velocità, cioè i corrispondenti impulsi  $P_i$ , allora il moto è completamente determinato <sup>[2]</sup> attraverso le equazioni canoniche (3) e (4). Allora ad ogni punto della traiettoria  $L$  corrisponde una determinata velocità, cioè su  $L$  le  $p_i$  sono determinate in funzione delle  $q_i$ . Se ci si immagina che in ogni punto  $P$  su una "superficie"  $(\ell - 1)$ -dimensionale dello spazio delle coordinate siano dati i medesimi corrispondenti  $P_i, Q_i$ , allora ad ognuno dei punti corrisponde un moto con una traiettoria  $L$  nello spazio delle coordinate. Se i  $P_i$  sulla superficie sono funzioni continue delle  $Q_i$ , queste traiettorie riempiranno in modo continuo lo spazio delle coordinate (od una sua parte). Per ogni punto  $(q_i)$  dello spazio delle coordinate passerà una determinata traiettoria; quindi a questo punto corrisponderanno anche ben determinate coordinate di impulso  $p_i$ . Ci proponiamo ora il compito di stabilire la legge di questo campo vettoriale.

Se consideriamo le  $p_i$  come funzioni delle  $q_i$  nel sistema di equazioni canoniche (3), dobbiamo sostituire i primi membri con

$$\sum_k \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt},$$

che a loro volta diventano, per le (4),

$$\sum_k \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k}.$$

---

<sup>[2]</sup> Si ammette che  $H$  non dipenda esplicitamente dal tempo  $t$ .

Otteniamo quindi, al posto di (3),

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_k \frac{\partial p_k}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k} = 0. \quad (12)$$

Questo è un sistema di  $\ell$  equazioni differenziali lineari che le  $p_k$  devono soddisfare in funzione delle  $q_k$ .

Ci chiediamo ora se ci sono campi vettoriali di questo tipo per cui esiste un potenziale  $J^*$ , cioè per cui le condizioni (10) e (10a) sono soddisfatte. In questo caso a causa di (10) la (12) prende la forma:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_k \frac{\partial p_k}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_k} = 0. \quad (12a)$$

Questa equazione significa che  $H$  non dipende dalle  $q_i$ . Esistono dunque campi potenziali del tipo cercato, ed il loro potenziale  $J^*$  soddisfa l'equazione di HAMILTON-JACOBI (5a), e corrispondentemente  $J$  l'equazione (5).

Con ciò si è dimostrato che le equazioni (3) possono essere sostituite dalle (7a) e (5a) o dalle (7) e (5), rispettivamente. Vogliamo inoltre dimostrare come il sistema (4) sia soddisfatto attraverso le (6a) o le (6), rispettivamente, anche se questo non ha importanza per le considerazioni successive. Una volta espresse le  $p_i$  in funzione delle  $q_i$ , in virtù della (7a), per integrazione della (5a), le equazioni (4) formano un sistema di equazioni differenziali totali per la determinazione delle  $q_i$  in funzione del tempo. Per la teoria delle equazioni differenziali del primo ordine, questo sistema di equazioni differenziali totali è equivalente alla equazione alle derivate parziali

$$\sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial \varphi}{\partial q_k} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0. \quad (13)$$

Quest'ultima tuttavia è soddisfatta da

$$\varphi = \frac{\partial J^*}{\partial \alpha_i}$$

nel caso in cui  $J$  sia un integrale completo della (5). Se si pone cioè questo valore della  $\varphi$  nel primo membro della (13) si ottiene, in considerazione della (7):

$$\sum_k \frac{\partial H}{\partial \left( \frac{\partial J}{\partial q_k} \right)} \frac{\partial^2 J}{\partial q_k \partial \alpha_i} + \frac{\partial^2 J}{\partial t \partial \alpha_i},$$

ossia

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \left\{ H \left( q_k, \frac{\partial J}{\partial q_k} \right) + \frac{\partial J}{\partial t} \right\},$$

le quali grandezze si annullano a causa di (5). Da ciò segue che le equazioni (4) sono integrate mediante le (6) o le (6a), rispettivamente.

#### 4. Il campo delle $p_i$ di una singola traiettoria.

Arriviamo ora ad un punto del tutto essenziale, sul quale ho intenzionalmente taciuto nella precedente schematizzazione delle idee guida nel n. 2. Tramite le considerazioni del n. 3 abbiamo pensato il campo come generato attraverso infiniti moti distinti  $(\ell - 1)$ -dimensionali, che erano descritti da altrettante traiettorie nello spazio delle coordinate. Ora consideriamo invece il moto imperturbato di un singolo sistema percorso in un tempo infinito e immaginiamo tracciata nello spazio delle coordinate la traiettoria corrispondente. Qui si possono verificare due casi:

- (1) Esiste una parte [sottoinsieme] dello spazio delle coordinate tale che la traiettoria, nel corso del tempo, passa arbitrariamente vicino a ciascun punto di questo sottoinsieme ( $\ell$ -dimensionale).
- (2) La traiettoria si può interamente rinchiudere in un continuo di dimensione minore di  $\ell$ . A ciò appartengono come casi particolari tutti i moti che danno origine a traiettorie chiuse.

Il caso 1 è quello più generale; i casi 2 possono verificarsi per specializzazione di 1. Consideriamo come esempio di 1 il moto di un punto materiale sotto l'azione di una forza centrale, descritto attraverso due coordinate che determinano la posizione nel piano del moto (ad es., le coordinate polari  $r$  e  $\varphi$ ). Il caso 2 si verifica, per esempio, se la legge di attrazione è esattamente proporzionale a  $1/r^2$ , e se si trascurano le correzioni al moto kepleriano richieste dalla teoria della relatività; la traiettoria è allora chiusa, ed i suoi punti formano un continuo di solamente una dimensione. Anche se considerato nello spazio tridimensionale il moto centrale è sempre un moto di tipo 2, dato che la traiettoria può essere rinchiusa in un continuo bidimensionale; in certe considerazioni tridimensionali occorre considerare il moto centrale come caso particolare di un moto definito da una legge di forza complicata (per esempio il moto studiato da EPSTEIN nella teoria dell'effetto STARK).

L'osservazione seguente si riferisce al caso generale 1. Si prenda in considerazione un elemento  $d\tau$  dello spazio delle coordinate. La traiettoria del movimento considerato vi passa attraverso infinite volte. Ad ogni tale attraversamento corrisponde un sistema di impulsi ( $p_i$ ). A priori sono possibili due tipi di traiettorie, che si distinguono l'uno dall'altro per una differenza fondamentale.

Tipo a): i sistemi delle  $p_i$  si ripetono, cosicché solo un numero finito di sistemi  $p_i$  appartiene a  $d\tau$ . In questo caso i  $p_i$  si possono rappresentare come funzioni uni- o plurivoche delle  $q_i$  per il processo di moto considerato.

Tipo b): compaiono infiniti sistemi  $p_i$  al posto considerato. In questo caso le  $p_i$  non si possono esprimere come funzioni delle  $q_i$ .

Si osserva immediatamente che il tipo b) esclude l'applicabilità della condizione di quantizzazione (11) formulata nel n. 2. D'altra parte la meccanica statistica classica si riferisce essenzialmente solo al tipo b); infatti solo

in questo caso l'insieme microcanonico è equivalente alla media temporale relativa ad un sistema <sup>[3]</sup>.

Riassumendo possiamo dire: l'applicazione della condizione (11) richiede che esistano traiettorie di tal fatta, che la singola traiettoria determini un campo  $p_i$  per cui esiste un potenziale  $J^*$ .

### 5. Lo "spazio delle coordinate razionale".

È già stato osservato che in generale le  $p_i$  sono funzioni a più valori delle  $q_i$ . Consideriamo ancora come semplice esempio il moto piano di un punto sotto l'attrazione di un centro fisso. Il punto si muove in modo tale che la sua distanza  $r$  dal centro di attrazione oscilla periodicamente fra un valore minimo  $r_1$  e un valore massimo  $r_2$ . Se si considera ora un punto dello spazio delle coordinate, cioè un punto che giace nella superficie anulare limitata dalle due circonferenze di raggi  $r_1$  e  $r_2$ , la traiettoria gli passerà vicino infinite volte nel corso del tempo oppure – detto un po' meno precisamente – lo riattraverserà. Ma ogni volta che l'attraversamento ha luogo su un arco di  $r$  crescente o su un arco di  $r$  decrescente, la componente radiale della velocità ha un segno differente; le  $p_i$  sono funzioni a più valori delle  $q_i$ .

La scomodità di rappresentazione che ne consegue si risolve al meglio attraverso il noto metodo introdotto da RIEMANN in teoria delle funzioni. Immaginiamo la superficie anulare raddoppiata, in modo tale da avere due fogli congruenti a forma di anello circolare che giacciono l'uno sull'altro. Nell'anello superiore immaginiamo tracciato l'arco di traiettoria con  $\dot{r}$  positivo accanto al corrispondente sistema dei  $p_i$ , e in quello inferiore l'arco di traiettoria con  $\dot{r}$  negativo. In ambedue le circonferenze immaginiamo collegati ambedue i fogli, poiché il moto deve passare dall'uno all'altro anello circolare appena la traiettoria tocca una delle due circonferenze. Lungo queste circonferenze i  $p_i$  di ambedue i fogli coincidono, come si vede facilmente. Sulla superficie doppia i  $p_i$  hanno dunque l'interpretazione di funzioni delle  $q_i$  non solo continue, ma anche univoche; qui sta la sua importanza.

Sulla superficie doppia ci sono chiaramente due tipi di curve chiuse, che si possono ridurre ad un punto tramite deformazione continua, ma non si possono ricondurre l'una all'altra. La fig. 1 sottostante mostra un esempio per ciascuno di questi due tipi ( $L_1$  e  $L_2$ ); le parti di una linea che giacciono sul foglio inferiore sono quelle punteggiate. Tutte le altre curve chiuse si possono, tramite deformazione continua nella superficie doppia, o contrarsi in un punto oppure essere ricondotte ad uno o più percorsi dei tipi  $L_1$  e  $L_2$ . La condizione di quantizzazione (11) dovrebbe qui essere applicata ad ambedue i tipi  $L_1$  e  $L_2$ .

È chiaro che queste considerazioni si generalizzano a tutti i moti che soddisfano la condizione del n. 4. Si deve immaginare lo spazio delle fasi

---

<sup>[3]</sup> Nell'insieme microcanonico sono presenti sistemi che per ogni dato  $q_i$  ammettono ogni dato  $p_i$  (compatibili con il valore dell'energia).

in esame suddiviso in “tratti”, che si connettono lungo superficie  $(\ell - 1)$ -dimensionali, in modo tale che i  $p_i$ , interpretati nella rappresentazione che ne risulta, siano funzioni univoche e continue (anche all’atto della transizione da un tratto all’altro); denoteremo questa costruzione geometrica ausiliaria con il termine di “spazio delle fasi razionale”. La condizione di quantizzazione (11) deve essere riferita a tutte le linee chiuse nello spazio delle fasi razionale.

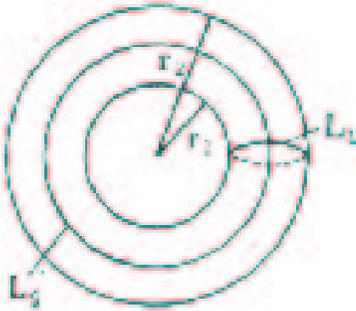


Fig. 1.

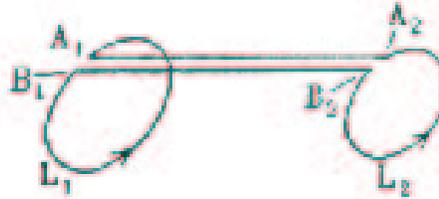


Fig. 2.

Affinché la quantizzazione in questa forma posseda un significato preciso l’integrale  $\int \sum p_i dq_i$  deve assumere lo stesso valore, se esteso a tutte le curve chiuse dello spazio delle coordinate razionale che possono essere ricondotte l’una all’altra con continuità. La dimostrazione si basa completamente sullo schema che ora esporremo. Siano (si veda la schematizzazione nella Fig. 2)  $L_1$  e  $L_2$  curve chiuse nello spazio delle coordinate razionale che possono essere ricondotte l’una all’altra con continuità mantenendo il verso di percorrenza. Pertanto il percorso indicato in figura è una curva chiusa contraibile in un punto con continuità. Da ciò segue, a causa di (10), che l’integrale esteso a questo percorso si annulla. Se si tiene inoltre in considerazione il fatto che gli integrali estesi alle due linee di collegamento infinitamente avvicinate  $A_1A_2$  e  $B_1B_2$  sono uguali a causa dell’univocità delle  $p_i$  nello spazio delle coordinate razionale, ne consegue l’uguaglianza degli integrali estesi a  $L_1$  e  $L_2$ .

Il potenziale  $J^*$  è una funzione ad infiniti valori anche nello spazio delle coordinate razionale; tuttavia, a causa della quantizzazione, questa multivocità è la più semplice immaginabile. Se infatti  $J^*$  è un valore del potenziale che corrisponde ad un punto dello spazio delle coordinate razionale, tutti gli altri sono  $J^* + nh$ , dove  $n$  è un numero intero.

[*Aggiunta in correzione* Un’ulteriore riflessione fa concludere che la seconda delle condizioni indicate nel n. 4 per l’applicabilità della formula (11) deve sempre essere automaticamente soddisfatta. Vale cioè l’affermazione: Se un moto genera un campo  $p_i$ , allora quest’ultimo possiede necessariamente un potenziale  $J^*$ .]

Per il teorema di JACOBI ogni moto del sistema può essere derivato da un integrale completo  $J^*$  della (5a). Esiste dunque in ogni caso almeno una funzione  $J^*$  delle  $q_i$  a partire dalla quale si possono calcolare, in base alle equazioni

$$p_i = \frac{\partial J^*}{\partial q_i},$$

gli impulsi  $p_i$  del moto considerato di un sistema per ciascun punto della sua traiettoria.

Dobbiamo ora ricordarci che  $J^*$  è stato ottenuto per integrazione di una equazione differenziale alle derivate parziali, cioè mediante una prescrizione di come la funzione  $J^*$  deve essere continuata nello spazio delle coordinate. Se, dato un sistema, vogliamo sapere anche come  $J^*$  si comporta nel corso del moto, dobbiamo immaginare  $J^*$  continuata lungo la traiettoria (anzi, in un suo intorno) per mezzo dell'equazione differenziale. Ora, quando il moto, trascorso un certo tempo (molto lungo) ritorna molto vicino ad un punto  $P$  per il quale la traiettoria era esattamente passata prima, la derivata  $\partial J^* / \partial q_i$  fornisce le coordinate d'impulso per ambedue i tempi, qualora abbiamo continuato ad integrare  $J^*$  lungo l'intero intervallo della traiettoria. Non ci si deve minimamente aspettare che dopo questa continuazione si ritorni ai valori precedenti delle  $\partial J^* / \partial q_i$ ; in generale ci si deve piuttosto aspettare che ogni qual volta che il sistema di coordinate  $q_i$  preso in considerazione venga riavvicinato nel corso del moto, si ottenga un sistema di  $p_i$  totalmente differente, cosicché sarà in generale impossibile esprimere le  $p_i$  in funzione delle  $q_i$  nel moto indefinitamente continuato. Quando tuttavia le  $p_i$  – o rispettivamente un numero finito di valori numerici di queste grandezze – si ripetono al ritorno della configurazione delle coordinate, allora è possibile esprimere  $\partial J^* / \partial q_i$  per il moto indefinitamente continuato. Se dunque esiste per il moto indefinitamente continuato un campo delle  $p_i$ , allora esiste sempre un corrispondente potenziale  $J^*$ .

Possiamo dunque affermare quanto segue: se esistono  $\ell$  integrali delle  $2\ell$  equazioni del moto della forma

$$R_k(q_i, p_i) = \text{cost}, \quad (14)$$

dove le  $R_k$  sono funzioni algebriche delle  $p_i$ , allora  $\sum p_i dq_i$  è sempre un differenziale esatto, se si immaginano le  $p_i$  espresse in funzione delle  $q_i$  tramite la (14). La condizione di quantizzazione ci dice che l'integrale  $\int \sum p_i dq_i$  esteso ad una curva irriducibile deve essere un multiplo di  $h$ . Questa condizione di quantizzazione coincide con quella di SOMMERFELD-EPSTEIN nel caso particolare in cui ciascuna delle  $p_i$  dipenda solo dalla corrispondente  $q_i$ .

Se esistono meno di  $\ell$  integrali del tipo (14), come dimostrato da POINCARÉ nel caso del problema dei tre corpi, le  $p_i$  non sono esprimibili attraverso le  $q_i$ , e la condizione di quantizzazione di SOMMERFELD-EPSTEIN viene a mancare, anche nella forma in qualche misura generalizzata qui ottenuta.



QUADERNI DI FISICA TEORICA  
Collana curata da Sigfrido Boffi

1. Le onde di de Broglie
2. Onde di materia e onde di probabilità
3. Il principio di indeterminazione
4. La meccanica delle onde
5. Paradosso EPR e teorema di Bell
6. I cammini di Feynman
7. L'interpretazione statistica della meccanica quantistica
8. L'origine delle statistiche quantistiche
9. Le radici della quantizzazione
10. La fase di Berry
11. Il postulato dei quanti e il significato della funzione d'onda
12. Indice di rifrazione adronico
13. La formulazione delle storie della meccanica quantistica
14. La regola d'oro di Fermi
15. Le radici del dualismo onda-corpuscolo
16. Teoria delle caratteristiche ed equazioni ondulatorie quantiche
17. La nascita del concetto di quanto
18. Da Heisenberg a Landau. Introduzione alla fisica dei sistemi a molte particelle
19. Aspetti astrofisici della materia oscura

Numero speciale:

Da Laplace a Heisenberg. Un'introduzione alla meccanica quantistica e alle sue applicazioni





## QUADERNI DI FISICA TEORICA

Collana curata da Sigfrido Boffi

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

### LE RADICI DELLA QUANTIZZAZIONE

Il lavoro di Albert Einstein del 1917 che generalizza le regole di quantizzazione di Bohr-Sommerfeld offre lo spunto all'autore per affrontare in modo originale il problema di una quantizzazione esatta che permetta di stabilire una connessione tra la "vecchia teoria dei quanti" e l'odierna meccanica quantistica basata sull'equazione di Schrödinger.

ISBN 88-85159-09-5