NECESSITÀ (O MENO) DELLA PARTE IMMAGINARIA NELL'EQUAZIONE DI SCHRÖDINGER.

Nel febbraio 2019 mi imbattei su Quora nella domanda Perché la parte immaginaria è necessaria nell'equazione di Schrödinger?
Risalii alle fonti, cioè agli scritti di Schrödinger stesso. La risposta che ne ebbi è in certo senso sorprendente.

Vediamo perché.

La cosiddetta "meccanica ondulatoria" ("Wave mechanics") nacque nel 1926 con quattro lavori di E. Schrödinger, che l'autore pubblicò come quattro parti di un unico lavoro, dal titolo "**Quantizzazione come problema agli autovalori**".

Schrödinger stesso raccolse in seguito i quattro lavori (a cui ne unì due), chiarendo nell'introduzione che essi non furono inizialmente intesi come un unico lavoro. Piuttosto, essi seguirono l'uno dall'altro secondo l'evoluzione del pensiero dell'autore. Egli scrive che "***i risultati delle ultime parti erano ignoti all'autore delle prime parti".***

I lavori furono poi pubblicati insieme sulla rivista Annalen der Physik (AdP) nel volume **79** (1926) e furono raccolti in varie edizioni, prima in tedesco, poi in altre lingue. In rete è reperibile, in inglese, la collezione: "*Collected Papers on Wave Mechanics*", Blackie and Sons, 1928, in cui sono aggiunti altri tre lavori oltre ai sei già menzionati (Collected Papers On Wave Mechanics : Schrodinger,e : Free Download, Borrow, and Streaming : Internet Archive).

Qui considererò solo quanto serve per rispondere alla domanda su Quora: **"Perché la parte immaginaria è necessaria nell'equazione di Schrödinger?".** A questo scopo, come si vedrà, bastano essenzialmente due dei quattro lavori.

Nel primo lavoro (I) *egli propose fin dalla prima pagina un'equazione* ***puramente reale****, derivata dall'Equazione di Hamilton-Jacobi, (H-J), che è reale.* Nella forma dell'equazione di Hamilton-Jacobi usata da Schrödinger, la variabile temporale è già separata:

H($q,\frac{\partial S}{\partial q}$) = E (ove $\frac{\partial}{\partial q}$ è una derivata parziale).

E' noto che S, la *funzione principale di Hamilton* dell'equazione di H-J, è la stessa Azione del "*Principio di minima azione*. Tuttavia, egli preferisce introdurre a questo punto la famosa funzione ψ definita dalla formula **S = K log ψ**. L'idea è astuta e fortunata: così facendo, l'equazione H-J diventa

$$H\,[q, \frac{1}{\psi}\frac{\partial \psi}{\partial q})] = E$$

In questo modo, la Hamiltoniana non ha bisogno di diventare un operatore in tutta la sua gloria per agire sulla funzione d'onda, in quanto semplicemente la moltiplica. Inoltre, la ψ è una funzione numerica, in quanto argomento di un logaritmo, e quindi *la sua dimensionalità è assorbita nella K*. Solo più avanti nel lavoro, una volta trovati gli autovalori dell'energia dell'atomo di idrogeno in termini di K (in cui ciò che soprattutto gli importa è la dipendenza $1/n^2$) Schrödinger li confronta con quelli trovati da Bohr con la “vecchia teoria dei quanti” e confermati dall’esperimento, e identifica K con h/2π, la costante di azione di Planck/ Dirac.

Coloro che hanno studiato l’equazione di Schrödinger nella forma a noi nota (con tanto di unità immaginaria) per l’atomo di idrogeno (*la cui soluzione era il principale obiettivo dell’equazione di Schrödinger nel suo primo lavoro*) sanno bene che, una volta separata la variabile temporale, l’equazione si riduce a un’equazione reale. E’ di qui, che parte Schrödinger. Nella separazione della parte angolare ricompare una variabile complessa. In prima battuta, comunque, Schrödinger, che puntava diritto agli autovalori dell’energia, non si curò della parte angolare e ne utilizzò solo gli autovalori, reali, della forma l(l+1). Ottenne quindi l’equazione radiale, nella quale riconobbe l’equazione di Laguerre, reale. Finalmente essa è quella che produce gli autovalori, reali, dell’energia.

La costante immaginaria ***i*** appare nell’articolo originale (I) di Schrödinger, per valori dell’energia positivi, che per questo motivo sono scartati da Schrödinger, che vuole degli autovalori reali, i quali richiedono un’energia negativa.

Nel secondo lavoro (II), Schrödinger dapprima illustra l’analogia tra meccanica e ottica dovuta a Hamilton. Qui non si serve della notazione esponenziale immaginaria per esprimere matematicamente l’onda, *ma si accontenta di onde sinusoidali* (sezione 2.) in cui ν=E/h (come provato da Planck) . Intanto, la costante h/(2π) è introdotta fin dal principio, come risultato del primo lavoro (I). L’articolo è assai verboso, ed esprime le difficoltà incontrate da Schrödinger nella ricerca del significato della funzione ψ, così efficace e così misteriosa. Speculativamente, viene introdotta nella ψ una dipendenza temporale del tipo di exp(+2πiνt), come soluzione di un’equazione delle onde classica in cui compare una derivata seconda della funzione d’onda rispetto al tempo, della forma

$\frac{d^2\psi}{dx^2}$ = (Fattore negativo e costante rispetto al tempo) * ψ

Nella terza sezione di questa parte II, Schrödinger applica la sua equazione ad alcuni problemi, quali l’oscillatore armonico, il rotatore con un asse fisso, il rotatore con asse non fisso, la molecola diatomica, sempre ritrovando i valori trovati sperimentalmente o semi-empiricamente da altri in precedenza, e sempre basandosi sull’equazione in cui la variabile temporale è già stata separata, cioè su un’equazione reale. E’ vero che noi siamo abituati a risolvere il problema del rotatore rigido con un asse fisso per mezzo di esponenziali immaginari, che richiedono automaticamente una periodicità del tipo di 2π, se vogliamo ottenere soluzioni a un sol valore, ma, di nuovo, Schrödinger preferisce ragionare in termini di funzioni trigonometriche, che sono pure soluzioni dell’equazione.

Tra la parte II e la parte III del lavoro centrale sono inseriti due articoli, il primo, con lo scopo di creare un ponte fra “*micro-fisica*” e “*macro-fisica*”, in cui si prende come esempio l’oscillatore armonico; il secondo, in cui si discute l’approccio di Heisenberg, prendendo come spunto ancora l’oscillatore armonico. Vale la pena notare che, nel primo lavoro, Schrödinger scrive la soluzione completa dell’oscillatore armonico quantistico, aderendo alle speculazioni presentate nella Parte II, senza omettere una dipendenza temporale del tipo di exp (2πiνt), ma sempre insistendo che “*come il solito, se ne prende la parte reale*”.

Nella parte III Schrödinger introduce la teoria delle perturbazioni ispirandosi alla meccanica classica, e l’applica all’effetto Stark. Ancora una volta, neppure in questo articolo entrano valori complessi.

Si giunge così alla parte IV, cruciale per dare una risposta alla domanda di Quora. Risolti nella parte II praticamente tutti i problemi da libro di testo per gli stati stazionari, in cui il potenziale V non dipende dal tempo, Schrödinger si preoccupa su come estendere la teoria a casi in cui V dipende dal tempo, come, in particolare, l'interazione di un atomo con la radiazione elettromagnetica. Egli ammette di essersi sinora occupato solo dell'evoluzione temporale di quella che egli chiama **l'ampiezza** dell'onda, non della sua propagazione. Credo che in qualche modo il nome *ampiezza* sia filtrato nel nome *"ampiezza di probabilità*" nell'interpretazione della ψ dovuta principalmente a Max Born. Ad ogni modo per la prima volta e per prima cosa Schrödinger considera seriamente la parte temporale dell'equazione, exp (± 2πi E t/h), speculativamente introdotta nella parte II, di cui, però, ancora una volta gli basta la parte reale. Ma i due segni di E possono dare luogo ciascuno a una diversa equazione reale. *Qui Schrödinger nota che le due equazioni diventano una sola reale, di quarto ordine,* con il curioso risultato che i due segni di E diventano equivalenti.

Percorrendo *a ritroso* il cammino di Schrödinger, vorrei ricordare come un'equazione complessa del tipo della sua, del secondo ordine, sia equivalente a una sola equazione reale del quart'ordine. Partendo dall'equazione di Schrödinger si avrebbe (si noti che d/dt è qui una derivata parziale):

$$\mathrm{i}\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)(\mathrm{Re}\ \psi+\mathrm{i}\ \mathrm{Im}\psi) + H(\mathrm{Re}\ \psi + \mathrm{i}\ \mathrm{Im}\ \psi) =0$$

Che si spezza in:

$$-\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)(\mathrm{Im}\ \psi) = H\ \mathrm{Re}\ \psi,$$

$$\left(\frac{\partial}{\partial t}\right)(\mathrm{Re}\ \psi) = H(\mathrm{Im}\ \psi)$$

Ora si derivi ad esempio la seconda equazione rispetto al tempo. Ne risulta (le derivate rispetto al tempo e allo spazio si possono permutare, *a condizione che V, che compare nella Hamiltoniana H, non dipenda dal tempo*)

$\frac{d^2}{dt^2}\mathrm{Re}\ \psi = H\ (d/dt)\ \mathrm{Im}\ \psi = -\ (H^2)\ \mathrm{Re}\ \psi$, in cui H^2 è un operatore del quarto ordine.

(l'equazione per Reψ dà lo stesso risultato)

A quanto pare, Schrödinger nelle prime tre parti del suo lavoro (che, appunto, erano state scritte ciascuna senza sapere quel che sarebbe venuto in seguito) voleva mantenere la sua trattazione nel campo reale, **ciò che era ed è ancora possibile** finché non si include la dipendenza dal tempo. Tuttavia, si rese conto che appena la dipendenza dal tempo doveva essere introdotta, come era richiesto se una Hamiltoniana dipendente dal tempo entrava nel gioco, *la sua equazione, per restar reale, doveva diventare un'equazione differenziale del quarto ordine.* Una tale equazione non era ignota ai fisici matematici ottocenteschi, corrispondendo all'equazione delle onde non per una membrana, ma per una piastra vibrante. Ma, a quanto pare, era troppo anche per lui. *Solo dopo essersi reso conto di questa necessità, si sarebbe rassegnato a introdurre una funzione d'onda complessa.*

In questo suo approccio, egli aveva seguito diversi illustri matematici, primo tra i quali Cauchy, il quale, nel suo *Cours d'Analyse* (1821), insisteva che lavorare nel campo complesso andava considerato essenzialmente come una proficua stenografia, che lui del resto non disdegnava, per ridurre due equazioni (reali) a una sola (complessa). Penso però che qui il grande matematico non avesse del tutto ragione: l’estensione al campo complesso avrebbe permesso una visione di insieme dell’analisi matematica assai più completa e più profonda. Per penitenza si dovette redimere diventando uno dei fondatori dell’analisi nel campo complesso, insieme al più giovane Riemann.

Quali che siano le ragioni, Schrödinger adottò la forma immaginaria e, per quanto ne so, non parlò più di una forma fin da principio reale. Questa divenne la sua equazione, per sempre, direi, essendo incisa sulla sua lapide nel cimitero di Alpbach.

Dal 1926, da quasi cent’anni, l’equazione di Schrödinger e l’intera meccanica quantistica si basano su operatori e funzioni complesse, che non solo semplificano i calcoli riducendo l’ordine delle equazioni differenziali con cui abbiamo a che a fare, ma ci aiutano anche nella loro interpretazione.

Tuttavia penso che sia utile aver visto come Schrödinger ci sia arrivato: **dal suo punto di vista, la parte immaginaria si era resa necessaria solo perché semplificava o rendeva possibili i calcoli richiesti per estendere la teoria a sistemi con una Hamiltoniana esplicitamente dipendente dal tempo.**