
Matematica, Cultura e Società

RIVISTA DELL'UNIONE MATEMATICA ITALIANA

ANDREA SACCHETTI

Sull'introduzione dei potenziali singolari in Meccanica Quantistica - un contributo di Enrico Fermi

Matematica, Cultura e Società. Rivista dell'Unione Matematica Italiana, Serie 1, Vol. 3
(2018), n.2, p. 113–122.

Unione Matematica Italiana

[<http://www.bdim.eu/item?id=RUMI_2018_1_3_2_113_0>](http://www.bdim.eu/item?id=RUMI_2018_1_3_2_113_0)

L'utilizzo e la stampa di questo documento digitale è consentito liberamente per motivi di ricerca e studio. Non è consentito l'utilizzo dello stesso per motivi commerciali. Tutte le copie di questo documento devono riportare questo avvertimento.

Sull'introduzione dei potenziali singolari in Meccanica Quantistica - un contributo di Enrico Fermi

ANDREA SACCHETTI

Università di Modena

E-mail: andrea.sacchetti@unimore.it

Sommario: *La teoria degli operatori lineari con potenziali singolari ha ormai acquisito all'interno dei Metodi Matematici per la Meccanica Quantistica un ruolo ben definito e consolidato. In tale teoria gioca un ruolo importante la distribuzione δ di Dirac. Con questo articolo si cerca di individuare la genesi di questo filone di ricerca e, in modo più specifico, riconoscere l'importante contributo dato dallo scienziato italiano Enrico Fermi.*

Abstract: *The theory of linear operators with singular potentials has acquired a well-defined and consolidated role within the Mathematical Methods for Quantum Mechanics. In this theory the Dirac's δ distribution plays an important role. With this article we try to identify the genesis of this line of research and, more specifically, recognize the important contribution given by the Italian scientist Enrico Fermi.*

1. – Introduzione

La teoria della Meccanica Quantistica si fonda sull'ipotesi che lo stato di un sistema può essere descritto mediante una funzione $\psi(x, t)$ a valori complessi, detta funzione d'onda del sistema, dipendente dalle coordinate x e dal tempo t . Questa funzione esprime una densità di probabilità $|\psi|^2$; più precisamente $|\psi(x, t)|^2 dx$ è la probabilità che una misura eseguita all'istante t sul sistema dia valori contenuti nell'intervallo dx . L'evoluzione temporale della funzione d'onda è soggetta all'equazione di Schrödinger dipendente dal tempo che per una singola particella di massa m prende la forma

$$(1) \quad \begin{cases} i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi + V(x)\psi \\ \psi(x, t_0) = \psi_0(x) \end{cases}$$

Accettato: il 1 marzo 2018.

Si ringrazia sentitamente la Domus Galileiana di Pisa per avermi dato accesso agli archivi di Enrico Fermi. Sono molto grato a Marco Maioli e a Elena Rinaldi per alcuni suggerimenti. Questo articolo è parzialmente supportato dal Gruppo Nazionale per la Fisica Matematica (GNFM-INdAM).

dove $\hbar = h/2\pi$, $h = 6.626 \cdot 10^{-34} J \cdot sec$ è la costante di Planck, i è l'unità immaginaria, $\Delta = \sum_{j=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial x_j^2}$ è

l'operatore Laplaciano in dimensione tre e $V(x)$ è l'energia potenziale (talvolta detto anche semplicemente potenziale) associata al campo di forze, supposte conservative, agenti sulla particella. La teoria può poi essere estesa al caso di un sistema composto da più particelle o dove lo spazio delle configurazioni è più complesso dello spazio euclideo. Da un punto di vista matematico il problema (1) è un problema di Cauchy dove $\psi_0(x)$ rappresenta la funzione d'onda che descrive lo stato del sistema quantistico all'istante iniziale t_0 . Poiché la funzione d'onda $\psi(x, t)$ definisce, attraverso il suo modulo al quadrato, una densità di probabilità allora è naturale assumere che $\psi(x, t) \in L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ per ogni istante t e che $\|\psi_0(x)\|_{L^2(\mathbb{R}^3, dx)} = 1$.

In tante applicazioni l'energia potenziale $V(x)$ viene rappresentata mediante una funzione, ad esempio: nel modello di semplice buca/barriera $V(x)$ è una funzione costante a tratti; nello studio del moto di una particella carica in un cristallo $V(x)$ è una funzione periodica; infine nello studio dell'inte-

razione tra una particella carica ed una carica puntiforme posta nell'origine del sistema di riferimento allora $V(x)$ è rappresentato da un potenziale Coulombiano del tipo $-\frac{k}{|x|}$ dove k è una data costante, ovvero $V(x)$ è una funzione definita su $\mathbb{R}^3 \setminus \{0\}$ e in $x = 0$ il suo denominatore si annulla. È però ammissibile, ed in taluni casi è più che opportuno, che l'energia potenziale presenti delle caratteristiche che non possono essere rappresentate da una semplice funzione perché l'effetto del campo di forze sulla particella si realizza in una regione spaziale fortemente localizzata; questi potenziali sono denominati *potenziali singolari*.

La teoria degli operatori lineari con potenziali singolari ha ormai acquisito all'interno dei Metodi Matematici per la Meccanica Quantistica un ruolo ben definito e consolidato. Negli ultimi anni sono uscite ampie monografie su questo settore della ricerca. È doveroso ricordare i contributi di S. Albeverio, F. Gesztesy, R. Hoegh-Krohn, H. Holden e P. Exner [1], S. Albeverio e P. Kurasov [2], M. Belloni e R.W. Robinett [3], Yu.N. Demkov e V.N. Ostrovskii [8]. In questo articolo si cerca di individuare la genesi di questo filone di ricerca e, in modo più specifico, riconoscere l'importante contributo dato dallo scienziato italiano Enrico Fermi.

Nella moderna teoria sugli operatori lineari con potenziale singolare gioca un ruolo importante la *funzione* $\delta(x)$, detta anche δ di Dirac per le ragioni che saranno discusse in seguito⁽¹⁾.

Un primo contributo alla definizione rigorosa dell'operatore Laplaciano perturbato mediante una *funzione* $\delta(x)$ è dovuto a F.A. Berezin e L.D. Faddeev [4]. Nel loro lavoro del 1961 essi prendono in considerazione l'operatore formalmente definito da⁽²⁾

$$(2) \quad H = -\Delta + \alpha\delta(x), \quad \alpha \in \mathbb{R}, \alpha \neq 0,$$

⁽¹⁾ È noto che la $\delta(x)$ non è una funzione in senso stretto, infatti viene definita in modo preciso all'interno della teoria delle distribuzioni, anche se con abuso di linguaggio si conviene di denominarla comunque funzione; seguiremo questa linea con la semplice avvertenza di scrivere il termine "funzione" in corsivo per sottolineare che è un uso improprio del termine.

⁽²⁾ Nel seguito, volendo concentrare l'attenzione sugli aspetti matematici associati al problema (1), per comodità di notazione fissiamo le unità di misura in modo che sia $\hbar = 1$ e $2m = \hbar^2$.

sullo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$ e dove α è un parametro reale che rappresenta l'intensità del potenziale singolare; scopo del loro lavoro era dare una interpretazione rigorosa da un punto di vista matematico all'operatore (2) introdotto dal fisico Zel'dovich in un suo lavoro del 1960 [21] riguardante lo studio dello scattering dovuto ad un potenziale singolare. Quando $\alpha = 0$ l'operatore H si riduce al semplice operatore $-\Delta$ sullo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}^3, dx)$; è ben noto che esso è auto-aggiunto quando il suo dominio coincide con lo spazio di Sobolev $H^{2,2}(\mathbb{R}^3)$. La determinazione dell'estensione auto-aggiunta di un dato operatore è fondamentale perché le grandezze fisiche osservabili sono associate a operatori auto-aggiunti, e l'operatore formalmente definito dalla (2) è appunto l'operatore lineare associato all'osservabile energia. Nel determinare l'estensione auto-aggiunta di un operatore occorre anzitutto definirlo su un dominio densamente definito, provare che è simmetrico e chiuso su questo dominio e poi calcolarne gli indici di difetto (come definiti in Appendice § A). A partire da questo risultato è possibile stabilire se esso ammette o non ammette una o più estensioni auto-aggiunte e, in caso affermativo, determinarne il dominio. Definendo l'operatore H per $\alpha \neq 0$ su un opportuno dominio si dimostra che esso è chiuso e simmetrico e che ha indici di difetto (1,1); di conseguenza è possibile applicare la teoria generale di estensione di operatori lineari richiamata nell'Appendice A ottenendo l'estensione auto-aggiunta di H .

Per modelli uni-dimensionali la definizione dell'estensione auto-aggiunta dell'operatore con potenziale singolare formalmente definito sullo spazio di Hilbert $L^2(\mathbb{R}, dx)$ come

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + \alpha\delta(x), \quad \alpha \in \mathbb{R},$$

ammette espressione esplicita semplice [22]. Anche in questo caso l'operatore H , definito sul dominio delle funzioni di classe $H^{2,2}(\mathbb{R})$ che si annullano nel punto di coordinate $x = 0$, dove la *funzione* $\delta(x)$ ha "supporto", è chiuso e simmetrico e ha indice di difetto (1,1); le sue estensioni auto-aggiunte sono, per $\alpha \in \mathbb{R}$, definite dall'operatore di derivazione $-\frac{d^2}{dx^2}$ sul dominio costituito dalle funzioni $\psi(x)$

appartenenti allo spazio $H^{2,2}(\mathbb{R} \setminus \{0\}) \cap H^{2,1}(\mathbb{R})$ e con condizioni di raccordo in $x = 0$ della forma

$$(3) \quad \lim_{x \rightarrow 0^+} \psi(x) = \lim_{x \rightarrow 0^-} \psi(x) \text{ e} \\ \lim_{x \rightarrow 0^+} \psi'(x) - \lim_{x \rightarrow 0^-} \psi'(x) = \alpha \lim_{x \rightarrow 0^+} \psi(x), \quad \alpha \in \mathbb{R}.$$

Ovvero la funzione $\psi(x)$ appartenente al dominio dell'operatore H viene definita separatamente sulle semirette $(-\infty, 0)$ e $(0, +\infty)$; in $x = 0$, dove la funzione $\delta(x)$ ha "supporto", si richiede la proprietà di continuità mentre la sua derivata prima presenta una discontinuità. Le ragioni delle condizioni di raccordo (3) sono abbastanza semplici e la loro giustificazione è demandata all'appendice § B.

Scopo del presente lavoro è analizzare quale è stato il percorso storico che ha portato all'introduzione della funzione $\delta(x)$ nell'ambito della Meccanica Quantistica e in particolare nella teoria degli operatori lineari con potenziale singolare.

2. – La funzione $\delta(x)$ prima di P.A.M. Dirac

Nella teoria delle distribuzioni, come ora la conosciamo a partire dai lavori di Sobolev e di Schwartz, la funzione $\delta(x)$ è ben definita. Occorre però ricordare che questo strumento matematico era già stato definito ed utilizzato anche in precedenza; in particolare si fa riferimento ai contributi di Cauchy, Fourier, Helmholtz, Kirchoff e infine Heaviside. Rimandiamo al libro di J. Lützen, [16] intitolato "The prehistory of the theory of distributions" per una descrizione più esaustiva, e ci limitiamo qui a ricordare i contributi principali antecedenti i lavori di Dirac.

Un primo contributo alla definizione della funzione $\delta(x)$ è attribuito al lavoro di Fourier [12] del 1822 dal titolo "Théorie Analytique de la Chaleur", Fourier definisce la funzione $\delta(x)$ attraverso la serie formale

$$(4) \quad \delta(x) = \frac{1}{\pi} \left[\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^{\infty} \cos(nx) \right],$$

ed è caratterizzata dalla proprietà che per ogni $f(x)$

$$f(x) = \int_{-\pi}^{+\pi} \delta(x-y) f(y) dy, \text{ per } x \in [-\pi, +\pi],$$

dove l'integrale è calcolato mediante integrazione per serie

$$f(x) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{+\pi} f(y) \left[\frac{1}{2} + \sum_{n=1}^N \cos[n(x-y)] \right] dy.$$

Un approccio diverso è attribuito a O. Heaviside [13, 14]; egli tratta la funzione $\delta(x)$ nell'articolo "On operators in physical mathematics" del 1893 e nei volumi "Electromagnetic theory" del 1899 e del 1912. Nei suoi lavori Heaviside definisce la funzione $\delta(x)$ come derivata della funzione $\Theta(x)$, detta oggi funzione di Heaviside e definita nel seguente modo

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } x < 0 \\ 1 & \text{se } x \geq 0 \end{cases},$$

osservando che la funzione così ottenuta è nulla ovunque tranne che in $x = 0$, dove assume valore infinito, e che il suo integrale ha valore 1. Heaviside nelle sue opere considera anche le derivate della funzione $\delta(x)$.

Si può concludere che a cavallo tra il XIX ed il XX secolo la funzione $\delta(x)$ aveva già avuto diverse definizioni: sia attraverso una serie (o una successione) di funzioni, sia mediante la derivata di una funzione discontinua; ed è utilizzata in diversi contesti applicativi. A testimonianza della relativa diffusione della funzione $\delta(x)$ possiamo infine ricordare che negli anni '20 del secolo scorso essa era utilizzata anche nell'ambito della teoria della trasformata di Fourier. La troviamo infatti nella raccolta delle trasformate dal titolo "Fourier Integrals for Practical Applications" pubblicate per la American Telephone and Telegraph Company da G.A. Campbell e R.M. Foster nel 1931 [7]. Gli autori introducono una funzione denominata funzione impulso denotata con il simbolo speciale $S_0(x)$ e caratterizzata dalla proprietà di essere ovunque nulla pur avendo area sottesa unitaria. Successivamente estendono tale definizione alla funzione da essi denominata "vth singularity function" e definita attraverso il limite (senza specificare in quale spazio)

$$S_v(x) = \lim_{a \rightarrow \infty} a \frac{d^v}{dx^v} e^{-\pi a^2 x^2}.$$

Per $\nu = 0$ questa è la *funzione* $\delta(x)$ purché il limite si intenda in modo opportuno. Non solo, gli autori riconoscono in S_0 la trasformata di Fourier della funzione costante definita tramite il limite⁽³⁾
 $1 = \lim_{\beta \rightarrow 0} e^{-\beta|x|}$.

3. – P.A.M. Dirac e la δ di Dirac

All'interno della teoria delle matrici di Heisenberg, che è un approccio alternativo all'equazione di Schrödinger per lo studio della dinamica quantistica di un sistema, il fisico inglese P.A.M. Dirac nel 1926 pone il problema di estendere l'operazione di prodotto tra matrici al caso in cui gli indici di queste non sono una successione, finita o numerabile, di valori discreti ma variano su intervalli continui. Nel suo lavoro [9] dal titolo "The physical interpretation of quantum dynamics", sottomesso alla rivista dei Proceedings of the Royal Society nel 1926 e ivi pubblicato nel 1927, Dirac considera, facendo uso della sua notazione, due matrici $\mathcal{A}(x; z)$ e $\mathcal{B}(z; y)$ dipendenti dai parametri $x = (x_1, \dots, x_u)$, $y = (y_1, \dots, y_u)$ e $z = (z_1, \dots, z_u)$ dove z rappresenta un multi-indice variabile in un intervallo continuo. Definisce quindi il prodotto \mathcal{AB} nel seguente modo

"The matrix law of multiplication will now read

$$(\mathcal{AB})(x, y) = \int \mathcal{A}(x, z) dz \mathcal{B}(z, y)$$

where dz means dz_1, dz_2, \dots, dz_u , and the range of integration is over all the values of the z 's that label rows and columns of the matrices."

e osserva che

"One cannot go far in the development of the theory of matrices with continuous ranges of rows and columns without needing a notation for that function of a c -number x that is equal to zero except when x is very small, and whose integral through a range that contains the point $x = 0$ is equal to unity."

⁽³⁾ Dove, a rigore, il limite deve intendersi come limite destro.

Pertanto Dirac introduce una tale funzione, denotandola con il simbolo $\delta(x)$, e caratterizzandola con le proprietà

$$(5) \quad \delta(x) = 0 \text{ quando } x \neq 0$$

e

$$(6) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1.$$

Inoltre riconosce che non si tratta di una funzione in senso stretto e più precisamente afferma che:

"Strictly, of course, $\delta(x)$ is not a proper function of x , but can be regarded only as a limit of a certain sequence of functions"

anche se poi non si sofferma ad esemplificare quali successioni di funzioni potevano avere, nel limite, la $\delta(x)$. D'altra parte abbiamo già visto che nei lavori di Fourier la *funzione* $\delta(x)$ era definita attraverso un processo di limite, e questo concetto era già ben consolidato, tanto da essere riportato in tabelle di funzioni integrali per applicazioni nel campo dell'ingegneria delle telecomunicazioni.

Successivamente Dirac, nel suo testo [10] del 1930 dal titolo "The Principles of Quantum Mechanics" dove dedica una intera sezione alla *funzione* $\delta(x)$, riprende in modo più sistematico la trattazione della *funzione* $\delta(x)$ suggerendo anche di definirla, in modo alternativo, come derivata della funzione di Heaviside (senza però citarlo). Pur riconoscendo che la $\delta(x)$ non è propriamente una funzione, Dirac ammette la possibilità di trattarla da un punto di vista operativo come una funzione vera e propria arrivando anche a considerarne le derivate, anche se queste risultano essere ancora più singolari. Successivamente Dirac enuclea un elenco delle proprietà elementari della *funzione* $\delta(x)$ arrivando infine a scrivere la relazione fondamentale valida per ogni funzione $f(x)$ sufficientemente regolare

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \delta^{(n)}(a - x) dx = f^{(n)}(a)$$

e a raccogliere in modo sistematico le proprietà fondamentali:

$$\delta(-x) = \delta(x)$$

$$x\delta(x) = 0$$

$$\delta(ax) = a^{-1}\delta(x) \quad (a > 0)$$

$$\delta(x^2 - a^2) = \frac{1}{2}a^{-1}[\delta(x - a) + \delta(x + a)] \quad (a > 0)$$

$$\int \delta(a - x)\delta(x - b)dx = \delta(a - b)$$

$$f(x)\delta(x - a) = f(a)\delta(x - a).$$

In conclusione possiamo affermare che nel 1926, e poi riprendendo tali concetti nel 1930 in modo più sistematico, Dirac introduce l'uso della *funzione* $\delta(x)$ nell'ambito della Meccanica Quantistica come estensione nel calcolo matriciale al caso continuo della già nota δ di Kronecker. A seguito dell'affermazione e del successo delle teorie di Dirac e della diffusione dei suoi lavori, egli fu insignito nel 1933 insieme a E. Schrödinger del premio Nobel per la Fisica, la *funzione* $\delta(x)$ viene in seguito spesso denominata δ di Dirac, non solo nell'ambito della Meccanica Quantistica.

4. – Contributo di R. de L. Kronig e W.G. Penney

Il primo lavoro nel quale la *funzione* $\delta(x)$ viene introdotta, anche se in modo indiretto, come termine di potenziale risale al 1931: è l'articolo di R. de L. Kronig e W.G. Penney dal titolo "Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices" pubblicato sui Proceedings of the Royal Society [15]. In questo articolo i due autori riprendono i risultati di Bloch [5]; l'idea principale della teoria di Bloch è l'assunzione che l'interazione di un elettrone con le altre particelle del cristallo possa essere modellizzata, in prima approssimazione, mediante un campo di forze periodico nello spazio. Nel loro lavoro, Kronig e Penney, considerano un modello molto elementare di potenziale periodico in modo da rendere i risultati matematici i più semplici possibili senza però alterare in modo essenziale le caratteristiche fisiche.

Nel semplice modello uni-dimensionale considerato da Kronig e Penney l'equazione di Schrödinger indipendente dal tempo prende la seguente forma

$$(7) \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} + \kappa^2[W - V(x)]\psi = 0, \quad \kappa^2 = \frac{8\pi^2m}{h^2},$$

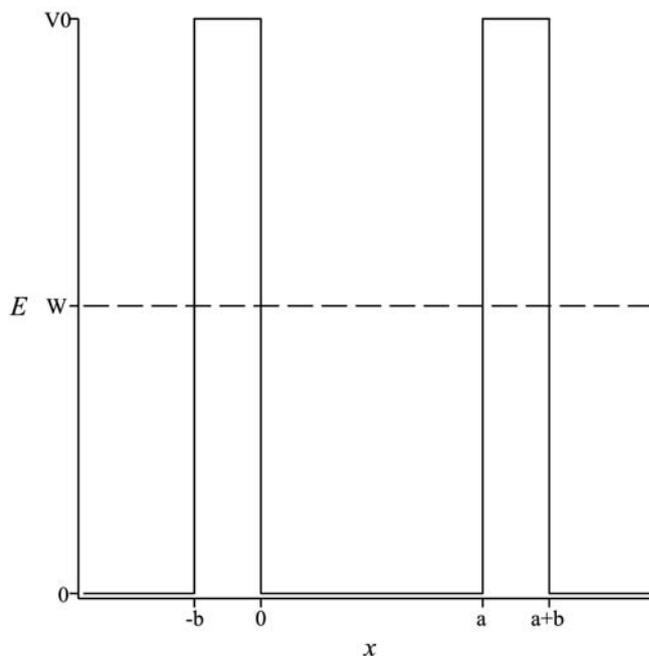


FIGURA 1 – Il grafico del potenziale, costante a tratti, considerato nel modello di Kronig e Penney; gli autori studiano le funzioni di banda nel limite simultaneo $V_0 \rightarrow \infty$ e $b \rightarrow 0$ tale che $bV_0 \rightarrow \beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$.

dove m è la massa dell'elettrone e h la costante di Planck. Il potenziale periodico V considerato è una funzione costante a tratti (vedi Figura 1) di periodo $a + b$ definita come segue all'interno dell'intervallo $[0, a + b)$:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{se } 0 \leq x < a \\ V_0 & \text{se } a \leq x < a + b \end{cases}.$$

È il classico potenziale costante a tratti.

Una volta impostata la teoria di Bloch i due autori considerano il limite simultaneo

$$(8) \quad b \rightarrow 0 \text{ e } V_0 \rightarrow \infty \text{ tale che } bV_0 \rightarrow \beta \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$$

ottenendo una espressione semplice, sebbene in forma implicita, delle funzioni di banda ⁽⁴⁾. Di fatto

⁽⁴⁾ Se l'energia potenziale $V(x)$ è una funzione periodica allora il problema (7) non ammette autovalori W associati ad autovettori $\psi(x) \in L^2(\mathbb{R}, dx)$. Ciò non sta a significare che lo spettro dell'operatore associato sia vuoto, semplicemente significa che esso non ammette autovalori. In realtà lo spettro è formato da intervalli chiusi, detti *bande*, associati a funzioni $W(k)$, dette *funzioni di banda* dipendenti dalla variabile $k \in \mathbb{R}$, tali per cui la soluzione $\psi(x)$ del problema (7) non deve essere quadrato sommabile, bensì della forma $\psi(x) = e^{ikx}u(x)$ dove $u(x)$ è una funzione periodica avente lo stesso periodo dell'energia potenziale $V(x)$ (Cap. XIII.16 [17]).

Kronig e Penney considerano nel loro lavoro del 1931, pur senza dichiararlo esplicitamente, il problema del calcolo delle funzioni di banda per un modello uni-dimensionale con potenziale periodico ottenuto mediante una serie di *funzioni* $\delta(x)$; ovvero il potenziale $V(x)$ nel limite (8) assume la forma

$$(9) \quad V(x) = \beta\kappa^2 \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta[x - a - n(a + b)].$$

Non ci è noto se gli autori erano, all'epoca della pubblicazione del loro articolo, a conoscenza dell'esistenza della *funzione* $\delta(x)$ o se erano a conoscenza dei lavori di Dirac sulla *funzione* $\delta(x)$. Certo è il fatto che nel loro articolo, pubblicato nel 1931 ma sottomesso alla rivista il 13 Novembre 1930, non menzionano la *funzione* $\delta(x)$ in modo esplicito e non citano il lavoro di Dirac del 1926 e nemmeno il suo libro del 1930, che peraltro esce quasi simultaneamente con la stesura dell'articolo di Kronig e Penney. Inoltre occorre ricordare che Dirac introdusse la *funzione* $\delta(x)$ non attraverso un processo di limite, nel senso distribuzionale o in altra forma, ma caratterizzandola attraverso le sue proprietà principali (5) e (6) e quindi il collegamento tra il modello introdotto da Kronig e Penney e la *funzione* $\delta(x)$, che è evidente all'interno della teoria delle distribuzioni, non lo poteva essere all'epoca della pubblicazione del lavoro di Kronig e Penney. A supporto di tale ipotesi possiamo citare, a titolo d'esempio, il lavoro di A.H. Wilson del 1931 [20], pubblicato anch'esso sui Proceedings of the Royal Society, dove pure furono pubblicati i lavori di Dirac del 1926 e di Kronig e Penney del 1931, e comunicato da Dirac stesso il 18 Giugno del 1931; in questo articolo viene citato il lavoro di Kronig e Penney ma non si fa cenno al fatto che il potenziale da loro considerato è associato, nel processo di limite, alla *funzione* $\delta(x)$. Anche nell'articolo pubblicato nel 1939 da W. Shockley [18], fisico che fu insignito nel 1956 del premio Nobel per la Fisica per l'invenzione del transistor, si fa riferimento al modello di Kronig e Penney indicandolo semplicemente come

“... an idealized one-dimensional crystal in which the atomic fields were represented by square potential wells...”.

Insomma, il collegamento alla *funzione* $\delta(x)$ non viene all'epoca riconosciuto.

5. – Enrico Fermi e la *funzione* $\delta(x)$

Prima di analizzare il contributo di Enrico Fermi soffermiamoci a considerare lo stato delle conoscenze all'epoca sulla *funzione* $\delta(x)$. Come abbiamo appena illustrato tale funzione era già ampiamente in uso in alcuni contesti ed i lavori e, soprattutto, il libro del 1930 di Dirac certamente sono noti a Fermi negli anni '30 del secolo scorso. Non solo, dall'analisi delle sue note di lavoro emerge che Fermi stesso utilizzava la *funzione* $\delta(x)$ dimostrando di saperne calcolare la trasformata ed antistrasformata di Fourier (Domus Galileiana, Fondo Fermi, N4, pg. 37) e la sua derivata prima (Domus Galileiana, Fondo Fermi, Notebook5, pg. 44). Ciò premesso, analizziamo ora in quale modo Fermi introduce la *funzione* $\delta(x)$ come potenziale singolare. Il contributo di Fermi all'introduzione della *funzione* $\delta(x)$ nell'ambito della Meccanica Quantistica risale al lavoro in italiano del 1936 dal titolo “Sul moto dei neutroni nelle sostanze idrogenate”, pubblicato sulla rivista “Ricerca Scientifica” [11]. In questo lavoro Fermi propone di discutere, dal punto di vista teorico, alcune proprietà dei neutroni lenti e nella sua analisi utilizza la *funzione* $\delta(x)$ in due parti.

Nella sezione dell'articolo [11] dedicata allo studio dei neutroni termici l'autore considera il moto di neutroni proiettati da una sorgente in un ambiente ripieno di una sostanza idrogenata quale la paraffina o l'acqua. Essi subiscono un rapido rallentamento dovuto agli urti con gli atomi di idrogeno. Si distinguono due regimi: una prima fase di rallentamento durante il quale l'energia del neutrone si riduce dal valore iniziale all'energia d'agitazione termica; successivamente si osserva una fase di diffusione termica durante la quale il neutrone mediamente non perde più energia e prosegue il suo moto per diffusione. I neutroni che sono nella seconda fase sono denominati appunto neutroni termici. Nell'analizzare il comportamento di tali neutroni Fermi propone la seguente equazione per la densità $n(x, y, z, t)$ dei neutroni termici

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\lambda v}{3} \Delta n - \frac{1}{\tau} n + q, \quad \tau = \frac{\lambda N}{v},$$

dove λ rappresenta il cammino libero medio dei neutroni termici, v la loro velocità media e N il

numero medio dei cammini liberi percorsi da un neutrone termico prima di essere catturato dall'idrogeno o da qualche altro atomo presente nell'ambiente; la funzione $q(x, y, z, t)$ rappresenta il numero di neutroni termici che si producono per unità di volume e di tempo dal rallentamento dei neutroni veloci.

Applicando questa equazione al caso di un blocco di paraffina confinato nel semispazio $x > 0$ e cercando la probabilità che un neutrone termico, che si trovi inizialmente nella posizione corrispondente a $x = a > 0$, riesca ad uscire dalla paraffina passando attraverso il piano $x = 0$ Fermi riconduce il problema allo studio dell'equazione uni-dimensionale

$$(10) \quad \rho(x) - \frac{\lambda^2 N}{3} \frac{d^2 \rho}{dx^2} = \frac{\lambda N}{v} f(x)$$

dove abbiamo posto ⁽⁵⁾

$$(11) \quad \rho(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} n dy dz \text{ e } f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} q dy dz.$$

La cosa interessante ai fini della nostra indagine è la seguente osservazione di Fermi:

“Nel nostro caso la funzione $f(x)$ è evidentemente nulla per $x \neq a$; mentre per $x = a$ essa è infinita in modo tale che

$$(12) \quad \int f(x) dx = Q$$

quando l'integrale sia esteso a un intervallo contenente a .”

Ovvero Fermi identifica la funzione $f(x)$ con le medesime proprietà della *funzione* $\delta(x)$ (moltiplicata per il fattore Q) come definita da Dirac, senza però menzionarlo in modo esplicito. Non solo, poi osserva che

“Da (10) e (12) risulta poi che nel punto singolare a si ha una discontinuità del valore della

derivata di ρ , mentre la funzione stessa resta continua; si ha precisamente:

$$(13) \quad \lim_{x \rightarrow a^+} \rho(x) = \lim_{x \rightarrow a^-} \rho(x) \text{ e}$$

$$\lim_{x \rightarrow a^+} \left(\frac{d\rho}{dx} \right) - \lim_{x \rightarrow a^-} \left(\frac{d\rho}{dx} \right) = -\frac{3}{v\lambda} Q.”$$

Questo passo è particolarmente rilevante per la nostra indagine perchè testimonia che nel lavoro di Fermi si riconoscono, per la prima volta, condizioni di raccordo molto simili alle condizioni (3) che la teoria moderna associa alla *funzione* $\delta(x)$ quando essa appare come potenziale nell'equazione uni-dimensionale di Schrödinger.

Nella seconda parte del suo articolo Fermi considera il meccanismo d'urto tra neutroni e atomi di idrogeno. In particolare si sofferma sulla questione dell'urto di neutroni contro atomi di idrogeno legati. In questo caso si considera un problema a due corpi: il neutrone e l'atomo d'idrogeno; la funzione d'onda $\psi(x, y, z, X, Y, Z, t)$ dipende sia dalle coordinate x, y, z del neutrone, che dalle coordinate X, Y, Z del protone. In realtà Fermi focalizza la sua attenzione sulla regolarizzazione della funzione d'onda considerandone la media spaziale

$$\bar{\psi}(x, y, z, X, Y, Z, t) = \frac{3}{4\pi R^3} \iiint \psi(\xi, \eta, \zeta, X, Y, Z, t) d\xi d\eta d\zeta,$$

dove l'integrale è esteso alla sfera di raggio R e centro avente coordinate (x, y, z) . Quello che Fermi riesce a trovare è che la funzione $\bar{\psi}$ doveva soddisfare l'equazione tri-dimensionale

$$(14) \quad -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \bar{\psi}}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{8\pi^2 M} \left(\frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial x^2} + \dots + \frac{\partial^2 \bar{\psi}}{\partial X^2} + \dots \right) + U(X, Y, Z) \bar{\psi} - \frac{\hbar^2 a}{\pi M} \delta_R(r) \bar{\psi},$$

dove U rappresenta l'energia potenziale delle forze chimiche esercitate sull'atomo d'idrogeno, a l'ordine di grandezza del raggio d'urto tra neutrone e protone, M il valore comune della massa del protone e del neutrone e r la distanza tra neutrone e protone; dove $\delta_R(r)$ è una funzione uguale a zero se $r > R$ ed altrimenti è uguale a $\frac{3}{4\pi R^3}$ in modo che il suo integrale di volume sia uguale a 1. Quest'ultimo

⁽⁵⁾ In realtà le funzioni ρ ed f dipendono, oltre che dalla variabile spaziale x , anche dal tempo t ; si è però scelto di mettere in evidenza nella notazione la sola dipendenza dalla variabile x in analogia a quanto fatto da Fermi nella formula (25) del lavoro considerato [11].

termine modella l'urto tra neutrone e protone rappresentando l'interazione tra i due corpuscoli. Fermi riconosce che

“... inoltre, nel calcolare gli elementi di matrice del termine di interazione, la funzione δ_R potrà identificarsi con la funzione δ di Dirac (tridimensionale), poiché le grandezze contenute in (14) variano lentamente entro il campo in cui δ_R è diverso da zero.”

Dimostrando in questo modo che era conoscenza della funzione $\delta(x)$ introdotta da Dirac. Con questo modello si utilizza, per la prima volta, la funzione $\delta(x)$ come potenziale singolare in una equazione della Meccanica Quantistica.

6. – Conclusioni

Il lavoro di Fermi del 1936 fu pubblicato in italiano sulla rivista “La Ricerca Scientifica” del Consiglio Nazionale delle Ricerche, e successivamente venne tradotto in lingua inglese da G.M. Temmer. Questo lavoro fu ripreso, tra gli altri, da G. Breit nel 1947 [6] con particolare riguardo alla seconda parte racchiusa tra le formule (71)-(103) di [11]; nel suo lavoro Breit analizza in modo critico il modello proposto da Fermi per lo studio del meccanismo d'urto tra neutroni e protoni e propone delle migliorie all'equazione (14) che vadano oltre alla prima approssimazione dovuta a Fermi; più precisamente, seguendo l'indicazione di Fermi, propone un modello nel quale compare come termine di potenziale la *funzione* $\delta(x)$ e non più la δ_R . Analizzando i lavori successivi gli autori riconoscono a Fermi il merito di avere introdotto la *funzione* $\delta(x)$ come potenziale nell'equazione di Schrödinger; infatti, è solo nel lavoro di Fermi, e successivamente di Breit, che la *funzione* $\delta(x)$ compare esplicitamente come termine di potenziale. Si può quindi affermare che con il lavoro del 1936 di Fermi nasce il capitolo degli operatori di Schrödinger con potenziale singolare.

In realtà si può andare oltre. Si osserva infatti che Enrico Fermi non solo propone l'introduzione di un potenziale singolare ma nel capitolo sui neutroni termici tratta in modo adeguato le condizioni di raccordo nei modelli uni-dimensionali con presenza

del potenziale singolare rappresentato dalla *funzione* $\delta(x)$. Infatti riconosciamo nelle condizioni (13) condizioni di raccordo analoghe alle (3) previste dalla moderna teoria sugli operatori auto-aggiunti richiamata nell'introduzione. Appare singolare che questo contributo non sia stato valorizzato; la spiegazione di ciò può essere legata a diversi motivi. Anzitutto il semplice fatto che Fermi stesso non abbia identificato in modo esplicito il termine $f(x)$ definito nella (11) con la *funzione* $\delta(x)$ è già di per se un elemento che in parte spiega il mancato riconoscimento. Inoltre si può ipotizzare che l'importanza dei risultati minori del lavoro di Fermi del 1936 sia stata almeno in parte messa in ombra dall'interesse per lo studio del fenomeno del processo d'urto tra i neutroni e i protoni; questo argomento, come anche evidenziato da Breit, è stato oggetto di un profondo studio e verosimilmente gli altri temi sviluppati da Fermi nel suo lavoro del 1936 sono stati analizzati in minor misura. Ora, con le nozioni sviluppate nella teoria delle estensioni auto-aggiunte degli operatori lineari con potenziale singolare e con una diversa sensibilità a valorizzare maggiormente i semplici modelli uni-dimensionali al fine di sviluppare in modo più esplicito la trattazione fisico-matematica, si può affermare che il contributo di Enrico Fermi all'introduzione dei potenziali singolari in Meccanica Quantistica debba essere riconosciuto con maggiore ampiezza includendo anche l'introduzione delle condizioni di raccordo (3).

Appendice A. Indici di difetto

In molte applicazioni fisiche è assegnato un operatore simmetrico (detto anche Hermitiano); se questo operatore risulta essere essenzialmente auto-aggiunto, ovvero la sua chiusura è un operatore auto-aggiunto, allora esiste un'unica estensione auto-aggiunta. In caso contrario è opportuno trovare tutte le estensioni auto-aggiunte e classificarle. Un criterio per stabilire se un dato operatore H su uno spazio di Hilbert è essenzialmente auto-aggiunto consiste nel verificare se la seguente relazione viene soddisfatta (dove H^* denota l'operatore aggiunto di H)

$$\text{Ker}(H^* - z) = \text{Ker}(H^* - \bar{z}) = \{0\}$$

per un qualche $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$. Quindi, la proprietà di auto-aggiunzione è strettamente collegata alla dimensione di questi spazi. Introduciamo i seguenti numeri

$$d_{\pm}(H) = \dim [\text{Ker}(H^* \mp i)]$$

detti *indice di difetto*⁽⁶⁾ di H .

Quindi possiamo concludere che se

$$(15) \quad d_+(H) = d_-(H) = 0$$

allora c'è una sola estensione auto-aggiunta di H data dalla sua chiusura. In generale, però, la situazione è più intricata perché i due indici di difetto potrebbero essere diversi tra loro oppure essere identici ma non nulli. È però possibile dimostrare che un operatore simmetrico H ammette estensioni auto-aggiunte se, e solo se, i due indici di difetto sono uguali; ed è possibile costruirle in modo esplicito attraverso la *trasformata di Cayley* [19].

Appendice B. Sulle condizioni di raccordo (3)

Consideriamo l'equazione per la funzione di banda per il modello (7) di Kronig e Penney. La soluzione dell'equazione differenziale viene calcolata separatamente nelle distinte regioni in cui il potenziale è costante, e poi si impongono le cosiddette condizioni di raccordo nei punti di discontinuità del potenziale richiedendo che la soluzione $\psi(x)$, insieme alla sua derivata prima, sia continua. Pertanto la soluzione generale dell'equazione (7), limitatamente all'intervallo $(0, 2a + b)$ ha la forma

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ipx} + Be^{-ipx} & \text{se } 0 < x < a \\ Ce^{qx} + De^{-qx} & \text{se } a < x < a + b \\ Ee^{ipx} + Fe^{-ipx} & \text{se } a + b < x < 2a + b \end{cases},$$

dove abbiamo supposto, per fissare le idee, che $V_0 > W > 0$ e dove abbiamo posto

$$p = \kappa\sqrt{W} \quad e \quad q = \kappa\sqrt{V_0 - W}.$$

⁽⁶⁾ Dove prendiamo, per semplicità, $z = i$; comunque ogni altro numero complesso $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ va altrettanto bene, di fatto gli indici di difetto sono indipendenti dalla scelta del numero complesso z .

Imponendo ora le condizioni di continuità della soluzione ψ e della sua derivata prima in corrispondenza di $x = a$ e $x = a + b$ si ottengono, mediante un semplice calcolo, le seguenti relazioni tra i coefficienti E, F e A, B :

$$\begin{pmatrix} E \\ F \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix},$$

dove M è una matrice quadrata 2×2 avente elementi dipendenti dai parametri. Se ora si considera il limite (8) la matrice di raccordo M prende la forma

$$M = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \frac{12\sqrt{W} - ik\beta}{\sqrt{W}} & -\frac{1}{2} \frac{ik\beta}{\sqrt{W}} e^{-2ik\sqrt{W}a} \\ \frac{1}{2} \frac{ik\beta}{\sqrt{W}} e^{2ik\sqrt{W}a} & \frac{1}{2} \frac{12\sqrt{W} + ik\beta}{\sqrt{W}} \end{pmatrix},$$

che corrisponde esattamente alla matrice di raccordo in prossimità del valore $x = a$ dove il potenziale definito in (9) coincide con una *funzione* $\delta(x)$, ovvero dove devono essere considerate le condizioni di raccordo del tipo (3).

References

- [1] S. ALBEVERIO, F. GESTEZY, R. HOEGH-KRONN, H. HOLDEN, e P. EXNER, *Solvable models in Quantum Mechanics*, AMS Chelsea Publ.: Providence (seconda edizione 2004).
- [2] S. ALBEVERIO, e P. KURASOV, *Singular perturbations of differential operators*, Cambridge University Press: Cambridge (1999).
- [3] M. BELLONI, e R.W. ROBINETT, *The infinite well and Dirac delta function potential as pedagogical, mathematical and physical models in quantum mechanics*, Phys. rep. **540** 25-122 (2014)
- [4] F.A. BEREZIN, e L.D. FADDEEV, *A remark on Schrödinger's equation with a singular potential*, Sov. Math. Dokl. **2** 372-375 (1961).
- [5] F. BLOCH, *Über die Quantenmechanik der Elektronen in Kristallgittern*, Z. Physik **52** 555-600 (1929).
- [6] G. BREIT, *The scattering of slow neutrons by bound protons I. Methods of calculation*, Phys. rev. **71** 215-231 (1947).
- [7] G.A. CAMPBELL, e R.M. FOSTER, *Fourier Integrals for Practical Applications*, American Telephone and Telegraph Company: New York (1931).
- [8] YU.N. DEMKOV, e V.N. OSTROVSKII, *Zero-range potentials and their applications in atomic physics*, Plenum Press: New Yor (1988).
- [9] P.A.M. DIRAC, *The physical interpretation of the quantum dynamics*, Proc. Roy. Soc. A **113** 621-641 (1926).

- [10] P.A.M. DIRAC, *The principles of Quantum Mechanics*, Oxford (1930).
- [11] E. FERMI, *Sul moto dei neutroni nelle sostanze idrogenate*, Ric. Sc. 7 (2), 13-52 (1936).
- [12] J.B.J. FOURIER, *Théorie Analytique de la Chaleur*, Firmin Didot: Paris (1822).
- [13] O. HEAVISIDE, *On operators in physical mathematics*, Proc. Roy. Soc. London 52 504-522 (1893).
- [14] O. HEAVISIDE, *Electromagnetic Theory: Vol. II, Vol. III*, The electrician printing and publishing company: London (1899), (1912).
- [15] R. DE L. KRONIG, e W.G. PENNEY, *Quantum Mechanics of Electrons in Crystal Lattices*, Proc. Roy. Soc. A 130 499-513 (1931).
- [16] J. LÜTZEN, *The prehistory of the theory of distributions*, Springer Verlag: New York (1982).
- [17] M. REED, e B. SIMON, *Methods of Modern Mathematical Physics, IV: Analysis of Operators*, Academic Press: San Diego (1978).
- [18] W. SHOCKLEY, *On the Surface States Associated with a Periodic Potential*, Phys. Rev. 56, 317-323 (1939).
- [19] G. TESCHL, *Mathematical Methods in Quantum Mechanics With Applications to Schrödinger Operators*, Graduate Studies in Mathematics 99, American Mathematical Society: Providence, Rhode Island (2009).
- [20] A. H. WILSON, *The Theory of Electronic Semiconductors*, Proc. Roy. Soc. A, 133 458-491 (1931).
- [21] YA.B. ZEL'DOVICH, *Scattering by a singular potential in perturbation theory and in the momentum representation*, Sov. Phys. JEPT 11 594-597 (1960).
- [22] F. ZIRILLI, *Spectral properties of some one dimensional "singular" Schrödinger Hamiltonian*, Boll. Un. Mat. Ital. B 13 355-368 (1976).



Andrea Sacchetti

Andrea Sacchetti si è laureato in Matematica nel 1987 presso l'Università degli Studi di Modena; dal 2001 è professore ordinario di Fisica Matematica presso il medesimo Ateneo ed è stato ospite per svolgere attività di ricerca presso le Università di Sendai (Sendai, Japan), ed i centri di ricerca I.M.A. (Minneapolis, USA), E.S.I. (Wien, Austria), Centre de Physique Theorique (Luminy/Marseille, France), Newton Institute (Cambridge, UK), I.P.A.M. (Los Angeles, USA), University of Sendai (Sendai, Japan). La sua attività di ricerca principale riguarda i Metodi matematici per la Meccanica Quantistica.