

Introdução dos tradutores

A Física Moderna tem como alicerces principais a Teoria da Relatividade, Restrita e Geral, e a Mecânica Quântica. É comum, ainda que questionável, identificar as datas que marcaram a formulação definitiva das teorias relativistas: 1905 para a Relatividade Restrita e 1915 para a Relatividade Geral. A formulação da Mecânica Quântica parece, à primeira vista, menos definida temporalmente. Ela teria sido construída em uma série de trabalhos realizados, essencialmente, nas três primeiras décadas do século XX. Os artigos publicados por Planck, Bohr, Einstein, Sommerfeld, de Broglie, Kramers, Heisenberg, Born, Jordan, Schrödinger, Dirac, para citar apenas os principais nomes relacionados com a nova teoria, fixaram paulatinamente os fundamentos do que hoje denominamos de Mecânica Quântica. O primeiro artigo desta série de trabalhos foi o de Planck, publicado em 1900, enquanto os últimos dos citados acima foram publicados em 1925/1926. Mesmo com esta dispersão de datas, o ano de 1925 foi decisivo na formulação da teoria quântica na forma que a conhecemos hoje. Isso motivou designar 2025 o *Ano da Mecânica Quântica*, celebrando os 100 anos desta revolução na Física.

De fato, entre os artigos mais significativos na construção da teoria quântica, o trabalho que Werner Heisenberg publicou em 1925 no *Zeitschrift für Physik*, escrito originalmente em alemão, ocupa um lugar especial. Nele, Heisenberg mostra como deve ser analisado um sistema quântico, como se definem os observáveis deste sistema e quais ferramentas matemáticas devem ser usadas. Ele mostra, de forma explícita, em que a análise quântica difere da análise usual, clássica. Assim, o artigo de 1925 de Heisenberg abre as portas para uma formulação mais completa e coerente dessa nova teoria fundamental da natureza que é a Mecânica Quântica. Apresentamos aqui o que pensamos ser a primeira tradução para o português deste trabalho crucial para a construção dos fundamentos da teoria quântica.

Intitulado *Sobre a reinterpretação das relações cinemáticas e mecânicas na teoria quântica* (*Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen* no original), o artigo que Heisenberg escreveu ao retornar de um período de repouso em Helgoland (ilha situada no Mar do Norte, perto da costa alemã), formula alguns dos fundamentos conceituais da teoria quântica estabelecendo, ao mesmo tempo, as bases do cálculo matricial e a noção dos observáveis em um sistema quântico. Pouco depois, Erwin Schrödinger proporia uma formulação alternativa baseada na equação de onda que leva o seu nome. A Mecânica Matricial e a Teoria Ondulatória se revelariam equivalentes, duas formas complementares de abordar o fenômeno quântico. Mas talvez não seja exagerado dizer que a formulação de Heisenberg permite germinar novas noções essenciais para a construção completa da teoria.

Heisenberg, neste artigo de 1925, se debruça sobre o problema de estabelecer quais são os observáveis da teoria quântica, fazendo uma comparação minuciosa entre a descrição clássica da emissão de radiação e como ela deveria ser analisada na teoria quântica correspondente. Ao fazer esta comparação, ele propõe que os cálculos na teoria quântica devem seguir uma forma matricial, como pode ser visto, por exemplo, na equação (20) do artigo. No entanto, o artigo não se limita a propor um procedimento técnico de cálculo: ao estabelecer que quantidades quânticas, ao contrário das correspondentes quantidades clássicas, obedecem a uma álgebra

matricial, ele termina por enfatizar o caráter não comutativo das quantidades usadas no cálculo quântico. É possível conectar este procedimento à álgebra de operadores no espaço de Hilbert e, como consequência, ao que chamamos hoje de *princípio da incerteza*. Ao contrário da mecânica clássica, Heisenberg enfatiza que a teoria quântica não se alicerça na determinação da posição e velocidade, e sim nas transições entre estados estacionários e a consequente emissão de fótons com energias bem definidas. A mecânica matricial proposta por Heisenberg abriria as portas à identificação do espaço de Hilbert como a estrutura básica da Mecânica Quântica, estrutura organizada através de operadores, autofunções, autovalores, tudo isto aliado ao conceito de observável do sistema quântico.

Aproximadamente 10 anos antes da publicação do artigo de Heisenberg, Bohr tinha formulado um modelo para o átomo de Hidrogênio que explicava as linhas espectrais discretas detectadas para este átomo. Bohr usa um modelo clássico para o elétron girando em torno do próton, adicionando uma regra de quantização para o momento angular que não tem contrapartida clássica. Os resultados obtidos por Bohr são impressionantes, mas parecem surgir de uma combinação de conceitos puramente clássicos aos quais se adiciona uma condição de discretização. Heisenberg, no entanto, afirma no artigo de 1925, que o sucesso do modelo de Bohr para o átomo de hidrogênio foi “fortuito”: embora o modelo de Bohr tenha conduzido ao espectro conhecido, ele não admite uma generalização para outros átomos mais complexos que seja aceitável e condizente com as medidas experimentais. É preciso, então, identificar quais seriam os alicerces fundamentais da teoria quântica, definir os seus observáveis, mostrar como se calculam estes observáveis para se ter uma teoria quântica consistente e completa que se aplique a todos os sistemas físicos. Heisenberg, ao fazer isto, constrói o cálculo matricial e chama a atenção de que os observáveis clássicos não são, necessariamente, os mesmos que os observáveis quânticos.

Dois exemplos de cálculo quântico são tratados nesse texto: o do oscilador anarmônico e o problema do rotor. Heisenberg se restringe a exemplos formulados em uma única dimensão. Uma comparação detalhada é feita entre o cômputo quântico e o correspondente cálculo clássico. Enquanto a descrição quântica para a variável $x(t)$ soa relativamente direta, ele mostra todas as sutilezas que envolvem o cálculo de quantidades como $x(t)^2$. É interessante que Heisenberg tenha se concentrado no oscilador anarmônico em vez do, mais simples, oscilador harmônico. No entanto, ao incluir termos como $x(t)^3$ na expressão do oscilador, ele reforça os aspectos tipicamente quânticos, tanto do ponto de vista conceitual quanto técnico.

É notório que este não é um artigo fácil de se ler. Claro, a forma de escrever um artigo há cem anos atrás era bem diferente da de hoje, tanto pelo estilo quanto pela notação (que mantemos, na tradução, conforme está no original). Mas, Heisenberg não detalha como chegou a algumas conclusões. Isto motivou tentativas mais recentes de “decifrar” certas afirmações.¹ Curiosamente, os cálculos apresentados não requerem uma matemática sofisticada; essencialmente envolvem

¹Ver, por exemplo, o artigo *Understanding Heisenberg’s magical paper of July 1925: a new look at the calculational details*, I.J.R. Aitchison, D.A. MacManus e T.M. Snyder, [arXiv:quant-ph/0404009](https://arxiv.org/abs/quant-ph/0404009).

decomposição de Fourier e produto de matrizes. Mas, os aspectos conceituais são sutis. Em alguns momentos, as motivações para certos saltos conceituais não parecem claras. Isto levou Steven Weinberg, prêmio Nobel de Física, a expressar sua dificuldade em compreender o artigo.² No entanto, a leitura deste texto elucida o que motivou Heisenberg a propor quais seriam os observáveis na teoria quântica e a não comutação de grandezas como posição e momento, o que leva à necessidade de uma estrutura matemática que comporte estes aspectos das variáveis quânticas, tendo como uma das consequências implícitas o Princípio da Incerteza (que Landau consideraria como o elemento central da Mecânica Quântica ³).

A leitura deste texto, que procuramos tornar agora acessível em língua portuguesa, permanece, apesar das suas dificuldades, central para a compreensão do processo de construção da teoria quântica.

Júlio C. Fabris
Oliver F. Piattella

²S. Weinberg, **Dreams of a Final Theory** (New York, Pantheon, 1992).

³L.L. Landau e E.M. Lifshitz, **Mécanique Quantique**, Editions Mir, Moscou (1967)

Sobre a reinterpretação das relações cinemáticas e mecânicas na teoria quântica[§]

Por **W. Heisenberg** em Gotinga

(Recebido em 29 Julho 1925)

Resumo

Neste trabalho, tenta-se estabelecer os fundamentos para uma Mecânica Quântica que se baseia exclusivamente em relações entre quantidades que são, em princípio, observáveis.

Sabe-se que pode-se levantar a séria objeção que as regras formais geralmente empregadas na teoria quântica para o cálculo de grandezas observáveis (por exemplo, a energia no átomo de hidrogênio) são essencialmente relações constitutivas entre grandezas que não podem ser, em princípio, observadas (como, por exemplo, a posição ou o período orbital do elétron). Portanto, essas regras obviamente carecem de qualquer claro fundamento físico, a não ser que se queira sempre manter a esperança de que essas grandezas, até agora inobserváveis, possam talvez se tornar experimentalmente acessíveis no futuro. Essa esperança poderia ser considerada justificada se as regras acima mencionadas fossem intrinsecamente consistentes e utilizáveis num determinado domínio de problemas da teoria quântica. No entanto, a experiência mostra que apenas o átomo de hidrogênio e o efeito Stark desse átomo obedecem a essas regras formais da teoria quântica, mas que dificuldades fundamentais já aparecem no problema dos *campos cruzados* (átomos de hidrogênio em campos elétricos e magnéticos de diferentes direções), sendo que a resposta do átomo a campos que variam periodicamente certamente não pode ser descrita pelas regras mencionadas e que, em última análise, uma extensão das regras quânticas ao tratamento de átomos com muitos elétrons tem-se mostrado impossível. Tem-se tornado comum atribuir esse fracasso das regras da teoria quântica a um destoamento da mecânica clássica, já que essas regras são essencialmente caracterizadas pelo uso da mecânica clássica. Essa caracterização tem, no entanto, pouco significado quando se percebe que a condição de frequência de Einstein-Bohr (que é válida em todos os casos)^a já representa um afastamento tão completo da mecânica clássica, ou melhor (usando o ponto de vista da teoria ondulatória) da cinemática

[§]Título original: *Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen..* Publicado em: *Zeitschrift für Physik, Zeit.* **33** (1925), 879-893. Traduzido por Júlio C. Fabris e Oliver F. Piattella.

^a $\Delta E = h\nu$: essa é a relação entre a energia carregada por um fóton e a frequência do mesmo, $\Delta E = h\nu$.

subjacente a essa mecânica, que mesmo para os problemas da teoria quântica mais simples a validade da mecânica clássica simplesmente não pode ser mantida. Nessa situação, parece sensato descartar toda esperança de observar grandezas até hoje inobserváveis, como a posição e o período do elétron, e admitir que a concordância parcial das regras quânticas com a experiência é mais ou menos fortuita. Em alternativa, parece mais razoável tentar estabelecer uma mecânica quântica teórica, análoga à mecânica clássica, mas na qual ocorrem apenas relações entre grandezas observáveis. Pode-se considerar juntamente à condição de frequência a teoria da dispersão de Kramers¹ e trabalhos de extensão dessa teoria,² como os primeiros passos mais importantes em direção a uma mecânica quântica teórica. Neste artigo, buscaremos estabelecer algumas novas relações da mecânica quântica e aplicá-las ao tratamento detalhado de alguns problemas especiais. Nos restringiremos a problemas que envolvam um grau de liberdade.

§ 1. Na teoria clássica, a radiação de um elétron em movimento (na zona de onda, ou seja, $\mathfrak{E} \sim \mathfrak{H} \sim \frac{1}{r}$) não é dada somente pelas expressões:^b

$$\mathfrak{E} = \frac{e}{r^3 c^2} [\mathfrak{r}[\mathfrak{r}\dot{\mathfrak{v}}]], \quad (1)$$

$$\mathfrak{H} = \frac{e}{r^2 c^2} [\dot{\mathfrak{v}}\mathfrak{r}], \quad (2)$$

mas aparecem na ordem seguinte outros termos, como por exemplo:

$$\frac{e}{rc^3} \dot{\mathfrak{v}}\mathfrak{v}, \quad (3)$$

que pode ser chamado de “radiação de quadrupolo”, e numa ordem ainda maior, termos, por exemplo, da forma:

$$\frac{e}{rc^4} \dot{\mathfrak{v}}\mathfrak{v}^2; \quad (4)$$

Assim, a aproximação pode ser estendida arbitrariamente. (Aqui $\mathfrak{E}$, $\mathfrak{H}$ representam as intensidades dos campos em um dado ponto no espaço, e é a carga do elétron, $\mathfrak{r}$ é a distância do elétron ao ponto considerado, $\mathfrak{v}$ é a velocidade do elétron.)

Podemos nos perguntar que forma teriam os termos de ordem superior na teoria quântica. Sendo que na teoria clássica tais termos podem ser calculados facilmente quando o movimento do elétron ou a sua representação de Fourier é dada, esperamos algo similar na teoria quântica. Essa questão não tem nada a ver com a eletrodinâmica, mas é de natureza puramente cinemática, e esse ponto parece ser de notável importância; podemos pôr a questão da seguinte forma muito simples: seja dada uma grandeza quântica em lugar da quantidade clássica $x(t)$; qual grandeza quântica tomaria então o lugar de $x(t)$?² Antes de podermos

¹H. v. Kramers, Nature 118, 673, 1924.

²M. Born, ZS. f. Phys. 26, 379, 1924. H.A. Kramers e W. Heisenberg, ZS. f. Phys. 81, 681, 1925. M. Born e P. Jordan, ZS. f. Phys. (em publicação). *NdT: esse último artigo foi publicado em ZS. f. Phys. 34 (1925) 858*

^b*NdT*: temos numerado as equações no presente texto. As parenteses quadras representam o produto vetorial. Os campos $\mathfrak{E}$ e $\mathfrak{H}$ são os campos elétrico e magnético.

responder a essa pergunta, temos que nos lembrar que na teoria quântica não era possível associar a um elétron um ponto no espaço como função do tempo por meio de quantidades observáveis. Porém, também na teoria quântica pode-se associar a um elétron uma emissão de radiação; essa radiação é descrita em primeiro lugar pelas frequências, que aparecem como função de duas variáveis, na teoria quântica na forma:

$$\nu(n, n - \alpha) = \frac{1}{h} \{W(n) - W(n - \alpha)\}, \quad (5)$$

enquanto na teoria clássica na forma:

$$\nu(n, \alpha) = \alpha \nu(n) = \alpha \frac{1}{h} \frac{dW}{dn}. \quad (6)$$

(Aqui é posto $nh = J$, que é uma das constantes canônicas).^c

Como característico para a comparação entre teoria quântica e teoria clássica, com respeito à frequência, pode-se escrever as relações de combinação:

Clássica:

$$\nu(n, \alpha) + \nu(n, \beta) = \nu(n, \alpha + \beta). \quad (7)$$

Quântica:

$$\nu(n, n - \alpha) + \nu(n - \alpha, n - \alpha - \beta) = \nu(n, n - \alpha - \beta), \quad (8)$$

$$\text{ou } \nu(n - \beta, n - \alpha - \beta) + \nu(n, n - \beta) = \nu(n, n - \alpha - \beta). \quad (9)$$

Para a descrição da radiação, são necessárias, além das frequências, as amplitudes; essas podem ser tratadas como vetores complexos (cada um determinado por seis componentes independentes), e descrevem tanto a polarização quanto a fase. As amplitudes também são funções das duas variáveis n e α , de forma tal que a parte correspondente da radiação é dada pelas seguintes expressões:

Quântica:

$$\text{Re} \{ \mathfrak{A}(n, n - \alpha) e^{i\omega(n, n - \alpha)t} \}. \quad (10)$$

Clássica:

$$\text{Re} \{ \mathfrak{A}(n) e^{i\omega(n) \cdot \alpha t} \}. \quad (11)$$

^cNdT. W é a energia do elétron e $nh = J$ seu momento angular. O n é o número quântico principal e o α é outro número inteiro. Na fórmula quântica a frequência emitida é igual a diferença das energias dividida pela constante de Planck. No caso clássico, seguindo a teoria de Bohr, mostra-se que $\nu(n) = (1/h)dW/dn$. O α aqui é sempre um número inteiro, mas representando os harmônicos associados a $\nu(n)$. O programa de Heisenberg é o de usar a relação quântica (5) para expressar a posição do elétron. Note-se que o caso chamado “clássico” por Heisenberg não é propriamente tal, pois tem a presença da constante de Planck, que vem da imposição da relação $J = nh$. Este caso deve ser entendido como “clássico” no sentido que as equações da dinâmica clássica são usadas.

À primeira vista, a fase (contida em $\mathfrak{A}$) parece desprovida de significado físico na teoria quântica, visto que, nesta teoria, as frequências geralmente não são comensuráveis com seus harmônicos. No entanto, veremos em breve que também na teoria quântica a fase tem um significado definido, análogo ao seu significado na teoria clássica.^d Se agora considerarmos uma dada grandeza $x(t)$ na teoria clássica, esta pode ser considerada como representada por um conjunto de grandezas da forma:

$$\mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\cdot\alpha t}, \quad (12)$$

que, dependendo se o movimento é periódico ou não, combinadas em uma soma ou integral, representam $x(t)$:^e

$$x(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\cdot\alpha t}, \quad (13)$$

ou:

$$x(n, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n)e^{i\omega(n)\cdot\alpha t} d\alpha, \quad (14)$$

Uma combinação semelhante das correspondentes quantidades quânticas parece não ser possível sem arbitrariedade, por causa da mesma importância das variáveis n e $n - \alpha$, e, portanto, não faz sentido; no entanto, pode-se facilmente considerar o conjunto de quantidades:

$$\mathfrak{A}(n, n - \alpha)e^{i\omega(n, n - \alpha)t}, \quad (15)$$

como representante a quantidade $x(t)$ e, então, tentar responder à pergunta acima: como a quantidade $x(t)^2$ deve ser representada? A resposta na teoria clássica é, obviamente:

$$\mathfrak{B}_\beta e^{i\omega(n)\beta t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t}, \quad (16)$$

ou:

$$\mathfrak{B}_\beta e^{i\omega(n)\beta t} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}_\alpha \mathfrak{A}_{\beta-\alpha} e^{i\omega(n)(\alpha+\beta-\alpha)t} d\alpha, \quad (17)$$

para que então:

$$x(t)^2 = \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} \mathfrak{B}_\beta(n) e^{i\omega(n)\beta t}, \quad (18)$$

^dNdT: na expressão clássica aparece o sistema ortonormal completo de Fourier $e^{i\omega(n)\cdot\alpha t}$, e, de fato, Heisenberg desenvolve a posição em série de Fourier, ou integral de Fourier. Da fórmula de Larmor então pode-se ver que os coeficientes da expansão, as fases, representam a fração de potência irradiada numa dada frequência, múltiplo do harmônico fundamental $\omega(n)$. No caso quântico uma situação análoga não parece ser possível pois não existem, em geral, n , α , m , β tais que $\omega(n, n - \alpha) = m\omega(n, n - \beta)$. Em outras palavras, não conseguimos construir de forma imediata um sistema ortonormal completo a partir de $\omega(n, n - \alpha)$.

^eNdT: essencialmente, expansões em série ou integral de Fourier, com base no harmônico fundamental $\omega(n)$, calculado da teoria de Bohr, como mencionado da nota de rodapé anterior.

ou:

$$x(t)^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{B}_{\beta}(n) e^{i\omega(n)\beta t} d\beta. \quad (19)$$

Na teoria quântica, parece ser a hipótese mais simples e natural substituir as relações (16) e (17) pelas seguintes:^f

$$\mathfrak{B}(n, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{A}(n - \alpha, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t}, \quad (20)$$

ou:

$$\mathfrak{B}(n, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{A}(n - \alpha, n - \beta) e^{i\omega(n, n - \beta)t} d\alpha; \quad (21)$$

e, de fato, esse tipo de combinação é uma consequência quase forçada pelas regras de combinação de frequência. Ao fazer as suposições (20) e (21), reconhece-se que as fases do $\mathfrak{A}$ da teoria quântica têm tanto significado físico quanto seus análogos clássicos. Somente a origem da coordenada temporal é arbitrária e, portanto, existe um fator de fase comum a todos os $\mathfrak{A}$ que é desprovido de significado físico; porém as fases dos $\mathfrak{A}$ individuais entram de maneira essencial na quantidade $\mathfrak{B}$.³ Uma interpretação geométrica de tais relações de fase da teoria quântica em analogia com as da teoria clássica parece atualmente quase impossível.

Se procurarmos ainda uma representação para a quantidade $x(t)$ ³, encontramos sem dificuldade:

Clássica:

$$\mathfrak{C}(n, \gamma) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}_{\alpha}(n) \mathfrak{A}_{\beta}(n) \mathfrak{A}_{\gamma-\alpha-\beta}(n), \quad (22)$$

Quântica:

$$\mathfrak{C}(n, n - \gamma) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \sum_{\beta=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{A}(n - \alpha, n - \alpha - \beta) \mathfrak{A}(n - \alpha - \beta, n - \gamma), \quad (23)$$

ou as correspondentes expressões integrais.

De maneira semelhante, todas as grandezas da forma $x(t)^n$ podem ser representadas na teoria quântica, e se uma qualquer função $f[x(t)]$ for dada, sempre se pode encontrar a expressão quântica correspondente, desde que a função possa ser expandida como uma série de potências em x . Uma dificuldade significativa surge, no entanto, se considerarmos duas grandezas $x(t)$, $y(t)$, e perguntarmos sobre o produto $x(t)y(t)$. Seja $x(t)$ caracterizado por $\mathfrak{A}$ e $y(t)$ por $\mathfrak{B}$, obtemos as seguintes representações para $x(t)y(t)$:

^f NdT : $\sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{A}(n - \alpha, n - \beta)$ pode ser visto como um produto matricial. Então, no caso quântico, estamos associando à posição uma matriz.

³Veja-se também H. A. Kramers e W. Heisenberg, loc. cit. As fases entram essencialmente nas expressões ali utilizadas para o momento de espalhamento induzido.

Clássica:

$$\mathfrak{C}_\beta(n) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}_\alpha(n) \mathfrak{B}_{\beta-\alpha}(n), \quad (24)$$

Quântica:

$$\mathfrak{C}(n, n - \beta) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \mathfrak{A}(n, n - \alpha) \mathfrak{B}(n - \alpha, n - \beta). \quad (25)$$

Enquanto na teoria clássica $x(t)y(t)$ é sempre igual a $y(t)x(t)$, este não é necessariamente o caso na teoria quântica. Em casos especiais, por exemplo na expressão $x(t) \cdot x(t)^2$, esta dificuldade não surge.^g

Quando, como na questão colocada no início desta seção, trata-se de produtos da forma

$$v(t)\dot{v}(t) \quad (26)$$

então na teoria quântica este produto deve ser substituído por $\frac{v\dot{v}+\dot{v}v}{2}$, para obter que $v\dot{v}$ seja a derivada de $\frac{v^2}{2}$. De forma semelhante, parece sempre possível encontrar expressões naturais para os valores médios quânticos, embora possam ser ainda mais hipotéticas do que as fórmulas (20) e (21).

Além da dificuldade mencionada, fórmulas do tipo (20) e (21) poderiam, de forma bastante geral, ser suficientes para expressar a interação dos elétrons em um átomo em termos das amplitudes características dos elétrons.

§ 2. Após essas considerações, que se referiam à cinemática da teoria quântica, voltamos nossa atenção para o problema dinâmico que visa a determinação de $\mathfrak{A}$, ν , W a partir das forças dadas do sistema. Na teoria apresentada até aqui, esse problema será resolvido em duas etapas:

1. Integração da equação de movimento:

$$\ddot{x} + f(x) = 0. \quad (27)$$

2. Determinação, no caso de movimento periódico, da constante:

$$\oint pdq = \oint m\dot{x}dx = J(=nh). \quad (28)$$

Se buscarmos construir um formalismo da mecânica quântica correspondente o mais próximo possível ao da mecânica clássica, é muito natural adotar a equação de movimento (27) diretamente na teoria quântica. Neste ponto, no entanto, é necessário - para não se afastar da base sólida fornecida por aquelas quantidades que são, em princípio, observáveis - substituir as grandezas $\ddot{x}$ e $f(x)$ por seus representantes da teoria quântica, conforme apresentado em § 1. Na teoria clássica,

^g*NdT: a não-comutatividade está na base do princípio de indeterminação de Heisenberg, embora os operadores de posição, de fato, comutem.*

é possível obter a solução de (27) primeiramente expressando x como uma série de Fourier ou integral de Fourier com coeficientes (e frequências) indeterminados; por outro lado, em geral, obtemos então um conjunto infinito de equações contendo infinitas incógnitas, ou equações integrais, que podem ser reduzidas a relações recursivas simples para $\mathfrak{A}$ apenas em casos especiais. Na teoria quântica, somos atualmente forçados a adotar este método de resolução da equação (27), uma vez que, como já foi dito, não é possível definir uma função teórica quântica diretamente análoga à função $x(n, t)$.

Consequentemente, a solução teórica quântica de (27) só é possível nos casos mais simples. Antes de considerarmos estes exemplos simples, vamos apresentar uma reinterpretação quântica da determinação, a partir de (28), da constante do movimento periódico. Assumimos que (classicamente) o movimento seja periódico:

$$x = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) e^{i\alpha\omega_n t}; \quad (29)$$

então:

$$m\dot{x} = m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) i\alpha\omega_n e^{i\alpha\omega_n t}, \quad (30)$$

e:

$$\oint m\dot{x}dx = \oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} a_{\alpha}(n) a_{-\alpha}(n) \alpha^2 \omega_n. \quad (31)$$

Como, além disso, $a_{-\alpha}(n) = \overline{a_{\alpha}(n)}$ (pois x é real), segue então:

$$\oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} |a_{\alpha}(n)|^2 \alpha^2 \omega_n. \quad (32)$$

Até agora, esta integral de fase tem sido definida igual a um múltiplo inteiro de h , ou seja, igual a nh ; uma tal condição se encaixa somente muito forçosamente no cálculo dinâmico, e parece arbitrária, segundo o ponto de vista adotado até agora, com respeito ao princípio da correspondência; de fato, segundo esse princípio, os J são determinados como múltiplos de h , a menos de uma constante aditiva e, em lugar da (32), seria mais natural escrever:

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn} \cdot \oint m\dot{x}^2 dt, \quad (33)$$

o que significa:

$$h = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (\alpha\omega_n \cdot |a_{\alpha}|^2). \quad (34)$$

Tal condição, por outro lado, determina então os a_{α} também a menos de uma constante, e na prática essa indeterminação tem dado origem a dificuldades devido à ocorrência de números quânticos semi-inteiros.

Se procurarmos uma relação na teoria quântica que corresponda a (32) e (34) e contendo apenas grandezas observáveis, a não ambiguidade que havia sido perdida é automaticamente restaurada.

Temos que admitir que apenas a equação (34) possui uma reformulação simples na teoria quântica que está relacionada à teoria da dispersão de Kramers:⁴

$$h = 4\pi m \sum_{\alpha=0}^{\infty} \{|a(n, n + \alpha)|^2 \omega(n, n + \alpha) - |a(n, n - \alpha)|^2 \omega(n, n - \alpha)\}; \quad (35)$$

certamente essa relação é suficiente para determinar a de forma não ambígua, uma vez que a constante indeterminada contida nas grandezas a é automaticamente fixada pela condição de que exista um estado fundamental, do qual nenhuma radiação seja emitida.

Seja este estado fundamental denotado por n_0 ; então deve ser para todos os a :

$$a(n_0, n_0 - \alpha) = 0 \quad (\text{para } \alpha > 0). \quad (36)$$

A questão sobre uma quantização com números semi-inteiros ou inteiros não surge em uma mecânica quântica baseada apenas em relações entre grandezas observáveis.

As equações (27) e (35), se solucionáveis, contêm uma determinação completa não apenas de frequências e valores de energia, mas também de probabilidades de transição da teoria quântica. Porém, a verdadeira solução matemática pode ser obtida apenas nos casos mais simples. Em muitos sistemas, por exemplo, o átomo de hidrogênio, uma complicação extraordinária surge porque as soluções correspondem a um movimento que é parcialmente periódico e parcialmente aperiódico. Como consequência dessa propriedade, as séries da teoria quântica (20), (21) e a equação (35) se decompõem em uma soma e uma integral. Do ponto de vista da mecânica quântica, tal decomposição em movimento periódico e aperiódico não pode ser realizada em geral.

No entanto, poderia-se considerar as equações (27) e (35) como uma solução satisfatória, pelo menos em princípio, do problema dinâmico se fosse possível demonstrar que essa solução concorda com (ou, pelo menos, não contradiz) as relações da mecânica quântica que conhecemos atualmente. Deve-se, por exemplo, estabelecer que a introdução de uma pequena perturbação em um problema dinâmico leva a termos adicionais na energia, ou frequência, do tipo encontrado por Kramers e Born, mas não do tipo dado pela teoria clássica. Além disso, deve-se também investigar se a equação (27), na forma da teoria quântica atual, daria, em geral, origem a uma integral de energia $m \frac{\dot{x}^2}{2} + U(x) = \text{constante}$, e se a energia assim derivada satisfaz a condição $\Delta W = h\nu$, em analogia com a condição clássica $\nu = \frac{\partial W}{\partial J}$. Uma resposta geral a essas questões elucidaria as conexões intrínsecas entre investigações anteriores da mecânica quântica e abriria caminho para uma mecânica quântica consistente, baseada exclusivamente em grandezas observáveis. Além de uma conexão geral entre a fórmula de dispersão de Kramers e as equações (27) e (35), podemos responder às questões acima apenas em

⁴Esta relação já foi derivada a partir de considerações de dispersão por W. Kuhn, Zs. Phys. 33 (1925) 408, e W. Thomas, Naturwiss. 13 (1925) 627.

casos muito especiais que podem ser resolvidos por meio de simples relações de recorrência.

Essa conexão geral entre a teoria da dispersão de Kramers e nossas equações (27) e (35) consiste no fato de que a partir da equação (27) (mais precisamente, do análogo da teoria quântica), segue, assim como na teoria clássica, que o elétron oscilante se comporta como um elétron livre quando exposto à luz de frequência muito mais alta do que qualquer frequência própria do sistema. Este resultado também decorre da teoria da dispersão de Kramers se, adicionalmente, levarmos em conta a equação (35). De fato, Kramers encontra, para o momento induzido por uma onda da forma $E \cos 2\pi\nu t$:

$$M = e^2 E \cos 2\pi\nu t \cdot \frac{2}{h} \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left\{ \frac{|a(n, n+\alpha)|^2 \nu(n, n+\alpha)}{\nu^2(n, n+\alpha) - \nu^2} - \frac{|a(n, n-\alpha)|^2 \nu(n, n-\alpha)}{\nu^2(n, n-\alpha) - \nu^2} \right\}, \quad (37)$$

e então, para $\nu \gg \nu(n, n+\alpha)$:

$$M = -\frac{2e^2 E \cos 2\pi\nu t}{\nu^2 \cdot h} \sum_{\alpha=0}^{\infty} \{ |a(n, n+\alpha)|^2 \nu(n, n+\alpha) - |a(n, n-\alpha)|^2 \nu(n, n-\alpha) \}, \quad (38)$$

que, por causa da (35), se torna:

$$M = -\frac{2e^2 E \cos 2\pi\nu t}{\nu^2 4\pi^2 m}. \quad (39)$$

§ 3. Como exemplo muito simples será tratado em seguida o oscilador anarmônico:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^2 = 0. \quad (40)$$

Classicamente, essa equação pode ser satisfeita por meio de uma solução do tipo:

$$x = \lambda a_0 + a_1 \cos \omega t + \lambda a_2 \cos 2\omega t + \lambda^2 a_3 \cos 3\omega t + \dots + \lambda^{\tau-1} a_\tau \cos \tau \omega t, \quad (41)$$

onde os a são uma série de potências em λ que começa com um termo independente de λ . Do ponto de vista quântico, tentamos com uma solução similar e representamos x com termos da forma:

$$\lambda a(n, n); \quad a(n, n-1) \cos \omega(n, n-1)t; \quad \lambda a(n, n-2) \cos \omega(n, n-2)t; \\ \dots a(n, n-\tau) \cos \omega(n, n-\tau)t \dots \quad (42)$$

As fórmulas de recursão para a determinação dos a e ω são (a parte termos de ordem λ) segundo as (16) e (17), ou (20) e (21):

Clássica:

$$\left. \begin{aligned} \omega_0^2 a_0(n) + \frac{a_1^2(n)}{2} &= 0, \\ -\omega^2 + \omega_0^2 &= 0, \\ (-4\omega^2 + \omega_0^2) a_2(n) + \frac{a_1^2}{2} &= 0, \\ (-9\omega^2 + \omega_0^2) a_3(n) + a_1 a_2 &= 0, \\ \dots & \end{aligned} \right\} \quad (43)$$

Quântica:

$$\left. \begin{aligned} \omega_0^2 a_0(n) + \frac{a^2(n+1,n) + a^2(n,n-1)}{4} &= 0, \\ -\omega^2(n, n-1) + \omega_0^2 &= 0, \\ (-\omega^2(n, n-2) + \omega_0^2) a(n, n-2) + \frac{a(n,n-1)a(n-1,n-2)}{2} &= 0, \\ (-\omega^2(n, n-3) + \omega_0^2) a(n, n-3) + \frac{a(n,n-1)a(n-1,n-3)}{2} + \frac{a(n,n-2)a(n-2,n-3)}{2} &= 0, \\ \dots & \end{aligned} \right\} \quad (44)$$

Além destas, vem a condição de quantização:

Clássica ($J = nh$):

$$1 = 2\pi m \frac{d}{dJ} \sum_{\tau=-\infty}^{\infty} \tau^2 \frac{|a_\tau|^2 \omega}{4}. \quad (45)$$

Quântica:

$$h = \pi m \sum_0^{\infty} [|a(n+\tau, n)|^2 \omega(n+\tau, n) - |a(n, n-\tau)|^2 \omega(n, n-\tau)]. \quad (46)$$

Isso resulta, em primeira aproximação, em ambas as teorias, clássica e quântica:

$$a_1^2(n) \text{ ou } a^2(n, n-1) = \frac{(n + \text{constante})h}{\pi m \omega_0}. \quad (47)$$

Na teoria quântica a constante in (47) é determinada da condição de que $a(n_0, n_0 - 1)$ seja zero no estado fundamental. Numerando os n de forma tal que n seja justamente zero no estado fundamental, então $n_0 = 0$, segue que:

$$a^2(n, n-1) = \frac{nh}{\pi m \omega_0}. \quad (48)$$

Das fórmulas de recursão (43) segue então que na teoria clássica (em primeira ordem em λ) a_τ se torna da forma $\varkappa(\tau)n^{\tau/2}$ onde $\varkappa(\tau)$ representa um fator independente de n . Na teoria quântica, das relações (44) obtém-se:

$$a(n, n - \tau) = \varkappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n - \tau)!}}, \quad (49)$$

onde $\varkappa(\tau)$ representa o mesmo fator de proporcionalidade, independente de n . Para grandes valores de n , o valor quântico de a_τ tende naturalmente ao clássico.

Para a energia, parece natural tentar usar a solução clássica:

$$\frac{m\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{3} x^3 = W, \quad (50)$$

que na aproximação usada até aqui é constante também no caso quântico e, de acordo com (44), (47) e (49) possui o valor:

Clássica:

$$W = \frac{n\hbar\omega_0}{2\pi}. \quad (51)$$

Quântica [segundo (20) e (21)]:

$$W = \frac{(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_0}{2\pi}, \quad (52)$$

(a menos de grandezas de ordem λ^2 .)

Então, segundo essa interpretação, já no caso do oscilador harmônico a energia não é representável por meio da mecânica clássica, ou seja, pela (51), mas possui a forma (52).

Os cálculos mais precisos, também nas ordens mais altas em W , a , ω , serão feitos no caso mais simples do oscilador anarmônico do tipo:

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x + \lambda x^3 = 0. \quad (53)$$

Classicamente, pode-se colocar aqui:

$$x = a_1 \cos \omega t + \lambda a_3 \cos 3\omega t + \lambda^2 a_5 \cos 5\omega t + \dots, \quad (54)$$

e, analogamente, tentamos, na teoria quântica, a forma:

$$a(n, n - 1) \cos \omega(n, n - 1)t; \quad \lambda a(n, n - 3) \cos \omega(n, n - 3)t; \quad \dots \quad (55)$$

As quantidades a são novamente séries de potências em λ , cujo primeiro termo, como na (49), possui a forma:

$$a(n, n - \tau) = \varkappa(\tau) \sqrt{\frac{n!}{(n - \tau)!}}, \quad (56)$$

que se obtém da solução das equações correspondentes às (43) e (44).

Efetuada o cálculo de ω e a segundo as (43) e (44) até a ordem λ^2 e λ , obtém-se:

$$\omega(n, n-1) = \omega_0 + \lambda \cdot \frac{3nh}{8\pi\omega_0^2 m} - \lambda^2 \cdot \frac{3h^2}{256\omega_0^5 m^2 \pi^2} (17n^2 + 7) + \dots \quad (57)$$

$$a(n, n-1) = \sqrt{\frac{nh}{\pi\omega_0 m}} \left(1 - \lambda \frac{3nh}{16\pi\omega_0^3 m} + \dots \right). \quad (58)$$

$$a(n, n-3) = \frac{1}{32} \sqrt{\frac{h^3}{\pi^3 \omega_0^7 m^3} n(n-1)(n-2)} \left(1 - \lambda \frac{39(n-1)h}{32\pi\omega_0^3 m} \right). \quad (59)$$

A energia, que é definida como a parte constante de:

$$m \frac{\dot{x}^2}{2} + m\omega_0^2 \frac{x^2}{2} + \frac{m\lambda}{4} x^4, \quad (60)$$

(que as partes periódicas sejam realmente todas nulas, em geral eu não consegui provar, mas esse é o caso para os membros calculados aqui), se torna:

$$W = \frac{(n+1/2)h\omega_0}{2\pi} + \lambda \cdot \frac{3(n^2+n+1/2)h^2}{8 \cdot 4\pi^2 \omega_0^2 \cdot m} - \lambda^2 \cdot \frac{h^3}{512\pi^3 \omega_0^5 m^2} \left(17n^3 + \frac{51}{2}n^2 + \frac{59}{2}n + \frac{21}{2} \right). \quad (61)$$

Pode-se calcular essa energia por meio da abordagem de Kramers-Born, em que se considera o termo $m\lambda x^4/4$ como perturbação do oscilador harmônico. Se obtém assim realmente o mesmo resultado (61), o que me parece ser um notável suporte para as equações da teoria quântica aqui estabelecidas. Além disso, a energia calculada segundo a (61) satisfaz a fórmula (veja-se a (57)):

$$\frac{\omega(n, n-1)}{2\pi} = \frac{1}{h} \cdot [W(n) - W(n-1)], \quad (62)$$

que pode ser considerada uma condição necessária para a possibilidade de uma determinação das probabilidades de transição de acordo com as equações (27) e (35).

Concluindo, consideramos o caso de um rotor e chamamos a atenção para a relação das equações (20), (21) com as fórmulas de intensidade para o efeito Zeeman⁵ e para multipletos.⁶

Considere o rotor representado por um elétron que orbita um núcleo com distância constante a . Tanto classicamente quanto quanticamente, as equações de movimento simplesmente afirmam que o elétron descreve uma rotação plana e uniforme a uma distância a e com velocidade angular ω em torno do núcleo. A condição de quantização (35) produz, de acordo com (28):

$$h = \frac{d}{dn} (2\pi m a^2 \omega), \quad (63)$$

⁵S. Goudsmit e R. de L. Kronig, Naturwiss. 13 (1925) 90; H. Hönl, Zs. f. Phys. 31 (1925) 340.

⁶R. de L. Kronig, Zs. f. Phys. 31 (1925) 885; A. Sommerfeld e H. Hönl, Sitzungsber. d. Preuss. Akad. d. Wiss. (1925) 141; H. N. Russell, Nature 115 (1925) 835.

e, segundo (35):

$$h = 2\pi m \{a^2 \omega(n+1, n) - a^2 \omega(n, n-1)\}, \quad (64)$$

da qual, em ambos os casos, segue que:

$$\omega(n, n-1) = \frac{h \cdot (n + \text{constante})}{2\pi m a^2}. \quad (65)$$

A condição de que, no estado fundamental ($n_0 = 0$) a radiação deve desaparecer leva à fórmula:

$$\omega(n, n-1) = \frac{hn}{2\pi m a^2}. \quad (66)$$

A energia se torna:

$$W = \frac{m}{2} v^2, \quad (67)$$

ou, segundo (20) e (21):

$$W = \frac{m}{2} a^2 \cdot \frac{\omega^2(n, n-1) + \omega^2(n+1, n)}{2} = \frac{h^2}{8\pi^2 m a^2} \left(n^2 + n + \frac{1}{2} \right), \quad (68)$$

que, novamente, satisfaz a condição:

$$\omega(n, n-1) = \frac{2\pi}{h} [W(n) - W(n-1)]. \quad (69)$$

Como suporte à validade das fórmulas (66) e (68), que diferem daquelas da teoria usual, pode-se mencionar que, de acordo com Kratzer,⁷ muitos espectros de banda (incluindo espectros para os quais a existência de um momento de elétron é improvável) parecem exigir fórmulas do tipo (66) e (68) (que, a fim de evitar a ruptura com a teoria clássica da mecânica, até então se tentava explicar por meio de números quânticos meio-inteiros).

Para chegar à fórmula de Goudsmit-Kronig-Hönl para o rotador, temos que deixar o campo de problemas com um grau de liberdade e temos que supor que o rotador, em uma qualquer direção no espaço, execute uma precessão muito lenta $\mathfrak{o}$ em torno do eixo z de um campo externo. Seja o número quântico correspondente a essa precessão m . O movimento é então representado pelas grandezas:

$$z : a(n, n-1; m, m) \cos \omega(n, n-1)t; \quad (70)$$

$$x + iy : b(n, n-1; m, m-1) e^{i[\omega(n, n-1) + \mathfrak{o}]t}; \quad (71)$$

$$b(n, n-1; m-1, m) e^{i[-\omega(n, n-1) + \mathfrak{o}]t}. \quad (72)$$

As equações do movimento são simplesmente:

$$x^2 + y^2 + z^2 = a^2, \quad (73)$$

⁷Veja-se, por exemplo, B. A. Kratzer, Sitzungsber. d. Bayr. Akad. (1922) p. 107

que, segundo a (20), dá as equações:⁸

$$\frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{2} a^2(n, n-1; m, m) + b^2(n, n-1; m, m-1) + b^2(n, n-1; m, m+1) + \frac{1}{2} a^2(n+1, n; m, m) + b^2(n+1, n; m-1, m) + b^2(n+1, n; m+1, m) \right\} = a^2. \quad (74)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} a(n, n-1; m, m) a(n-1, n-2; m, m) \\ &= b(n, n-1; m, m+1) b(n-1, n-2; m+1, m) \\ &+ b(n, n-1; m, m-1) b(n-1, n-2; m-1, m). \end{aligned} \quad (75)$$

Além disso, segundo a (35), vem a condição de quantização:

$$2\pi m \{ b^2(n, n-1; m, m-1) \omega(n, n-1) - b^2(n, n-1; m-1, m) \omega(n, n-1) \} = (m + \text{constante}) h. \quad (76)$$

As relações clássicas que correspondem a essas são:

$$\left. \begin{aligned} \frac{1}{2} a_0^2 + b_1^2 + b_{-1}^2 &= a^2; \\ \frac{1}{4} a_0^2 &= b_1 b_{-1}; \\ 2\pi m (b_{+1}^2 - b_{-1}^2) \omega &= (m + \text{constante}) h, \end{aligned} \right\} \quad (77)$$

e são suficientes (a parte a constante aditiva a m) para a determinação única de a_0 , b_1 e b_{-1} .

A mais simples solução que se apresenta para as (74), (75) e (76) é:

$$b(n, n-1; m, m-1) = a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n+m)}{4(n+1/2)n}}; \quad (78)$$

$$b(n, n-1; m-1, m) = a \sqrt{\frac{(n-m)(n-m+1)}{4(n+1/2)n}}; \quad (79)$$

$$a(n, n-1; m, m) = a \sqrt{\frac{(n+m+1)(n-m)}{4(n+1/2)n}}. \quad (80)$$

Essas expressões concordam com as fórmulas de Goudsmit, Kronig e Hönl; no entanto, não é facilmente visível que essas expressões representam a única solução das equações (74), (75), (76), embora isso me pareça provável considerando as condições de contorno (desaparecimento de a e b na fronteira, veja-se os artigos de Kronig, Sommerfeld e Hönl, Russell citados acima).

Considerações similares às acima, aplicadas às fórmulas de intensidade dos multipletos, levam ao resultado de que essas regras de intensidade estão em concordância com as equações (20) e (35). Esse resultado pode ser novamente considerado como fornecendo suporte para a validade da equação cinemática (20).

⁸A equação (74) é essencialmente idêntica às regras de soma de Ornstein-Burger.

Se um método para determinar dados da teoria quântica usando relações entre grandezas observáveis, como o proposto aqui, poderia ser considerado satisfatório em princípio, ou se esse método, afinal, representa uma abordagem muito grosseira para o problema físico de construir uma mecânica quântica teórica, um problema obviamente muito complexo no momento, só pode ser decidido por uma investigação matemática mais intensiva do método que foi muito superficialmente empregado aqui.

Gotinga, Instituto de Física Teórica.