Teoria quantistica in forma idrodinamica[1]

E. Madelung a Francoforte sul Meno

Si mostra che l'equazione di Schrödinger del problema ad un elettrone si può trasformare nella forma di equazioni idrodinamiche.

Secondo Schrödinger[2] la teoria quantistica del problema ad un elettrone è retta dall'"equazione delle ampiezze":

$$\Delta\psi_0 + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(W-U)\psi_0 = 0,\ \psi = \psi_0 e^{\frac{i2\pi W t}{h}}. \tag{1}$$

In essa W indica l'energia del sistema, U l'energia potenziale in funzione della posizione dell'elettrone, m la massa di questo. Si cerca una soluzione che sia ovunque finita e continua. Ciò è possibile solo per certi valori di W. Questi "autovalori" W_i devono essere allora le energie che il sistema possiede nei suoi "stati quantici". È noto che essi si possono constatare spettroscopicamente. La corrispondenza tra teoria ed esperienza parla del tutto a favore dell'utilità del metodo di calcolo così fissato.

Ad ogni autovalore corrisponde una "autosoluzione" che dev'essere normalizzata e dotata del fattore temporale $e^{\frac{i2\pi W t}{h}}$ e che secondo Schrödinger rappresenta quella che vale nel sistema. Schrödinger dà delle prescrizioni per un'interpretazione che in linea di principio è in accordo con quella data nel seguito. Io estenderò questa interpretazione e mostrerò che esistono ampie analogie con l'idrodinamica.

Una seconda equazione, proposta anch'essa da Schrödinger, si ottiene dalla (1) per eliminazione di W con l'inclusione del fattore temporale:

$$\Delta\psi - \frac{8\pi^2 m}{h^2}U\psi - \frac{i4\pi m}{h}\frac{\partial\psi}{\partial t} = 0. \tag{2}$$

Essa contiene come soluzioni quelle della prima equazione, ma a differenza di questa anche tutte le loro combinazioni lineari. Questo è assai importante. Se si pone infatti $\psi = \alpha\exp(i\beta)$, per la (1) solo β può essere considerato dipendere linearmente da t, mentre per la (2) sia α che β possono variare con il tempo. Con $\psi = \alpha\exp(i\beta)$ risulta dalla (2):

$$\Delta\alpha - \alpha(\mathrm{grad}\,\beta)^2 - \frac{8\pi^2 m}{h^2}U + \frac{4\pi m}{h}\alpha\frac{\partial\beta}{\partial t} = 0 \tag{3}$$

e

$$\alpha\Delta\beta + 2(\mathrm{grad}\,\alpha\,\mathrm{grad}\,\beta) - \frac{4\pi m}{h}\frac{\partial\alpha}{\partial t} = 0. \tag{4}$$

Dalla (4) con $\varphi = -\beta h/(2\pi m)$ segue:

$$\mathrm{div}(\alpha^2\,\mathrm{grad}\,\varphi) + \frac{\partial\alpha^2}{\partial t} = 0. \tag{4'}$$

[1] Quantentheorie in hydrodynamischer Form, Zeitschr. f. Phys. **40**, 322-326 (1926).

[2] E. Schrödinger, Ann. d. Phys. **79**, 361, 489; **80**, 437; **81**, 109 (1926).

La (4') ha il carattere di un'equazione di continuità idrodinamica, quando si consideri α^2 come una densità e φ come il potenziale della velocità di una corrente $\mathfrak{u} = \operatorname{grad} \varphi$.

Con questo la (3) dà:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{1}{2}(\operatorname{grad} \varphi)^2 + \frac{U}{m} - \frac{\Delta\alpha}{\alpha}\frac{h}{8\pi^2 m^2} = 0. \tag{3'}$$

Anche questa equazione corrisponde proprio ad un'equazione idrodinamica, cioè a quella di una corrente irrotazionale sotto l'azione di forze conservative[3].

La formazione del gradiente, poichè $\operatorname{rot} \mathfrak{u} = 0$, dà:

$$\frac{\partial \mathfrak{u}}{\partial t} + \frac{1}{2}\operatorname{grad} \mathfrak{u}^2 = \frac{d\mathfrak{u}}{dt} = -\frac{\operatorname{grad} U}{m} + \operatorname{grad} \frac{\Delta\alpha}{\alpha}\frac{h^2}{8\pi^2 m^2}. \tag{3''}$$

$-\operatorname{grad} U/m$ corrisponde alla quantità f/ρ (densità di forza/densità di massa), $(\Delta\alpha/\alpha)(h^2/8\pi^2 m^2)$ alla quantità $-\int dp/\rho$, che si può considerare come funzione forza delle forze "interne" del continuo.

Vediamo quindi che l'equazione (2) si può interpretare interamente in senso idrodinamico, e che una peculiarità compare solo in un termine, che rappresenta il meccanismo interno del continuo.

Nel caso dell'equazione (1) sarà $\partial\alpha/\partial t = 0$ e $\partial\varphi/\partial t = -W/m$. Le autosoluzioni della (1) producono quindi malgrado il fattore temporale la struttura di una corrente stazionaria. Secondo questa interpretazione gli stati quantici si devono considerare come stati di corrente stazionari, nel caso $\operatorname{grad} \beta = 0$ addirittura come strutture statiche.

Le soluzioni dell'equazione più generale (2) si ottengono semplicemente come combinazioni lineari delle autosoluzioni. Poniamo per esempio: $\psi = \alpha \exp(i\beta) = \psi_1 + \psi_2 = c_1\alpha_1 \exp(i\beta_1) + c_2\alpha_2 \exp(i\beta_2)$, dove ψ_1 e ψ_2 siano autosoluzioni della (1) che posseggano i fattori temporali $\exp(i2\pi Wt/h)$; sarà allora:

$$\alpha^2 = c_1^2\alpha_1^2 + c_2^2\alpha_2^2 + 2c_1c_2\alpha_1\alpha_2 \cos(\beta_2 - \beta_1)$$

e

$$\alpha^2 \operatorname{grad} \beta = c_1^2\alpha_1^2 \operatorname{grad} \beta_1 + c_2^2\alpha_2^2 \operatorname{grad} \beta_2 + c_1c_2\alpha_1\alpha_2 \operatorname{grad}(\beta_1 + \beta_2)\cos(\beta_1 - \beta_2),$$

$$\int \alpha^2 dV = c_1^2 \int \alpha_1^2 dV + c_2^2 \int \alpha_2^2 dV,$$

cioè sia la "densità" che la "intensità di corrente" contengono un termine temporale periodico con $\nu = (W_1 - W_2)/h$. La "quantità totale" risulta tuttavia costante.

Nel caso di una corrente stazionaria si trova dalla (3'):

$$W = \frac{m}{2}(\operatorname{grad} \varphi)^2 + U - \frac{\Delta\alpha}{\alpha}\frac{h^2}{8\pi^2 m}, \tag{5}$$

che si può scrivere anche, ponendo: $\alpha^2 = \sigma$, $\sigma m = \rho$, secondo la normalizzazione $\int \sigma dV = 1$:

$$W = \int dV \left\{ \frac{\rho u^2}{2} + \sigma U - \sqrt{\sigma}\Delta(\sqrt{\sigma})\frac{h^2}{8\pi^2 m} \right\}. \tag{5'}$$

[3] Vedi per esempio Weber e Gans, Repertorium d. Physik I, 1, 304.

Questa forma dell'energia come integrale di volume sulla densità d'energia cinetica e potenziale è immediatamente intuitiva.

Non vi è evidentemente alcun motivo perchè questa forma, che si può scrivere anche

$$W = \frac{h}{2\pi} \int dV \alpha^2 \frac{\partial \beta}{\partial t}$$

non debba valere anche nel caso di una corrente non stazionaria. Che la legge di conservazione $dW/dt = 0$ sia soddisfatta lo si stabilisce facilmente tenendo conto dell'ortogonalità delle autosoluzioni.

Interessa ora la domanda: contengono le equazioni (3'), (4') e (5') tutte le caratteristiche richieste, in particolare:

1. l'esistenza discreta di stati di corrente stazionari con le energie W_i,

2. il fatto che tutti gli stati non stazionari possiedono solo periodicità della forma $\nu_{ik} = (W_i - W_k)/h$?

Evidentemente la (2) discende univocamente dalle (3') e (4'), d'altra parte la (1) lo fa da queste con la (5'). Le equazioni idrodinamiche sono quindi equivalenti a quelle di Schrödinger e danno tutto ciò che danno quelle, cioè sono sufficienti a rappresentare in modo modellistico i momenti essenziali della teoria quantistica dell'atomo.

Se il presente problema quantistico appare risolto mediante un'idrodinamica dell'elettricità distribuita con continuità con una densità di massa proporzionale alla densità di carica, rimane tuttavia una serie di difficoltà. Da un lato la densità di massa non è del tipo che ci si aspetterebbe dall'elettrodinamica, dall'altro ci si dovrebbe aspettare che la reazione di una parte dell'elettrone su un'altra, che sarebbe rappresentata dal termine $\sqrt{\sigma}\Delta(\sqrt{\sigma})h^2/(8\pi^2 m)$, non dovrebbe dipendere solo dalla densità nella posizione considerata e dalle sue derivate, ma anche dalla distribuzione complessiva della carica. Se queste due aspettazioni possano essere soddisfatte con una pura trasformazione matematica, non ho potuto determinarlo.

Come s'ha da trattare ora il problema a più elettroni? Schrödinger non dà una forma interamente determinata. Egli richiede soltanto che l'energia cinetica vada calcolata come in una rappresentazione del moto nello spazio delle fasi, cioè si deve porre: $T = \Sigma m_i u_i^2/2$ come somma sulle energie cinetiche dei singoli elettroni, come se essi esistessero l'uno accanto all'altro indipendentemente e non costituissero un solo campo di corrente.

Di fatto questa è una possibilità naturale. Dobbiamo solo decidere tra le seguenti alternative:

a) più elettroni confluiscono in una struttura più grande?

b) essi si evitano e si passa dall'uno all'altro con certe condizioni al contorno?

c) essi si compenetrano senza fondersi?

Mi pare che la c) sia la più probabile. La a) porterebbe alle stesse soluzioni del problema ad un elettrone, solo con normalizzazione cambiata, il che porta evidentemente a un risultato falso. La b) è in considerazione delle "orbite profonde" improbabile, ma concepibile.

Secondo la c) si dovrebbero definire in ciascun punto dello spazio più vettori, come pure i corrispondenti potenziali delle velocità. Il continuo avrebbe allora la qualità di uno sciame le cui parti possedessero un libero cammino infinito.

Quale forma si debba attribuire alla funzione U in modo che essa rappresenti l'interazione degli elettroni, e al "termine quantistico" dell'equazione (3'), lo si può decidere dal calcolo coronato da successo di almeno un caso.

Esiste pertanto la speranza di completare la teoria quantistica dell'atomo su questa base. Ma così i processi di radiazione saranno rappresentati solo parzialmente. Appare chiarito che un atomo in uno stato quantico non irraggia, e anche la radiazione delle giuste frequenze è correttamente rappresentata, e senza "salto", bensì con un lento passaggio in uno stato di non stazionarietà, ma molte altre cose, come per esempio il fatto dell'assorbimento di quanti, appaiono del tutto oscure. Ritengo prematuro comunicare delle speculazioni su questo.