

# HISTÓRIA DA TEORIA QUÂNTICA

Oswaldo Pessoa Jr.  
(versão preliminar, 2010)

## Capítulo I: Velha Teoria Quântica

### 1. Radiação do Corpo Negro: Leis de Wien

A física quântica poderia ter sido descoberta de diferentes maneiras, conforme veremos na seção III.1. Mas o caminho de fato seguido pela história foi através das investigações do espectro de emissão de radiação eletromagnética de corpos aquecidos. Um "corpo negro" é um corpo que absorve toda a radiação incidente, o que na prática pôde ser construído por meio de uma cavidade com envoltória isotérmica (Otto Lummer & Willy Wien, 1895). Com esta fonte de energia, e com o detector de radiação desenvolvido pelo norte-americano Langley (1881), o bolômetro, passou-se a realizar estudos experimentais detalhados do espectro de radiação do corpo negro, especialmente em Berlim. O interesse nesse assunto era grande devido ao seu caráter "universal", já que este fenômeno independia do tipo de substância irradiante [seguiremos aqui o relato de JAMMER, 1966, pp. 1-28].

Do lado teórico, um importante resultado foi a "lei de deslocamento" de Wien (1894). Sendo  $u_\nu(T)$  a densidade de radiação dentro de uma cavidade à temperatura  $T$ , por unidade de frequência em torno de  $\nu$ , essa lei dizia que  $u_\nu(T)$  é uma função de  $\nu/T$ :

$$u_\nu(T) = (4\pi/c) \nu^3 F(\nu/T). \quad (\text{I.1})$$

Wien demonstrou esta relação estudando como que a frequência de radiação era alterada pelo efeito Doppler ao ser refletida em uma esfera que se contraía de maneira "adiabática" (sem trocas de calor). Esta lei continuaria válida na física quântica, e a noção de um "invariante adiabático",  $\nu/T$ , seria generalizada mais tarde por Ehrenfest, conforme veremos. Uma consequência desta lei é que a frequência máxima do espectro de radiação é proporcional à temperatura do corpo negro:  $\nu_{\max} \propto T$ .

Seguindo uma idéia de Michelson, Wien supôs, em um trabalho posterior (1896), que as moléculas irradiadoras tinham velocidades que obedeciam à função de distribuição de Maxwell-Boltzmann. Usando sua lei de deslocamento, concluiu que o espectro de radiação do corpo negro obedecia à "lei de radiação de Wien":

$$u_\nu(T) = \alpha \nu^3 \exp(-\beta\nu/T), \quad (\text{I.2})$$

onde  $\alpha$  e  $\beta$  são constantes. Esta lei foi confirmada entre 1897-99 por Paschen e Wanner, para luz no visível e a temperaturas de até 4000°C, e uma derivação mais rigorosa nessa mesma época foi obtida por Max Planck, em Berlim.

Supondo que radiação de frequência  $\nu$  era gerada por osciladores harmônicos lineares de mesma frequência, « que Planck parecia ter em mente era uma tradução do raciocínio que

levara à distribuição de velocidades de Maxwell-Boltzmann com base na teoria cinética para a estrutura conceitual da teoria eletromagnética» [JAMMER, p. 11]. Aplicando então o teorema-H de Boltzmann para essa situação, o que necessitava de uma hipótese estatística adequada, concluiu (julho, 1898) que em condições de equilíbrio:

$$u_\nu(T) = (8\pi/c^3) \nu^2 U(\nu, T), \quad (I.3)$$

onde  $U(\nu, T)$  é a energia média de um oscilador harmônico.

O passo seguinte (maio, 1899) era derivar uma expressão para  $U(\nu, T)$  a partir da "abordagem termodinâmica" (ao invés de fazer uso do teorema de equipartição de energia). Examinando a lei de radiação de Wien (eq. I.2), estava claro que  $U(\nu, T)$  deveria ter a forma:  $U(\nu, T) = C\nu \exp(-\beta\nu/T)$ . Como a entropia  $S$  obedece à seguinte relação termodinâmica:

$$\partial S / \partial U = 1/T, \quad (I.4)$$

inferiu que a entropia de um oscilador seria dado por:  $S = (U/a\nu) \log(U/b\nu)$ , onde  $a$  e  $b$  são constantes. Planck enquadrou assim a lei de radiação de Wien dentro do esquema explicativo da termodinâmica.

## 2. Planck: Nova Lei de Radiação e Quantização

Problemas com esta abordagem começaram a surgir entre 1899 e 1900, quando Lummer & Pringsheim em Berlim mediram desvios sistemáticos em relação à lei de radiação de Wien para frequências mais baixas (infravermelho).

Entrementes, Lord Rayleigh mostrou em junho de 1900 que a aplicação do teorema de equipartição de energia às vibrações eletromagnéticas na cavidade levavam à fórmula (corrigida em 1905 por Jeans):

$$u_\nu(T) = (8\pi/c^3) \nu^2 kT, \quad (AH-I.5)$$

o que equivale à eq.(AH-I.3) com:  $U(\nu, T) = kT$  ( $k$  é a constante de Boltzmann).

Rubens & Kurlbaum, também de Berlim, confirmaram experimentalmente esta lei para frequências baixas e temperaturas altas, e comunicaram seus resultados para Planck alguns dias antes de uma reunião da Sociedade Alemã de Física, em 19 de outubro de 1900. Planck teve tempo de preparar um extenso comentário à apresentação de Kurlbaum, no qual apresentou uma fórmula de interpolação entre as eqs.(I.2) e (I.5) deste capítulo, que consiste na eq.(I.3) com:

$$U(\nu, T) = c_1 \nu / [\exp(c_2 \nu/T) - 1], \quad (AH-I.6)$$

onde  $c_1$  e  $c_2$  são constantes, e onde utilizou-se o resultado de que  $U = \nu F(\nu/T)$ , com  $F$  uma função genérica. O raciocínio que o levou a esta interpolação está resumido em JAMMER (1974, pp. 17-19). Rubens, e Lummer & Pringsheim, logo confirmaram experimentalmente essa "lei de radiação de Planck".

Tendo em vista seu trabalho anterior, Planck se viu obrigado a derivar sua lei de radiação a partir de uma expressão para a entropia. Voltou-se então para a definição probabilista da entropia introduzida por Boltzmann, e definiu a entropia  $S_N$  de um sistema de

N osciladores de frequência  $\nu$  como:  $S_N = k \log(W)$ , onde  $W$  é o número de "complexões" (distribuições) compatíveis com a energia do sistema. Para poder "contar" o número de complexões, seguiu Boltzmann (1877) e supôs que a energia total  $U_N$  é um múltiplo inteiro de "elementos de energia"  $\varepsilon$ :  $U_N = P\varepsilon$ . O número de maneiras possíveis de distribuir  $P$  elementos de energia  $\varepsilon$  entre  $N$  osciladores é:  $W = (N+P-1)! / (N-1)! P!$ . Calculou assim  $S_N$ , e usando a eq.(AH-I.4) obteve:

$$u_\nu(T) = (8\pi/c^3) \nu^2 \cdot h\nu / [\exp(h\nu/kT) - 1], \quad (\text{AH-I.7})$$

onde utilizou  $\varepsilon=h\nu$  com base no resultado  $U = \nu F(\nu/T)$  mencionado acima, tendo calculado o valor da "constante universal  $h$ " com base na experiência.

Planck apresentou esses resultados na reunião da Sociedade Alemã de Física em 14 de dezembro de 1900. Apesar da sua lei ter sido comprovada experimentalmente, quase nenhuma atenção foi dada à sua introdução de  $h$ , antes de 1905. O que seu trabalho indicava era que *a emissão e a absorção de radiação por parte de osciladores se dava em "quanta" discretos de energia.*

### 3. Einstein: Quantização da Radiação

Consideraremos os desenvolvimentos posteriores em direção à física quântica de forma um pouco mais sucinta do que a que foi apresentada acima.

O passo seguinte foi dado em 1905 por Albert Einstein, trabalhando em Berna, na Suíça [ver JAMMER, pp. 28-46]. Ele considerou que a energia luminosa é distribuída descontinuamente no espaço, e com isso derivou a lei do efeito fotoelétrico (foto-emissivo), que Millikan confirmaria experimentalmente em 1916.

A idéia de Einstein foi explorar uma analogia que descobriu entre as expressões da entropia para a *radiação* emitida por um corpo negro (não dos osciladores) no limite de validade da lei de Wien (eq. AH-I.2) e da entropia de um gás dada pela teoria cinética. Seu cálculo para a diferença  $S-S_0$ , entre as entropias da radiação que estava em um volume  $V$  e passa para um volume  $V_0$ , forneceu:  $S-S_0 = (R/N) \log(V/V_0)^{N E_\nu / \beta \nu R}$ , onde  $E_\nu$  é a energia da radiação no intervalo entre  $\nu$  e  $\nu+dv$ , e  $\beta$ , obtido da eq.(AH-I.1), é  $h/k$ . Ora, mas sabe-se da teoria cinética que a probabilidade de encontrar  $n$  partículas em um volume parcial  $V$  do volume original  $V_0$  é  $(V/V_0)^n$ . Assim, a entropia é dada por  $S-S_0 = (R/N) \log(V/V_0)^n$ .

Identificando essas duas expressões, Einstein obteve:  $E_\nu = n(R\beta\nu/N)$ , o que equivale a  $E_\nu=h\nu$ . Einstein pode assim declarar que «radiação monocromática de baixa densidade [...] se comporta como se consistisse de quanta independentes de energia de magnitude  $R\beta\nu/N$ » [citado por JAMMER, p. 30].

### 4. Einstein: Quantização e Calores Específicos

A primeira confirmação experimental do princípio de Planck fora da área de radiação do corpo negro se deu a partir de outro trabalho de Einstein, publicado em 1907, relativo à lei dos calores específicos de sólidos a baixas temperaturas. A teoria clássica dos calores específicos se baseava na constatação experimental feita por Dulong & Petit em 1819 de que «os átomos de

todos os corpos simples têm exatamente a mesma capacidade térmica» [citado por JAMMER, p. 57], em torno de 6 cal/mol-K. Este resultado, confirmado por Regnault em 1840, só se aplicava à temperatura ambiente, conforme começou a ser visto em 1872, quando F.H. Weber mediu o calor específico do diamante a -50°C, obtendo o valor de 0,76 cal/mol-K. Após desenvolvimentos na liquefação de gases em 1895, Behn pôde concluir em 1898 que a curva dos calores específicos parecia tender a zero na temperatura de zero absoluto.

A teoria clássica (Boltzmann, 1871; Richarz, 1893) explicava facilmente a lei de Dulong-Petit, mas não a curva a baixas temperaturas. Einstein conseguiu obter uma equação com o comportamento desejado supondo que os átomos de um sólido vibram independentemente com a mesma frequência  $\nu$ , e aplicando a lei de Planck (eq. AH-I.7) para a energia média dos átomos. Obteve, para a energia molar:  $E = 3N h \nu / [\exp(h\nu/kT) - 1]$ , o que fornece o calor específico através de  $dE/dT$ .

Este resultado levou o químico Walther Nernst a ser um dos primeiros a aceitar a quantização de energia, já que o comportamento do calor específico a baixas temperaturas era consequência de sua formulação da 3ª Lei da Termodinâmica, segundo a qual a entropia tende a zero à medida que se aproxima do zero absoluto. A abordagem de Einstein foi corrigida em 1912 por Peter Debye, que salientou a necessidade de se considerar os modos coletivos de vibração dos átomos do sólido.

## 5. Problemas com a Derivação da Lei de Planck

Em 1906, Einstein mostrou que a derivação original da lei de radiação de Planck era inconsistente, porque a eq.(AH-I.3) é obtida a partir da teoria eletromagnética clássica, que pressupõe que os osciladores têm energia que varia continuamente, enquanto que a eq.(AH-I.6) se baseia em um tratamento estatístico que supõe energias discretas. Esses dois tratamentos só seriam consistentes se  $\epsilon = h\nu$  fosse pequeno em relação a  $U(\nu, T)$ , ao longo de todo o espectro, o que não é o caso. Isso, para Einstein, era evidência de que a teoria clássica da radiação, baseada nas equações de Maxwell, teria que ser revisada [ver JAMMER, p. 26-27].

Na conferência da Associação Alemã de Cientistas de 1909, Einstein apresentou esse problema, e Planck defendeu que ele poderia ser sanado sem se rejeitar as equações de Maxwell, mas reformulando a teoria dos processos de emissão e absorção. Em 1911, Planck reformulou sua abordagem, considerando que a absorção da radiação seria contínua. Este trabalho foi logo rejeitado por Planck, mas ele é interessante por introduzir pela primeira vez a energia de ponto zero do oscilador harmônico, por tecer considerações probabilísticas com respeito à emissão de radiação, e por fazer uso do princípio da correspondência para calcular essas probabilidades. Esse problema também foi abordado por Debye em 1910.

Outro resultado importante de Planck foi apresentado no 1º Congresso de Solvay, em 1911, onde ele considerou o espaço de fase do oscilador harmônico, e interpretou  $h$  como uma área elementar, de dimensão finita, no espaço de fase. O conceito de quanta de energia seria consequência de uma condição mais básica [ver JAMMER, pp. 52-54]:

$$\int_E^{E+\epsilon} dq dp = h . \quad (\text{AH-I.8})$$

Em 1916, Einstein conseguiria suplantando os problemas da derivação da lei de radiação de Planck, supondo (seguindo Bohr) que uma molécula só pode assumir valores discretos de

energia. Obteve um "princípio de balanceamento detalhado" envolvendo os coeficientes de absorção B e emissão B induzidas, e o de emissão espontânea A, supondo que a radiação em equilíbrio obedece a função de distribuição de Boltzmann, e que a lei de deslocamento de Wien é válida [ver JAMMER, pp. 112-4; VAN DER WAERDEN, 1967, pp. 3-4, que inclui o artigo de Einstein, pp. 63-77].

Toda pesquisa subsequente relativa à absorção, emissão e dispersão de radiação (ver seção AH-II.2) se basearia neste importante trabalho. Nele, Einstein mencionou que uma transição espontânea poderia ocorrer «sem excitação por parte de uma causa externa», o que levaria Bohr a interpretar tais transições como sendo "acausais". Einstein também enfatizou que não existiria radiação emitida na forma de ondas esféricas, e atribuiu um momento  $h\nu/c$  para um feixe de radiação dirigida com energia  $h\nu$ , que seria emitido em uma certa direção ao acaso.

## 6. O Modelo Atômico de Bohr

Em 1910, Ernest Rutherford e Hans Geiger, em Manchester, demonstraram através de experimentos de espalhamento que o átomo tem um núcleo duro. Isso era consistente com as hipóteses sugeridas por Perrin (1901) e por Nagaoka (1904), segundo o qual elétrons girariam em torno de um núcleo positivo. Mas ia contra o modelo atômico mais aceito na época, o "bolo de ameixas" de J.J. Thomson, em Cambridge.

Apesar de estar trabalhando em Cambridge, o dinamarquês Niels Bohr teve uma discordância em relação ao modelo de Thomson, e em março de 1912 passou a trabalhar com Rutherford, recebendo bastante apoio em seu projeto de aplicar a teoria quântica de Planck para explicar a origem das linhas espectrais dos átomos (projeto este investigado independentemente por vários outros físicos, mas sem muito sucesso, pois se referiam ao modelo atômico de Thomson) [ver JAMMER, pp. 69-88].

O grande problema com o modelo atômico de Rutherford era explicar a sua estabilidade, já que, de acordo com o eletromagnetismo clássico, um sistema de cargas em movimento deveria perder energia através da emissão de radiação, e se contrair indefinidamente. A idéia de Bohr, então, era aplicar a constante de Planck  $h$  para dar conta da estabilidade do átomo. Como fazer isso? Um primeiro passo foi perceber que poderia formar uma constante com dimensão de espaço,  $h^2/me^2$ , o que não era possível só com a massa  $m$  e a carga  $e$  do elétron. Em fevereiro de 1913 ele conseguiu resolver o problema da estabilidade a partir de duas pistas: um experimento realizado em 1911 por Whiddington, que lhe sugerira a idéia de níveis de energia, e a informação de que as linhas espectrais do hidrogênio exibiam regularidades, como a série de Balmer descoberta em 1885.

A seguinte síntese de seu modelo foi publicada em 1918 [Bohr, *in* VAN DER WAERDEN, 1967, pp. 5, 97]: I) Um sistema atômico só pode existir permanentemente em uma série descontínua de "estados estacionários", nas quais ele não perde energia por radiação. II) A radiação absorvida ou emitida durante a transição entre dois estados estacionários possui uma frequência  $\nu$  dada por  $E'-E'' = h\nu$ .

A equação obtida para as frequências da luz emitida pelo átomo de hidrogênio foi a seguinte:

$$\nu = 2\pi^2(me^4/h^3)(1/\tau_2^2 - 1/\tau_1^2) . \quad (\text{AH-I.9})$$

Esta equação dava conta não só das raias espectrais da série de Balmer ( $\tau_2=2$ ), mas também de outras séries conhecidas na época (a série de Paschen,  $\tau_2=3$ , havia sido observada em 1908) ou não (a série de Lyman, por exemplo,  $\tau_2=1$ , seria observada no ultravioleta em 1914). O modelo de Bohr permitiu também a correta interpretação da série de raias observada em uma estrela pelo astrônomo norte-americano Pickering, em 1896. Este a interpretara como sendo uma série do hidrogênio, mas Bohr logo viu que ela correspondia a raias do íon de hélio, um átomo com um elétron e massa duas vezes maior que o hidrogênio. E em 1914, um famoso experimento realizado por J. Franck & G. Hertz veio a confirmar mais ainda as previsões da teoria de Bohr. Porém, seu modelo só era aplicável para átomos com um elétron.

Resumindo a abordagem de Bohr, podemos citar JAMMER [1966, p. 88]: «Vemos assim que, ao contrário de Planck e Einstein, Bohr não tentou eliminar o abismo que existia entre a física clássica e quântica, mas desde o início de seu trabalho buscou um esquema de concepções quânticas que formaria um sistema tão coerente, de um lado do abismo, quanto aquele das noções clássicas no outro lado do abismo.»

## 7. O Princípio da Correspondência

Vimos que a lei de radiação de Planck, no limite de baixas frequências de radiação (infravermelho), tendia para a equação clássica de Rayleigh-Jeans. Isso indicava que no limite de "vibrações lentas", as previsões da física quântica corresponderiam às da física clássica. Este é o princípio da correspondência, que Bohr utilizou não só no limite de baixas frequências,  $\nu \rightarrow 0$ , mas também no limite de números quânticos grandes,  $n \rightarrow \infty$ . O termo "correspondência" foi introduzido por Bohr em 1920 [ver JAMMER, pp. 109-118].

« O trabalho de pesquisa realizado durante os anos 1919-1925, que finalmente levou à mecânica quântica, pode ser descrito como *adivinhação sistemática, guiada pelo Princípio da Correspondência* » [VAN DER WAERDEN, p. 8]. O princípio da correspondência viria a permitir eliminar soluções obtidas pelas regras de quantização (aplicadas a modelos clássicos) que não se enquadravam em resultados experimentais [JAMMER, pp. 196-7].

## 8. O Princípio Adiabático

Sabia-se, da mecânica clássica, que certos sistemas periódicos que sofressem lentas transformações adiabáticas (sem troca de calor) mantinham a razão  $E/\nu$  entre energia e frequência constante ( $E/\nu$  seria um "invariante adiabático"). Um exemplo disso é um pêndulo simples cujo fio é lentamente encurtado [ver JAMMER, pp. 96-101]. A generalização disso para a teoria quântica foi empreendida por Paul Ehrenfest (1913), de Leyden na Holanda, a quem citamos diretamente:

«Uma lei fundamental permanece em meio à teoria dos quanta: a *lei de deslocamento* de W. Wien [eq.AH-I.1] sobre a alteração da distribuição de energia ao longo do espectro que ocorre com uma compressão adiabática reversível da radiação. Este fato merece nossa atenção. É possível também que em casos mais gerais, quando não nos restringimos a movimentos harmônicos, as transformações adiabáticas reversíveis devam ser tratadas de maneira clássica, enquanto que no cálculo de outros processos (por exemplo, uma adição isotérmica de calor) os quanta passem a atuar.

«Parti desse ponto de vista em alguns artigos nos quais, por um lado, estudei a hipótese

de Planck de elementos de energia, e por outro, tentei estender esta hipótese para movimentos mais gerais. Nestas pesquisas fiz uso, em especial, da seguinte hipótese, à qual Einstein deu o nome de 'hipótese adiabática'. *Se um sistema for afetado de uma maneira adiabática, movimentos permitidos são transformados em movimentos permitidos*» [Ehrenfest, reproduzido em VAN DER WAERDEN, p. 79].

## 9. As Condições Quânticas

Em torno de 1914, o maior problema da física era como estender a teoria quântica para sistemas com mais de um grau de liberdade. Planck havia introduzido a "condição quântica" (eq.AH-I.8) para o oscilador harmônico, e buscava-se uma generalização para isso. Em 1915, o próprio Planck e Arnold Sommerfeld, de Munique, resolveram o problema de maneiras diferentes, sendo que as condições deste último foram também obtidas independentemente por W. Wilson e por J. Ishiwara, no Japão [JAMMER, pp. 89-97].

As chamadas "condições de Sommerfeld" afirmam que estados estacionários de um sistema periódico com  $f$  graus de liberdade são determinados pelas condições de que «a integral de fase para cada coordenada seja um múltiplo inteiro do quantum de ação», ou seja, para  $k=1,2,\dots,f$ :

$$\int p_k dq_k = n_k h, \quad (\text{AH-I.10})$$

onde  $p_k$  é o momento correspondendo à coordenada  $q_k$ ,  $n_k$  é um inteiro não-negativo e a integração é feita sobre um período de  $q_k$ .

O tratamento de Bohr equivalia à condição quântica para 1 dimensão, relativa à quantização do momento angular. Sommerfeld utilizou três destas condições para tratar o átomo de hidrogênio em 3 dimensões, mas não conseguiu nada de novo com isso. Desde 1891, devido a observações de Michelson, sabia-se que o espectro do hidrogênio tinha uma estrutura fina, inexplicável pelo modelo de Bohr. Quando, porém, Sommerfeld considerou um hamiltoniano relativístico, conseguiu derivar as linhas da estrutura fina!

Dois outros sucessos da teoria foram os seguintes. Em 1916, o efeito Stark foi explicado por K. Schwarzschild & P.S. Epstein. Este efeito descoberto em 1913 consistia na divisão das linhas do espectro de hidrogênio na presença de um campo elétrico. Schwarzschild & Epstein escolheram as condições apropriadas para poder usar as condições quânticas, e mostraram de maneira clara a ligação com a teoria de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica. Esta ligação seria retomada por Bohr (1924) e Born (1925), e «quase parecia que o método de Hamilton tinha sido expressamente criado para tratar de problemas quânticos» [JAMMER, p. 103].

No mesmo ano, Sommerfeld & Debye explicaram o efeito Zeeman normal. Este efeito, descoberto em 1897, consistia na divisão das linhas de hidrogênio por um campo magnético. O efeito "normal" já havia sido explicado classicamente em 1897, por Lorentz.

Por fim, é importante frisar que em 1916 Ehrenfest mostrou que as condições quânticas para o átomo de hidrogênio eram um caso especial do princípio adiabático.

# Capítulo II: O Desenvolvimento da Mecânica Matricial

## 1. A Filosofia Natural

No verão de 1922, Niels Bohr foi convidado para uma série de palestras na Universidade de Göttingen, situada no centro da Alemanha. Na platéia deste "Festival Bohr" estavam dois jovens alunos de Sommerfeld, em Munique. Wolfgang Pauli já havia terminado seu doutorado e trabalhava como assistente de Max Born em Göttingen. Werner Heisenberg, um «jovem aluno loiro, quase parecendo um colegial», veio com seu orientador de Munique. Os dois jovens ficaram marcados por aquele professor «cheio de excitação juvenil, mas um pouco constrangido e tímido, com sua cabeça pendendo levemente para um lado». A certa altura Bohr se referiu positivamente a um cálculo teórico de seu colaborador holandês Hendrik Kramers, trabalho este que Heisenberg já havia estudado e do qual discordava. Na discussão que se seguiu, este colocou sua objeção, e após a reunião Bohr o convidou para um passeio nas cercanias. [Citações desta seção obtidas de: Hund, *in* FRENCH & KENNEDY, 1985, pp. 71-72; e Heisenberg, *in* van der Waerden, 1967, pp. 21-22].

« Aquela discussão, que nos levou de um lado para outro nos bosques montanhosos de Hainberg, foi a primeira discussão meticulosa que eu me lembro sobre os problemas físicos e filosóficos fundamentais da moderna teoria atômica, e ela certamente teve uma influência decisiva na minha carreira posterior. Pela primeira vez eu compreendi que a visão de Bohr a respeito de sua teoria era muito mais cética do que a de muitos outros físicos da época - por exemplo, Sommerfeld -, e que seu discernimento sobre a estrutura da teoria não era resultado de uma análise matemática das suposições básicas, mas de uma ocupação intensa com o fenômeno atual, de maneira que era possível para ele perceber intuitivamente o relacionamento ao invés de derivá-lo formalmente.

Então eu compreendi: conhecimento sobre a natureza era obtido primordialmente dessa maneira, e apenas como um passo seguinte pode alguém conseguir fixar seu conhecimento em forma matemática e sujeitá-lo a uma análise racional completa. Bohr era em primeiro lugar um filósofo, não um físico, mas ele compreendeu que a filosofia natural em nossa época tem importância apenas se cada um de seus detalhes puder se sujeitar ao teste inexorável da experiência.»

## 2. Modelo do Cerne Magnético

Entre 1921-23, Alfred Landé e Sommerfeld desenvolveram um modelo para tratar de átomos de muitos elétrons, conhecido como modelo do "cerne magnético" (*magnetic core model*). O cerne consistia do núcleo e dos elétrons internos (não ópticos), que como um todo possui um momento angular de  $s$  unidades de  $h/2\pi$ , e um correspondente momento magnético. Assim, o elétron óptico fica sujeito a um campo magnético, que produz um efeito Zeeman interno.

Heisenberg (1922) trabalhou neste modelo enquanto estava trabalhando com Sommerfeld. «Abandonando qualquer descrição detalhada das órbitas eletrônicas conforme exigido pela teoria, Heisenberg restringiu a descrição do átomo essencialmente àquela dada



pelos números quânticos» [HENDRY, 1984, p. 39]. Introduziu números quânticos meio-inteiros, conseguindo um certo sucesso, abordagem esta desenvolvida por Landé.

### 3. Osciladores Virtuais

Uma aplicação do princípio da correspondência que iria se tornar importante no desenvolvimento da mecânica quântica (MQ) se deu no contexto da "teoria da dispersão". O índice de refração de um meio exprime como o comportamento de um raio de luz se altera no meio. No eletromagnetismo clássico, o índice de refração era calculado supondo-se que as cargas do meio seriam forçadas a oscilar na presença de uma onda luminosa, oscilação essa que geraria por sua vez uma onda eletromagnética a ser somada à original. O cálculo desta onda gerada a partir do oscilador "harmônico" (linear) fornece o índice de refração, que irá depender dentre outras coisas da frequência  $\nu$  da luz incidente (donde se origina a "dispersão" da luz branca em um prisma) e da frequência própria  $\nu_i$  do oscilador  $i$ .

Em 1921, o físico alemão Rudolf Ladenburg aplicou o princípio da correspondência para equacionar o coeficiente de absorção, obtido a partir da teoria clássica da dispersão, com a probabilidade de transição entre dois níveis atômicos, obtida por Einstein (1916) em sua derivação da fórmula de radiação de Planck para o átomo de Bohr (seção AH-I.5). Com isso, Ladenburg implicitamente «substituiu o átomo, no que tange a sua interação com o campo de radiação, por um conjunto de osciladores harmônicos com frequências iguais às frequências de absorção  $\nu_i$  do átomo» [VAN DER WAERDEN, p. 11].

### 4. Campo Virtual de Radiação

A partir desta noção de "osciladores harmônicos virtuais" (como Bohr os chamaria em 1922), o norte-americano John Slater desenvolveria a influente idéia de um *campo virtual de radiação* emitido pelos osciladores virtuais. A hipótese de Slater foi uma elaboração de uma idéia sugerida por várias pessoas após a descoberta do efeito Compton (que veremos adiante) em abril de 1923 (uma influência indireta por parte de Louis de Broglie talvez tenha existido [HENDRY, pp. 53-54]). Segundo esta idéia, o campo eletromagnético não carregaria uma distribuição contínua de energia, mas de alguma maneira guiaria os fótons [Slater 1975, in FRENCH & KENNEDY, 1985, p. 160].

Inicialmente, Slater concebia que o campo virtual determinava probabilidades de localização do fóton. «Eu havia ido a Copenhague com a idéia de que os osciladores seriam usados para determinar o comportamento de fótons, que eu preferia considerar como entidades reais, satisfazendo conservação como hoje sabemos que eles fazem, e eu desejava introduzir uma probabilidade apenas na medida em que as ondas determinam a probabilidade do fóton estar em um dado lugar em um dado tempo» [Slater 1964, carta para VAN DER WAERDEN, p. 13].

Estando com uma bolsa de estudos para trabalhar com Bohr e Kramers, Slater apresentou sua hipótese a estes, que aceitaram a noção de campo virtual mas o convenceram a abandonar a idéia de que um quantum de radiação propagaria no espaço. Em uma carta à revista *Nature* (janeiro 1924), Slater já adotava as sugestões dos dois:

«Pode-se supor que qualquer átomo, de fato, se comunica com outros átomos todo o tempo em que ele está em um estado estacionário, por meio de um campo virtual de radiação

que se origina de osciladores possuindo as frequências de transições quânticas possíveis, e cuja função é estabelecer uma conservação estatística de energia e momento, por meio da determinação das probabilidades de transições quânticas. Parte do campo que se origina do próprio átomo em questão induziria uma probabilidade para que este átomo perdesse energia espontaneamente, enquanto que radiação de fontes externas induziria probabilidades adicionais para que ele ganhe ou perca energia, de forma semelhante à sugerida por Einstein» [Slater 1924, *in* VAN DER WAERDEN, p. 12].

## 5. A Teoria de BKS

Ainda em janeiro de 1924, Bohr, Kramers & Slater (BKS) escreveram "A Teoria Quântica da Radiação" [*in* VAN DER WAERDEN, pp. 159-76]. Redigido por Bohr, o trabalho incorporou a idéia de campo virtual, atribuindo de maneira inusitada um papel fundamental à noção de "probabilidade", que não estaria ligada à nossa ignorância a respeito do mundo.

O trabalho foi marcado pela tese de "conservação estatística de energia e momento", mencionada na carta de Slater: as leis de conservação não se aplicariam de maneira rigorosa a interações individuais, apesar de serem válidas na média de muitas interações. Esta hipótese havia sido sugerida entre 1919-22 pelo inglês C.G. Darwin («neto do verdadeiro Darwin»), com quem Bohr interagiu, e era uma idéia plausível já que era consistente com os dados experimentais da época [JAMMER, 1966, pp. 181-182].

Uma terceira idéia do artigo foi a rejeição da hipótese do quantum de luz, ou de uma conexão causal entre transições em átomos distantes. Kramers defendia que processos de absorção e emissão em átomos distantes, estavam relacionados apenas estatisticamente. Isso naturalmente desagradou a Einstein, que em 1905 havia introduzido a idéia do quantum de radiação. O físico dinamarquês nunca foi afeito à interpretação corpuscular, e o artigo de BKS suscitou o primeiro round do debate Bohr-Einstein [MacKinnon, *in* FRENCH & KENNEDY, pp. 105-6].

BKS mostraram que no limite em que o princípio da correspondência é válido, sua teoria coincidia com a teoria clássica da radiação. Segundo o historiador da ciência MAX JAMMER [1966, pp. 183-4], o trabalho de BKS foi importante por três motivos: «(1) foi o primeiro artigo de peso em física que deliberada e programaticamente renunciou aos métodos de explicação e aos princípios fundamentais da mecânica clássica; (2) evocou conseqüentemente muita discussão entre os físicos, dirigindo assim a atenção dos teóricos quânticos para questões relativas aos fundamentos epistemológicos da física atômica; e (3) foi o ponto de partida para a detalhada teoria da dispersão de Kramers, cuja elaboração posterior por Kramers e Heisenberg levou este à descoberta da mecânica matricial, a primeira formulação da MQ.» Com efeito, em retrospecto, a idéia de um campo virtual de radiação pode ser considerada correta [VAN DER WAERDEN, pp. 12-13].

## 6. O Efeito Compton

O episódio que gerou as especulações de Slater foi o experimento de Arthur Compton realizado em 1923 em Saint Louis no interior dos Estados Unidos. Sabia-se até então que ao incidir ondas de raios-X em uma amostra, raios-X "secundários" eram emitidos com comprimento de onda maior, sendo que o valor deste comprimento de onda dependia do ângulo

$\theta$  em que se detectava a radiação secundária. Medidas quantitativas desta dependência foram iniciadas por Compton, mas os dados obtidos não eram explicados pela teoria de espalhamento de J.J. Thomson (1906), e nem pelas hipóteses de fluorescência ou de efeito Doppler.

Compton então examinou «o que iria acontecer se cada quantum de energia do raio-X fosse concentrado em uma única partícula e agisse como uma unidade em um único elétron» [Compton 1961, citado por JAMMER, p. 161]. Supondo que os fótons de raio-X carregavam momento linear da mesma maneira que partículas (hipótese desenvolvida por Stark (1909) e Einstein (1909, 1916)), e utilizando as leis de conservação de energia e momento para o choque elástico entre fóton e elétron (inicialmente em repouso), Compton obteve uma expressão para a diferença  $\Delta\lambda$  entre os comprimentos de onda dos raios-X incidentes e espalhados, cuja dependência angular era dada por  $\Delta\lambda = \lambda_c \cdot (1 - \cos \theta)$ , onde  $\lambda_c$  é uma constante.

Seus resultados experimentais confirmaram esta equação, indicando a validade das leis de conservação usadas em sua derivação. No entanto, tal resultado poderia ser também explicado considerando-se que as leis de conservação seriam leis meramente estatísticas.

## 7. Experimentos de Coincidência

Vimos que para BKS, interações individuais poderiam violar a conservação de energia e momento. Neste caso, no efeito Compton, a direção de recuo do elétron após o choque não seria determinada pela direção de espalhamento do fóton, mas haveria uma probabilidade de recuo em qualquer direção. Essa previsão é passível de ser testada, o que segundo o filósofo da ciência Karl Popper (1935) é a característica mais importante de uma teoria científica.

Tal teste foi realizado em abril de 1925, quando Walter Bothe & Hans Geiger mostraram experimentalmente que para ângulos apropriados ocorria 1 coincidência entre o fóton espalhado e o elétron recuado para cada 11 fótons detectados. Isso seria altamente improvável caso a tese de BKS fosse correta. Este experimento é importante do ponto de vista técnico porque foi a primeira realização de um experimento de coincidência em física atômica, sem ainda utilizar circuitos eletrônicos mas empregando o registro fotográfico do sinal dos contadores a cada  $10^{-3}$  segundos. A técnica de coincidência se tornaria essencial para *selecionar* eventos individuais e assim realizar medições quânticas.

Em setembro, Compton em parceria com Alfred Simon verificou as leis de conservação para espalhamentos individuais por meio de fotografias em uma câmara úmida de Wilson. Os raios-X não eram registrados, mas ocasionalmente a radiação secundária ionizava um átomo, que por sua vez produzia uma curta trajetória visível na câmara. Desta maneira, pôde-se observar os ângulos das partículas espalhadas.

A técnica visual associada a câmaras e emulsões pode ser contrastada às técnicas de contagem e de coincidência, ambas tendo importância na história da física de partículas, cada qual tendo vantagens neste ou naquele contexto.

## 8. Átomos e Visualização

Paralelamente a Bohr, que se atinha a modelos de certa forma visualizáveis, Heisenberg, que se admirara com a intuição física do dinamarquês, começava a trilhar um caminho oposto aos dos modelos passíveis de "visualização" (*Anschaulichkeit*). Na seção AH-II.2 já mencionamos a abordagem adotada pelo jovem alemão em relação ao átomo, na qual se

restringia essencialmente aos números quânticos, e se distanciava da teoria atômica de Bohr.

No final de 1922 Heisenberg foi trabalhar em Göttingen com Born, e a partir de outubro de 1923 passou a priorizar as equações de diferença em seu modelo, abordagem esta também adotada por Born (como veremos a seguir). A tendência que Heisenberg passava a adotar de abandonar o uso de modelos visualizáveis é próxima ao "operacionalismo" de Wolfgang Pauli, para quem «em física apenas quantidades que são em princípio observáveis devem ser introduzidas» (o chamado "critério de observabilidade") [Pauli 1921, *in* HENDRY, p. 19]. Em 1923, Pauli recusava explicitamente a aplicação de conceitos clássicos de campos eletromagnéticos no interior do átomo, recusando também a noção de órbita de um elétron. Esta posição era compartilhada por Bohr, e os dois usavam a expressão *unmechanischer Zwang* ("restrição não-mecânica") para se referir a suposições arbitrárias utilizadas nos novos modelos atômicos. Mas enquanto Bohr e Pauli rejeitavam a visualização clássica para buscar um novo modelo visualizável e coerente, Heisenberg dispensava qualquer modelo e manipulava símbolos em busca de uma descrição matemática que se adequasse aos dados experimentais. Em carta a Bohr, Pauli se referia assim a Heisenberg, no início de 1924: «Se eu penso sobre suas idéias elas parecem monstruosas e eu praguejo bastante para mim mesmo sobre elas. Porque ele é tão antifilosófico, ele não se preocupa em dar uma apresentação clara das suposições básicas e das suas relações com teorias anteriores» [Pauli, fev. 1924, citado por HENDRY, p. 42].

Durante vários meses Pauli se afastou da física quântica, desgostoso com o modelo do cerne e com o uso de osciladores virtuais. Em meados de 1924 ele retornou para a área justamente para escrever um artigo criticando o modelo do cerne. Seu otimismo voltou, porém, após ler em outubro um trabalho de Edmund Stoner sobre a estrutura eletrônica do átomo, que discordava de uma proposta apresentada por Bohr em 1923 e que Pauli conhecia bem. O resultado desta leitura foi a formulação ainda em 1924 do seu "princípio de exclusão": «Em um átomo nunca existem dois ou mais elétrons equivalentes que, em campos intensos, concordam em todos os seus números quânticos  $n, k_1, k_2, m_1$ . Se no átomo existir um elétron para o qual os números quânticos (no campo externo) têm valor definido, este estado está 'ocupado'» [Pauli 1924, *in* JAMMER, p. 144].

## 9. Método das Diferenças

Após a teoria de BKS, Kramers apresentou em março de 1924 uma nova teoria de dispersão que utilizava a noção de campo virtual, e que melhorava a teoria de Ladenburg ao introduzir um termo de emissão que, como o termo de absorção, consistia de uma série infinita de osciladores virtuais, passando a satisfazer o princípio da correspondência para números quânticos grandes.

De acordo com este princípio, a frequência quântica  $\nu_{n,n-\tau}$  corresponde à frequência clássica  $\nu(n,\tau)$  para  $n$  grandes e  $\tau$  pequenos, onde  $\tau$  é a diferença entre os números quânticos de dois níveis:

$$\nu(n,\tau) \iff \nu_{n,n-\tau} . \quad (\text{AH-II.1})$$

O trabalho de Kramers inspirou Born a generalizar o método usado na interação entre átomo e campo radiativo para quaisquer dois sistemas mecânicos, abordagem a qual ele chamou de "mecânica quântica" (junho 1924). Um passo essencial em sua abordagem era a substituição

de uma diferencial pela correspondente diferença. Assim, para uma função arbitrária  $\Phi(n)$  definida para estados estacionários de número quântico  $n$ , a diferencial  $\tau[\partial\Phi(n)/\partial n]$  deveria ser substituída pela diferença  $\Phi(n) - \Phi(n-\tau)$ . Uma substituição semelhante foi obtida para grandezas que não são definidas para um único estado estacionário, como a frequência da luz  $\nu$  [JAMMER, pp. 192-3].

Uma inovação desta "mecânica quântica" de Born era a introdução do princípio de correspondência nos próprios fundamentos da abordagem teórica, e não como regra a ser aplicada em cada caso particular [ver, porém, JAMMER, p. 199]. Heisenberg utilizou este método em um trabalho com Kramers sobre a refração da radiação por átomos, terminado em janeiro de 1925 durante uma estadia em Copenhague, e também em seu trabalho posterior no qual iria descobrir a chave da nova mecânica.

## 10. A Nova Regra de Multiplicação

Na primavera de 1925, Heisenberg teve que sair de Göttingen por causa de um ataque de alergia, se instalando na pequena ilha de Heligoland, onde não havia grama.

Ali, abandonou a abordagem da velha teoria quântica de descrever o movimento em termos da física clássica, e procurou uma descrição apenas em termos de "grandezas observáveis". Heisenberg rejeitou a noção clássica de posição de um elétron dentro de um átomo, já que até então não tinha sido possível medir essa grandeza diretamente, e também porque a teoria quântica que supunha que tais grandezas seriam observáveis não era satisfatória. Seu estudo sobre o problema da dispersão sugeriu que as grandezas observáveis relevantes seriam a frequência e a intensidade de radiação [JAMMER, p. 199]. Em retrospecto, pode-se dizer que Heisenberg errou ao negar que as coordenadas de um elétron sejam "observáveis", mas «este erro foi extremamente fértil, pois estimulou Heisenberg a procurar outras grandezas diretamente observáveis» [VAN DER WAERDEN, p. 33].

Acompanhemos a derivação de Heisenberg ao longo de cinco passos [ver JAMMER, pp. 200-2], prestando atenção às analogias entre o caso clássico e quântico:

(i) *Expansão de Fourier*. Uma variável periódica clássica  $\xi_n$  pode ser expressa por uma série de Fourier:

$$\xi_n = \sum_{\tau} a(n,\tau) \exp[2\pi i \nu(n,\tau) t] . \quad (\text{AH-II.2})$$

No caso,  $\xi_n$  é o momento de dipolo elétrico do oscilador virtual. Seguindo o método de substituição de diferenciais por diferenças, e usando a relação (II.1), Heisenberg representou a versão quântica para  $\xi_n$  por um conjunto de termos, ao invés de uma soma:

$$\xi_n \iff \{ a_{n,n-\tau} \exp[2\pi i \nu_{n,n-\tau} t] \} . \quad (\text{AH-II.3})$$

(ii) *Regra para Soma de Frequências*. No caso clássico (eq.II.2), as frequências da série de Fourier satisfazem  $\nu(n,\tau) = \tau \nu$ . Isso fornece a seguinte regra clássica de soma de frequências:

$$\nu(n,\tau) + \nu(n,\tau') = \nu(n,\tau+\tau') . \quad (\text{AH-II.4})$$

No caso quântico, por sua vez, os níveis de energia do átomo de Bohr somam-se da seguinte forma:  $E_{n,n-\tau} + E_{n-\tau,n-\tau'} = E_{n,n-\tau'}$ . Como  $E=h\nu$ , temos a seguinte regra de soma:

$$\nu_{n,n-\tau} + \nu_{n-\tau,n-\tau'} = \nu_{n,n-\tau'} . \quad (\text{AH-II.5})$$

(iii) *O Quadrado da Variável.* O quadrado da série clássica representada na eq.(II.2) é:

$$\xi_n^2 = \xi_n |_{t'} \cdot \xi_n |_{t-\tau'} = \sum_{\tau} \sum_{\tau'} a(n,\tau') a(n,\tau-\tau') \exp[2\pi i \nu(n,\tau') t] \exp[2\pi i \nu(n,\tau-\tau') t] . \quad (\text{AH-II.6})$$

Aplicando a regra de substituição (eq.II.1) a esta equação, obtém-se para o caso quântico:

$$\xi_n^2 \iff \left\{ \sum_{\tau} a_{n,n-\tau} a_{n,n-(\tau-\tau')} \exp[2\pi i \nu_{n,n-\tau} t] \exp[2\pi i \nu_{n,n-(\tau-\tau')} t] \right\} \quad (\text{AH-II.7})$$

(iv) *Aplicação da Regra da Soma.* Aplicando a eq.(II.4) para somar classicamente as frequências da eq.(II.6), obtém-se:

$$\xi_n^2 = \sum_{\tau} a^{(2)}(n,\tau) \exp[2\pi i \nu(n,\tau) t] . \quad (\text{AH-II.8})$$

O termo  $a^{(2)}(n,\tau')$  não precisa ser explicitado, para nossos propósitos.

Chegamos ao ponto crucial da derivação heurística de Heisenberg. Pela regra da substituição (eq.II.1), a versão quântica da eq.(II.8) deveria ser:

$$\xi_n^2 \iff \left\{ a_{-\tau} \exp[2\pi i \nu_{n,n-\tau} t] \right\} . \quad (\text{AH-II.9})$$

Mas esta expressão *não* segue da eq.(II.7) por meio da regra quântica de soma de frequências (eq.II.5)! A única maneira de usar tal regra de soma é modificando a eq.(II.7), alterando a frequência  $\nu_{n,n-(\tau-\tau')}$  para  $\nu_{n-\tau',n-\tau}$ .

(v) *Alteração das Amplitudes.* Ao fazer esta alteração nas frequências, é preciso fazer uma alteração análoga para as amplitudes da eq.(II.7), alterando  $a_{n,n-(\tau-\tau')}$  para  $a_{n-\tau',n-\tau}$ . A eq.(II.7) fica então:

$$\xi_n^2 \iff \left\{ \sum_{\tau} a_{n,n-\tau'} a_{n-\tau',n-\tau} \exp[2\pi i \nu_{n,n-\tau'} t] \exp[2\pi i \nu_{n-\tau',n-\tau} t] \right\} \quad (\text{AH-II.10})$$

Igualando-se as eqs.(II.9) e (II.10), obtém-se enfim a *nova regra de multiplicação de amplitudes*:

$$a_{n,n-\tau}^{(2)} = \sum_{\tau'} a_{n,n-\tau'} a_{n-\tau',n-\tau} \quad (\text{AH-II.11})$$

Esta era a chave da nova mecânica quântica! Com esta regra, Heisenberg pôde resolver o problema de quantização do oscilador anarmônico e o do rotor.

Tendo obtido este resultado em junho de 1925, o trabalho foi mandado para Born em julho.

## 11. Mecânica Matricial

Born: «Após enviar o artigo para ser publicado no *Zeitschrift für Physik*, eu comecei a ponderar sobre sua multiplicação simbólica, e logo eu estava tão envolvido que fiquei pensando o dia inteiro e mal pude dormir à noite. Pois eu sentia que havia algo de fundamental por trás... E certa manhã... Eu subitamente vi a luz: a multiplicação simbólica de Heisenberg nada mais era do que cálculo matricial, que eu conhecia bem desde meus dias de estudante nas palestras de Rosanes em Breslau» [Born, *in* VAN DER WAERDEN, pp. 36-37].

Logo em seguida Born expressou a coordenada  $\mathbf{x}$  e o momento conjugado  $\mathbf{p}$  como matrizes, e obteve a relação de comutação:

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = [h/(2\pi i)]\mathbf{I} \quad (\text{AH-II.12})$$

onde  $\mathbf{I}$  é a matriz unidade.

No dia 19 de julho, Born pegou um trem para Hannover, onde participaria da reunião da *Deutsche Physikalische Gesellschaft*. Encontrando Pauli no trem, « eu logo lhe contei sobre as matrizes e minhas dificuldades em achar o valor daqueles elementos não-diagonais. Eu lhe perguntei se ele gostaria de colaborar comigo neste problema. Mas ao invés do esperado interesse, eu recebi uma recusa fria e sarcástica. 'Sim, eu sei que você gosta de formalismos complicados e entediantes. Você só vai estragar as idéias físicas de Heisenberg com tua matemática fútil'.» Por acaso, Pascual Jordan também vinha no trem de Göttingen e escutou Born conversando sobre seus problemas. Ao final da viagem se apresentou, dizendo já ter experiência manipulando matrizes. Ele então se encarregou de demonstrar a relação de comutação, e juntos publicaram um trabalho recebido em setembro de 1925, lançando as bases da mecânica matricial.

Este trabalho foi continuado pelo "artigo-a-três-mãos" (*Drei-Männer-Arbeit*), Born, Heisenberg & Jordan (novembro 1925), que «generalizou os resultados para sistemas com um número arbitrário de graus de liberdade, introduziu transformações canônicas, lançou os fundamentos para a teoria quântica de perturbações independentes e dependentes do tempo, com a inclusão de casos degenerados, e discutiu o tratamento de momentos angulares, intensidade e regras de seleção do ponto de vista da mecânica matricial» [JAMMER, pp. 211-2].

A esta altura, Heisenberg se aliou a Pauli no desejo de tornar a teoria "mais física" em face ao formalismo matricial. Nesse sentido Pauli conseguiu mostrar, em janeiro de 1926, como obter o espectro do hidrogênio (resolvido na velha física quântica por Bohr) a partir da nova teoria. Seu trabalho foi importante para convencer a maioria dos físicos de que a mecânica quântica era correta [VAN DER WAERDEN, p. 58].

## 12. Álgebra Quântica

Em setembro de 1925, Ralph Fowler em Cambridge, Inglaterra, recebeu de Bohr as provas do artigo de Heisenberg e as mostrou para Paul Dirac, a quem orientara no doutorado. Inicialmente, Dirac «não viu nada de útil» no artigo, mas após duas semanas ele «viu que ele

fornevia a chave para o problema da mecânica quântica» [citado em JAMMER, p. 229]. Tendo bastante familiaridade com a formulação de Hamilton-Jacobi da mecânica clássica, Dirac conseguiu em poucas semanas estabelecer o elo de ligação entre a mecânica clássica e a quântica, utilizando um formalismo algébrico, sem ainda conhecer a versão matricial de Born & Jordan.

Escrevendo os "colchetes de Poisson" da mecânica clássica como  $\{x,y\}$ , utilizou o princípio da correspondência de Bohr para estabelecer a seguinte relação que generaliza as regras de comutação de Born:

$$xy - yx \iff i\hbar/(2\pi) \{x,y\} \quad (\text{AH-II.13})$$

Toda a mecânica clássica expressa pelos colchetes de Poisson podia ser incorporada na mecânica quântica, inclusive a equação de movimento de qualquer variável  $x$  em termos da hamiltoniana  $H$  do sistema:  $dx/dt = \{x,H\}$ . Enviou seu trabalho para publicação em novembro de 1925, uma semana antes do artigo-a-três-mãos.

### 13. Operadores

Born havia travado contato com o matemático norte-americano Norbert Wiener em Göttingen, em 1924, durante uma visita do pesquisador do M.I.T. No final de outubro de 1925, logo após o término da redação do artigo-a-três-mãos, Born foi para o M.I.T. (em Cambridge, do lado de Boston) e levantou a questão de como generalizar o cálculo matricial para englobar sistemas não-periódicos.

Wiener acabara de publicar um artigo sobre o cálculo de operadores, e imediatamente utilizou operadores para generalizar as matrizes. Assim, Born & Wiener puderam, em um artigo enviado em janeiro de 1926, expressar a hamiltoniana como o operador  $= \hbar/(2\pi i) d/dt$ . Eles chegaram perto de obter a expressão para o operador momento linear,  $= \hbar/(2\pi i) d/dq$ . «Mas nós não vimos isso. E eu nunca vou me perdoar, pois se houvésemos conseguido isso, nós teríamos tido toda a mecânica ondulatória a partir da mecânica quântica de uma só vez, alguns meses antes de Schrödinger» [Born 1962, *in* JAMMER, p. 223].

Note-se também que em dezembro de 1925, Kornel Lanczos mostrou que a mecânica matricial poderia ser formulada em termos de equações integrais, sendo assim a primeira formulação da MQ no contínuo. Este trabalho porém não causou o impacto que a formulação de Schrödinger em termos de equações diferenciais obteria no mês seguinte [JAMMER, p. 276].



# Capítulo III: O Desenvolvimento da Mecânica Ondulatória

## 1. Origens da Mecânica Ondulatória

O historiador da física Friedrich Hund, que na década de 20 era um conhecido físico na Alemanha, introduziu uma abordagem à história da MQ que tem deixado muitos historiadores de formação de cabelo em pé. Hund se pergunta se a história da MQ não poderia ser diferente, se ao invés de ter sido descoberta da maneira que de fato foi, estudos em um outro campo da física não poderiam ter levado a semelhante descoberta (Planck ou Bohr poderiam ter escolhido outra profissão).

De seu estudo [HUND, 1966] podemos concluir que haveria pelo menos 5 caminhos possíveis para a teoria quântica: 1) A aplicação da mecânica estatística de Boltzmann à radiação do corpo negro, como fez Planck; 2) A espectroscopia por si só poderia ter chegado em um princípio de correspondência, sendo para Hund o caminho alternativo mais viável; 3) A mecânica estatística de calores específicos a baixas temperaturas, formulada em 1907 por Einstein, poderia ter se antecipado a Planck; 4) A teoria química dos átomos poderia levar ao princípio de exclusão de Pauli, mas dificilmente à MQ; 5) A noção de dualidade onda-partícula no caso da luz poderia ter sido antecipada. Nevill Mott [1964, citado por JAMMER (1966), pp. 1-2] mencionou mais um: 6) Na teoria cinética dos gases, observava-se que qualquer energia transferida para uma molécula monoatômica aumentava apenas a energia cinética, e não a energia dos graus internos de liberdade. A partir disso, seria talvez possível inferir a quantização da energia dos átomos várias décadas antes de Bohr.

É possível elaborar um pouco mais o item (5), e mencionar os importantes trabalhos do matemático irlandês William Hamilton na década de 1830, que buscava encontrar uma única lei que regesse tanto a propagação de luz quanto o movimento das partículas. Comparando os princípios variacionais da óptica (Fermat, 1662) e da mecânica (Maupertuis-Euler, 1744), ele estabeleceu uma "analogia óptico-mecânica", e mostrou que a grandeza "ação" (integral temporal da energia) é análoga à fase em óptica. Para Hamilton, a mecânica newtoniana corresponderia à óptica geométrica, que é uma primeira aproximação à óptica ondulatória. Que extensão da mecânica clássica corresponderia à óptica ondulatória? [JAMMER, pp. 237-8]

## 2. Paradoxos Onda-Partícula

O ano de 1896 foi um marco na história da física experimental, com as descobertas do raio-X, da radioatividade e das propriedades corpusculares do elétron. A primeira hipótese sobre a natureza dos raios-X era de que tal radiação consistia de um impulso eletromagnético, e após a passagem do século estabeleceu-se uma analogia entre raios-X e raios- $\gamma$ . Estudos da interação destas raios com gases, no entanto, mostraram algumas propriedades estranhas.

Já em 1897, J. J. Thomson expressava o que tem sido chamado de "paradoxo da quantidade" [WHEATON, 1983, p. 76]: porque é que apenas uma parcela ínfima das moléculas de um gás é ionizada por raios-X, já que seria de se esperar que todas as moléculas seriam

afetadas igualmente pelo impulso de onda? Mais tarde em 1906 este problema foi encontrado por William Henry Bragg, que também formulou um "paradoxo da qualidade" [WHEATON, p. 86]: dado que a frente de onda de um impulso de raio-X se estende por uma área grande e apenas uma pequena parcela de sua energia deveria ser absorvida por uma molécula de gás, como é possível que toda a energia do impulso seja absorvida por uma única molécula?

Um modelo corpuscular da luz foi formulado por Einstein (1905), e interpretações corpusculares para o raio-X foram dadas por Bragg (1907) e por Stark (1909), mas estes modelos não conseguiam explicar o fenômeno da interferência, observado em raio-X em 1912, e assim eles tendiam a ser ignorados. No entanto, a confirmação experimental por Millikan (1916) da lei de Einstein para o efeito fotoelétrico, a observação do efeito fotoelétrico em raios-X e raios- $\gamma$  em 1921, e a explicação bem sucedida do efeito Compton a partir da mecânica clássica de partículas (1922-3) abriram o caminho para uma nova síntese.

### 3. A Dualidade Onda-Partícula

O Duque Maurice de Broglie era um físico experimental amador, um dos últimos desta espécie comum no século anterior. Participando das pesquisas com raios-X havia já uma década, ele se convenceu em abril de 1921, juntamente com seu irmão mais jovem, Louis, de que os raios-X são emitidos e absorvidos em quanta. Elaborou nos meses seguintes um experimento que comprovou a transferência quantizada de energia de raios-X para elétrons de órbitas internas (o efeito fotoelétrico para raios-X) [WHEATON, pp. 264-270].

Vemos assim que Louis de Broglie já estava acostumado com a natureza dualista da radiação, quando começou a publicar em 1922 seus estudos sobre o conceito de quantum de luz de Einstein. Ao tentar dar conta dos fenômenos ondulatórios da luz, passou a associar um "elemento de periodicidade" a cada quantum de luz. No entanto, ao usar a teoria da relatividade para calcular a frequência observada em um referencial em movimento, de Broglie obteve duas expressões discrepantes, uma utilizando a dilatação do tempo (a frequência relativística) e a outra unindo a variação relativística da energia com a relação quântica  $E=h\nu$  (a frequência quântica).

De Broglie então se deu conta de um estudo teórico de seu ex-professor Marcel Brillouin sobre ondas esféricas geradas em um meio por um elétron em órbita. De Broglie mostrou que apesar das duas frequências mencionadas acima diferirem, as duas oscilações se mantêm em fase em um ponto que se move no espaço, ponto este que seria justamente a posição da partícula (a "condição de sincronismo de fase"). Chegou assim no verão de 1923 à concepção de «uma onda fictícia associada ao movimento do ponto móvel» que se aplicaria a qualquer partícula, e cuja velocidade excederia a velocidade da luz (e por isso seria fictícia) na mesma proporção que esta excede a velocidade da partícula. Concluiu pois que «qualquer corpo em movimento pode ser acompanhado por uma onda [plana] e que é impossível separar o movimento do corpo da propagação da onda» [L. de Broglie 1923, citado em JAMMER, p. 244]. A partir daí aplicou a condição de sincronismo de fase aos elétrons em trajetória circular no átomo, obtendo os mesmos resultados da velha teoria quântica com a suposição de que a órbita só é estável quando a onda fictícia encontra o elétron em fase (com interferência construtiva) [WHEATON, pp. 286-297].

Desta maneira Louis de Broglie lançou a idéia inovadora da "dualidade onda-partícula": toda partícula ou forma de radiação se reduz a um móvel com uma onda associada. Este trabalho foi apresentado na sessão de 10 de setembro de 1923 da Academia de Ciências. Duas

semanas depois, identificou a velocidade da onda fictícia com "velocidade de fase", e a da partícula à "velocidade de grupo" da onda.

Para confirmar a relação  $\lambda = h/mv$  para o comprimento de onda, que ele apresentou em sua tese de doutorado em 1924, de Broglie previu que elétrons passando por um cristal deveriam exibir fenômenos ondulatórios como a difração. Isso foi confirmado por uma análise de experimentos já realizados feita por Walter Elsasser (aluno de Born, o qual conhecia o trabalho de de Broglie por intermédio de Einstein) e James Franck, publicada pelo primeiro em julho de 1925. Em 1927, os experimentos de Davisson & Germer e de G.P. Thomson verificaram conclusivamente a difração de elétrons [JAMMER, pp. 249-54].

#### 4. Mecânica Ondulatória

Os trabalhos de de Broglie estimularam vários físicos a procurar uma equação de onda para a mecânica, inspirados na analogia óptico-mecânica de Hamilton. Entre eles estavam Peter Debye e Erwin Schrödinger, ambos de Zurique, e Erwin Madelung, de Frankfurt. Schrödinger ficou sabendo do trabalho do francês ao ler o artigo de Einstein (de fevereiro 1925, no qual faz uso da estatística para quanta de luz desenvolvida pelo físico indiano Satyendra Bose), no qual mencionou que as concepções de de Broglie «envolvem mais do que mera analogia». Como se sabe, foi o físico austríaco quem conseguiu derivar a equação desejada.

Logo de início Schrödinger conseguiu generalizar as ondas de de Broglie para partícula ligadas, fazendo uso de seu conhecimento prévio de problemas de autovalores. Sua idéia era de que os estados estacionários de um átomo corresponderiam a modos normais de vibração da superposição de "ondas de fase". Ao tentar aplicar seu método para o elétron no átomo de hidrogênio, descreveu o movimento do elétron de maneira relativística, mas não conseguiu um resultado satisfatório, abandonou assim seu projeto. Alguns meses depois, foi convidado por Debye para apresentar um colóquio sobre o trabalho de de Broglie, e retornou ao seu método.

Desprezando os termos relativísticos na descrição do hidrogênio, conseguiu extrair do formalismo hamiltoniano a equação em  $\psi$ , restrita a valores únicos, finitos e contínuos, cujos autovalores correspondiam ao espectro desejado. Estes resultados foram recebidos para publicação nos *Annalen der Physik* em 27 de janeiro de 1926, dez dias após o recebimento do artigo de Pauli no *Zeitschrift für Physik*, no qual o espectro do hidrogênio era obtido através da mecânica matricial. «Mal é preciso salientar o quão gratificante seria conceber a transição quântica como uma mudança de energia de um modo vibracional para outro ao invés de considerá-la como um salto de elétrons» [citado em JAMMER, p. 261].

Na segunda parte do artigo, enviado em fevereiro, Schrödinger deriva sua equação independente do tempo:

$$\nabla^2 \psi + (8\pi^2 m/h^2) (E - V) \psi = 0 \quad (\text{AH-III.1})$$

O aspecto discreto da teoria quântica surge agora naturalmente das condições de contorno impostas à equação de onda, e não de uma condição de quantização.

A terceira e quarta partes deste artigo seriam publicadas em maio e junho, desenvolvendo a teoria de perturbações independente e dependente do tempo. Como na eq.(III.1) o autovalor de energia  $E$  varia ao se passar de um estado estacionário para outro, Schrödinger eliminou  $E$  através da definição da função de onda dependente do tempo,  $\Psi = \psi(x,y,z) \exp[2\pi i(E/h)t]$ , obtendo sua equação fundamental (válida também para potenciais  $V$

dependentes do tempo):

$$-\hbar^2/(8\pi^2m) \nabla^2 \Psi + V\Psi = \hbar/(2\pi i) \partial\Psi/\partial t \quad (\text{AH-III.2})$$

## 5. Interpretação Eletromagnética

A função  $\psi$ , que na 1ª comunicação não era interpretada, foi associada na 2ª parte a uma onda no "espaço de configurações" de  $3n$  dimensões, ou seja, no espaço gerado pelas 3 coordenadas de cada uma das  $n$  partículas compondo o sistema. Em março, Schrödinger apresentou a conexão formal entre sua teoria e a mecânica matricial (abordagens independentes foram feitas pelo norte-americano Carl Eckart e por Pauli). Neste trabalho, sugeriu que a parte real de  $\psi \partial \psi^* / \partial t$  corresponderia à densidade de carga elétrica  $\rho$ , o que explicaria a emissão de radiação eletromagnética por átomos. Logo viu, porém, que esta interpretação não poderia ser correta.

Na 4ª comunicação, ele passou a identificar  $e\Psi\Psi^*$  com  $\rho$ . Explicou que « $\Psi\Psi^*$  é uma espécie de *função de peso* no espaço de configurações do sistema. Para quem gosta de paradoxos, pode-se dizer que é como se o sistema estivesse simultaneamente em todas as posições cinematicamente concebíveis, mas não 'com o mesmo peso' em cada uma delas.» [Schrödinger 1926, citado em HENDRY 1984, p. 85]. No que tange à interpretação do "campo mecânico escalar"  $\Psi$ , de valores complexos, reconheceu que «tem sido salientado repetidas vezes que a função  $\Psi$  por si só não pode e não deve ser interpretada diretamente em termos do espaço tridimensional - por mais que o problema de um elétron pareça sugerir tal interpretação - porque em geral ela é uma função no espaço de configurações e não no espaço real» [citado por JAMMER, 1966, p. 267].

A partir da equação de continuidade  $\partial\rho/\partial t = -\nabla S$ , onde  $S$  é a densidade de corrente elétrica  $i\hbar e/(4\pi m) (\Psi\nabla\Psi^* - \Psi^*\nabla\Psi)$ , Schrödinger mostrou que estados estacionários do átomo correspondem a distribuições de corrente estacionárias, o que explicaria a ausência de emissão radiativa (não haveriam acelerações). Explicando corretamente também a polarização e intensidades associadas aos efeitos Zeeman e Stark para o hidrogênio, Schrödinger sentiu-se seguro em concluir que a mecânica quântica era uma teoria clássica de ondas, e que a realidade consiste apenas de ondas, não partículas [ver JAMMER 1974, pp. 24-27].

Para explicar o aspecto corpuscular de um elétron, Schrödinger introduziu a descrição por meio de "pacotes de onda". Em julho de 1926 publicou um trabalho no qual descreveu o que hoje se chamam "estados coerentes", pacotes de onda gaussianos no oscilador harmônico simples que oscilam sem alterar seu formato, se comportando classicamente. Supôs erroneamente que tais pacotes poderiam também ser construídos em outros sistemas [JAMMER 1966, pp. 281-3].

## 6. Recepção da Mecânica Ondulatória

O formalismo desenvolvido por Schrödinger foi recebido com grande entusiasmo, mas a questão da interpretação levantou reações diversas. Para avaliar essa situação, consideremos a comparação feita por JAMMER [1966, p. 271] entre as mecânicas ondulatória e matricial: «[A mecânica] de Heisenberg era um cálculo matemático, envolvendo quantidades e regras de

computação não-comutativas, raramente antes encontradas, que desafiava qualquer interpretação pictórica; era uma abordagem *algébrica* que, procedendo da observação de linhas espectrais discretas, enfatizava o elemento de *descontinuidade*; apesar de sua renúncia da descrição clássica no espaço e tempo, era finalmente uma teoria cuja concepção básica era o *corpúsculo*. A de Schrödinger, em contraste, era baseada no familiar aparato das equações diferenciais, próxima da mecânica clássica dos fluidos e sugerindo uma representação facilmente visualizável; era uma abordagem *analítica* que, partindo de uma generalização das leis clássicas de movimento, salientava o elemento de *continuidade*; e, como seu nome indica, era uma teoria cuja concepção básica era a *onda*.»

Einstein, por exemplo, recebeu a teoria de Schrödinger com grande entusiasmo, já que em 1920 ele afirmara não acreditar «que os quanta devem ser resolvidos desistindo-se do contínuo» [carta para Born, citado em JAMMER, 1966, p. 271]. Por outro lado, Pauli recusava-se a aceitar que «os fenômenos quânticos pudessem ser explicados em termos da física do contínuo», tendo em vista sua postura operacionalista. Heisenberg salientou que as promessas de "visualização" não poderiam se concretizar com uma função de onda complexa definida em um espaço multi-dimensional, e recusou sua interpretação em termos de uma distribuição de carga elétrica. Ao conhecer o físico austríaco em julho de 1926, concluiu que ele era um cara legal, mas 26 anos fora de época. O próprio Einstein (em maio de 1926), assim como Hendrik Lorentz e mesmo de Broglie, concluíram que a interpretação dada por Schrödinger era insustentável [ver citações em HENDRY, pp. 85-7].

## 7. A Regra Probabilista

Max Born, que mantinha boas relações com todas as partes, passou a adotar o formalismo da mecânica ondulatória em seus estudos sobre espalhamento, considerando esta abordagem «a mais profunda formulação das leis quânticas». No entanto, rejeitou a interpretação de Schrödinger, em parte por causa dos experimentos de colisão envolvendo elétrons realizadas por James Franck, em Göttingen, que para Born «apareciam como uma nova prova da natureza corpuscular do elétron».

Em junho de 1926 enviou para publicação um artigo no qual esboçou seu tratamento dentro da mecânica ondulatória para espalhamentos, hoje conhecido como a "aproximação de Born". «Se este resultado for traduzido em termos de partículas, apenas uma interpretação é possível», escreveu Born: a função de onda forneceria a probabilidade, ou como ele corrigiu em uma nota de revisão, o *quadrado da função de onda* forneceria a probabilidade para o elétron ser detectado em uma dada direção de espalhamento.

«A mecânica quântica de Schrödinger fornece portanto uma resposta bem definida sobre a questão envolvendo o efeito da colisão; mas não se coloca qualquer descrição causal. Não há resposta para a pergunta, 'qual é o estado após a colisão', mas somente para a pergunta, 'quão provável é um determinado resultado da colisão'... Aqui surge todo o problema do determinismo... Eu, de minha parte, estou inclinado a abandonar o determinismo no mundo dos átomos. Mas esta é uma questão filosófica para a qual argumentos físicos por si só não são suficientes» [Born 1926, in WHEELER & ZUREK 1983, p. 54].

Uma leitura atenta desta citação indica que Born ainda concebia que uma partícula espalhada se encontra em um estado clássico bem definido, estado este que no entanto permanece desconhecido após a colisão (e antes de se completar a medição). Em seu trabalho seguinte (julho 1926) escreveria: «O movimento das partículas se conforma às leis da

probabilidade, mas a probabilidade ela mesma é propagada de acordo com as leis da causalidade» [Born 1926, in JAMMER 1966, p. 285]. Esta frase parece atribuir uma espécie de realidade à noção de "probabilidade", tradicionalmente associada à ignorância do sujeito, de maneira semelhante à feita por Bohr, Kramers & Slater em relação ao campo virtual (ver seções I.7 e V.11).

Após o trabalho de Born, pelo menos mais duas interpretações a respeito da função  $\Psi$  foram publicadas, a interpretação hidrodinâmica de Erwin Madelung e a teoria da dupla solução de L. de Broglie [ver JAMMER 1974, pp. 33-38, 44-54]. Consideraremos alguns aspectos destas propostas no capítulo IX.

## 8. Diálogo Bohr-Schrödinger

Em setembro de 1926, Bohr convidou Schrödinger para passar algumas semanas em Copenhague, e as discussões entre os dois foram reconstituídas por Heisenberg:

Schrödinger: «Certamente você percebe que toda essa idéia de saltos quânticos está fadada ao absurdo [...] Este salto deveria ser gradual ou súbito? Se fosse gradual, a frequência orbital e a energia do elétron também deveriam se alterar gradualmente. Mas neste caso, como você explica a persistência de linhas espectrais nítidas? Por outro lado, se o salto for súbito, [...] devemos nos perguntar exatamente como é que o elétron se comporta durante o salto. Porque ele não emite um espectro contínuo, conforme exigido pela teoria eletromagnética? E quais leis governam o seu movimento durante o salto? [...]»

Bohr: «O que você diz está absolutamente correto. Mas isso não prova que não haja saltos quânticos. Prova apenas que não podemos imaginá-los, que os conceitos representacionais com os quais descrevemos os eventos da vida diária e dos experimentos de física clássica são inadequados quando usados para descrever os saltos quânticos. Nem deveríamos ficar surpresos com isso, dado que os processos envolvidos não são os objetos de nossa experiência diária.»

Schrödinger: «Eu não desejo entrar em longos argumentos sobre a formação de conceitos; prefiro deixar isto para filósofos. Eu só quero saber o que acontece dentro do átomo. Eu realmente não me importo com qual linguagem você escolhe para descrevê-lo [...] No momento em que mudamos de representação e falamos que não há elétrons discretos, mas apenas ondas de elétrons ou ondas de matéria, então tudo muda de figura. Não nos surpreendemos mais com as linhas nítidas. A emissão de luz é explicada tão facilmente quanto a transmissão de ondas de rádio [...], e o que pareciam ser contradições insolúveis de repente desaparecem.»

Bohr: «Eu discordo. As contradições não desaparecem, elas simplesmente são empurradas para o lado [...] Considere apenas o caso de equilíbrio termodinâmico entre o átomo e o campo de radiação - lembre, por exemplo, da derivação einsteiniana da lei de radiação de Planck. Esta derivação exige que a energia do átomo assuma valores discretos e mudem descontinuamente de tempo em tempo; valores discretos de frequências não nos ajudam aqui [...] E além disso, podemos ver as inconstâncias, os saltos súbitos em fenômenos atômicos, de maneira bastante direta - por exemplo quando observamos súbitos brilhos de luz em uma tela de cintilação, ou a corrida repentina de um elétron através de uma câmara úmida. Você não pode simplesmente ignorar estas observações e fingir que elas não existem.»

Schrödinger: «Se toda essa maldita pulação quântica realmente estivesse aqui para ficar, eu lamentaria ter algum dia me envolvido com a teoria quântica!»

Bohr: «Mas nós outros estamos extremamente agradecidos que você se envolveu; sua mecânica ondulatória tem contribuído tanto para a clareza e simplicidade matemática que ela representa um avanço gigantesco sobre todas as formas anteriores de mecânica quântica!» [Heisenberg 1971, in FRENCH & KENNEDY, pp. 164-6].

## 9. Teoria da Transformação

Em uma carta a Heisenberg no final de 1926, Pauli escreveu que «a interpretação de Born pode ser vista como um caso especial de uma interpretação mais geral; assim, por exemplo,  $|\psi(p)|^2 dp$  pode ser interpretado como a probabilidade de que uma partícula tenha momento entre  $p$  e  $p + dp$ » [citação em JAMMER, 1966, p. 305]. Esta noção inspirou Jordan a desenvolver em dezembro de 1926 a chamada "teoria da transformação", simultaneamente a Dirac, e alguns meses após a análise menos geral de Fritz London.

Em poucas palavras essa teoria pode ser descrita como o estudo das transformações que deixam invariantes as previsões empíricas da teoria quântica. De acordo com a notação usada por Dirac,  $\langle \alpha | \beta \rangle$  representa uma "função de transformação" de uma base de auto-estados para outra. Por exemplo, um auto-estado da equação de onda de Schrödinger  $\psi_E(q)$  nada mais seria do que  $\langle E | q \rangle$ , a transformação da representação de coordenadas  $q$  para a representação de energia  $E$  (na qual a matriz representando o operador hamiltoniano é diagonal). Tais coeficientes «que permitem transformar de um conjunto de matrizes para outro são justamente aqueles que determinam as probabilidades de transição» [Dirac 1926, citado em JAMMER, 1966, p. 305].

Como um exemplo envolvendo variáveis contínuas, podemos citar a transformação da função de onda  $\psi(q)$  definida no espaço de configurações para a função  $\psi(p)$  definida no espaço de momentos, através de uma transformada de Fourier:

$$\psi(p) = \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[-2\pi i p q / h] \psi(q) dq \quad (\text{AH-III.3})$$

A regra de Born foi assim generalizada para qualquer transformação de representação, e a equação de autovalores (AH-III.1) usada por Schrödinger para o operador energia (na representação de coordenadas) passou a poder ser usada para qualquer operador auto-adjunto independente da representação. A noção de "observável", anteriormente associada à energia, pôde ser estendida para qualquer grandeza representável por um operador auto-adjunto, como a posição ou o momento. Tal teoria permitiu enfim calcular a probabilidade de se obter um determinado resultado em *medições sucessivas* de *dois* observáveis quaisquer.

O passo seguinte para estabelecer os fundamentos matemáticos da MQ foi dado pela teoria da transformação de David Hilbert e seus alunos Lothar Nordheim e o húngaro Johann von Neumann. No entanto, a dificuldade em se definir de maneira rigorosa os autoestados do operador de posição, a função delta  $\delta(x - x_0)$  usada por Dirac, levou von Neumann a desenvolver entre 1927-29 um novo formalismo matemático para a MQ baseado no que chamou de "espaço de Hilbert" [ver JAMMER, 1966, pp. 307-22].

## Bibliografia

- FRENCH, A.P. & KENNEDY, P.J. (orgs.) (1985): *Niels Bohr: A Centenary Volume*, Harvard University Press, Cambridge.
- HENDRY, J. (1984): *The Creation of Quantum Mechanics and the Bohr-Pauli Dialogue*, Reidel, Dordrecht (Holanda).
- HUND, F. (1966): "Paths to Quantum Theory Historically Viewed", *Physics Today* 19(8), 23-29.
- JAMMER, M. (1966): *The Conceptual Development of Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, New York.
- JAMMER, M. (1974): *The Philosophy of Quantum Mechanics*, Wiley, New York.
- VAN DER WAERDEN, B.L. (org.) (1967): *Sources of Quantum Mechanics*, North-Holland, Amsterdam.
- WHEATON, B.R. (1983): *The Tiger and the Shark: Empirical Roots of Wave-Particle Dualism*, Cambridge University Press.
- WHEELER, J.A. & ZUREK, W.H. (orgs.) (1983): *Quantum Theory and Measurement*, Princeton University Press.