



## SEARA DA CIÊNCIA CURIOSIDADES DA FÍSICA

José Maria Bassalo



### A Mecânica Quântica Matricial. .

A **Mecânica Quântica Matricial** foi desenvolvida em uma série de trabalhos, cuja reprodução e alguns comentários podem ser vistos no livro **Sources of Quantum Mechanics** (Dover, 1968), escrito pelo físico holandês Bartel Lendert van der Waerden (1903-1996). Outros comentários desses trabalhos podem também ser vistos no livro **Uncertainty: The Life and Science of Werner Heisenberg** (W. H. Freeman and Company, 1992), do historiador da ciência norte-americano David C. Cassidy (n.1945). Vejamos como se desenvolveu o desenvolvimento daquela Mecânica. O físico germano-inglês Max Born (1882-1970; PNF, 1954), na primeira metade da década de 1920, interessou-se em estender o modelo quântico de Bohr-Wilson-Ishiwara-Sommerfeld, hoje conhecido como velha teoria quântica (desenvolvida no período 1913-1916), aos sistemas com vários elétrons, como, por exemplo, o átomo de hélio (*He*). Para isso, Born adaptou os métodos clássicos de perturbação usados pelos astrônomos, aos sistemas atômicos, em três artigos. O primeiro, em 1922 (*Zeitschrift für Physik* 10, p. 137), em colaboração com o físico austro-norte-americano Wolfgang Pauli Junior (1900-1958; PNF, 1945), e os dois seguintes, em 1923 (*Zeitschrift für Physik* 14; 16, pgs. 44; 229), com a participação do físico alemão Werner Karl Heisenberg (1901-1976; PNF, 1932). Como os resultados de tais métodos perturbativos foram razoáveis, já que conseguiram explicar alguns resultados experimentais, Born convenceu-se de que era necessária uma mudança radical nos fundamentos da Teoria Quântica Planckiana-Bohriana, e que tal mudança deveria ser feita por intermédio de um novo tipo de Mecânica.

Com essa idéia em mente, em 1924 (*Zeitschrift für Physik* 26, p. 379), Born apresentou essa nova formulação a qual deu o nome de **Mecânica Quântica**. Nessa formulação, ele assumiu que um átomo em um estado estacionário pode ser substituído por um conjunto de "osciladores virtuais" cujas frequências satisfaziam as "condições de frequência do modelo de Bohr", propostas em 1913, isto é:

$$\nu(n, n') = |W(n) - W(n')| / h,$$

onde  $W(n, n')$  representam as energias dos elétrons nas órbitas ( $n, n'$ ). Aliás, com essa nova formulação quântica, obteve os mesmos resultados que o físico holandês Hendrik Anthony Kramers (1894-1952) obtivera no seu tratamento quântico da dispersão, realizado também em 1924 (*Nature* 113, p. 673). Registre-se que, nesse seu trabalho, Born agradece ao seu assistente Heisenberg, por alguns cálculos realizados. Note-se que Heisenberg tornou-se assistente de Born, em Göttingen, em outubro de 1923.

No dia 11 de junho de 1925, a *Zeitschrift für Physik* (ZfP) recebeu um artigo de Born, no qual havia estudado, junto com seu colaborador, o físico alemão Ernst Pascual Jordan (1902-1980), os sistemas quânticos aperiódicos. Nesse artigo, que foi publicado na ZfP 33, p. 479, ainda em 1925, eles estudaram os cálculos que o físico alemão Max Karl Ernst Planck (1858-1947; PNF, 1918) fizera ao estudar a interação da luz com a matéria. Nesse trabalho, Born e Jordan utilizaram novas grandezas por eles denominadas de **quantidades de transição**, ocasião em que verificaram, com surpresa, que as mesmas correspondiam aos quadrados das amplitudes de vibração das fórmulas clássicas utilizadas por Planck. Ao discutir esse trabalho com Heisenberg, Born disse-lhe que essas novas grandezas físicas, que se relacionavam com as **amplitudes de transição** (de absorção ou de emissão de luz), se constituíam no cerne de sua nova Mecânica, proposta em 1924, faltando apenas determinar o tipo de álgebra que as ligava.

Em fins de maio de 1925, segundo o livro de Heisenberg intitulado **Physics and Beyond: Encounters and Conversations** (Harper & Row, 1971) [**Diálogos sobre Física Atômica** (Verbo, 1975)]; ou em junho de 1925, segundo o livro de van der Waerden; ou em uma certa data na primavera de 1925, de acordo com o livro de Cassidy, Heisenberg teve um ataque de febre de feno que o obrigou a refugiar-se na ilha de

Helgoland, no Mar do Norte, em busca ares do mar. Em lá chegando, aconteceu um fato inusitado. A dona da casa, na qual alugara um quarto, ao vê-lo com o rosto inchado, aconselhou-lhe para não brigar com mais ninguém, pois pensara que Heisenberg tinha brigado com alguém na noite anterior.

Nos dias (cerca de dez) em que ficou naquela ilha, Heisenberg começou a desenvolver suas próprias idéias sobre a Mecânica Quântica Borniana. Segundo seu registro no livro de memórias referido acima, durante as viagens diárias que fazia pelas montanhas, ele (Heisenberg) pensava no formalismo matemático usado no cálculo dos níveis de energia do hidrogênio ( $H$ ) por intermédio do modelo quanto-atômico de Bohr-Wilson-Ishiwara-Sommerfeld, e percebia que ele envolvia quantidades que são, em princípio, aparentemente inobserváveis, tais como: a posição e o período de revolução de um elétron em suas órbitas propostas por aquele modelo. Desse modo, passou a desenvolver um outro formalismo quântico envolvendo, apenas, quantidades físicas observáveis de um átomo, como, por exemplo, os seus níveis de energia, além das frequências, intensidades e polarização da radiação atômica.

Para chegar a esse novo formalismo, Heisenberg substituiu os **coeficientes de Fourier** da Teoria Clássica da Radiação - que representam as amplitudes de radiação - por novos entes matemáticos dependentes dos números quânticos ( $n, n$ ), característicos dos níveis de energia envolvidos na radiação, substituição essa ditada pelo Princípio da Correspondência - o elo entre a física clássica e a física quântica -, que havia sido proposto pelo físico dinamarquês Niels Henrik David Bohr (1885-1962; PNF, 1922), em 1923 (*Proceedings of Physical Society of London* 35, p. 275). Note-se que essa substituição também foi considerada por Born, em seu artigo de 1924.

Esses novos entes matemáticos trabalhados por Heisenberg eram arranjados em uma tabela ("array") de  $n$  linhas e de  $m$  colunas, sendo os seus elementos diagonais relacionados com os estados estacionários, e os não-diagonais, com transições entre estados estacionários diferentes. Além do mais, o produto desses novos entes gozava da propriedade de não-comutatividade. Assim, de posse desse seu formalismo, Heisenberg encontrou a condição quântica que deveria substituir a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld. No entanto, ele precisava obter novos resultados, também já conhecidos, como a famosa **regra da soma de Kuhn-Thomas** e a **teoria da dispersão de Kramers**, esta referida anteriormente. Observe-se que a regra citada acima havia sido encontrada em trabalhos distintos, em 1925, pelo físico-químico suíço Werner Kuhn (1899-1963) (*Zeitschrift für Physik* 33, p. 408) e por Willy Thomas (*Naturwissenschaften* 13, p. 627). É interessante notar que Heisenberg teve de fazer um truque matemático para obter esses novos resultados, qual seja, o de obter a derivada de sua condição quântica e substituir tal derivada por uma diferença.

Já em Göttingen, Heisenberg concluiu, por volta do dia 12 de julho de 1925, a versão final do artigo que havia iniciado em Helgoland, e entregou-o a Born, pedindo-lhe sua opinião. Ao lê-lo, Born percebeu que Heisenberg havia encontrado a álgebra que estava procurando entre suas "amplitudes de oscilação" ou "quantidades de transição". Tratava-se do cálculo matricial que o matemático inglês Arthur Cayley (1821-1895) inventara em 1858, e que ele havia estudado com o matemático alemão Jacob Rosanes (1842-1922), em Breslau. Concluída a leitura, ele enviou esse trabalho de Heisenberg para a revista *Zeitschrift für Physik*, que a recebeu no dia 29 de julho de 1925 e a publicou no volume 33, p. 879, ainda em 1925.

Born tentou repetir os cálculos de Heisenberg usando o formalismo matricial. No primeiro instante, só conseguiu calcular os elementos diagonais das matrizes trabalhadas por Heisenberg. Contudo, como não conseguiu calcular os elementos não-diagonais, intuiu que eles eram nulos. Ao encontrar-se com Pauli em uma viagem de trem que fizera entre Göttingen e Hannover, tentou convencer seu primeiro colaborador para, juntos, realizarem um trabalho com o fim de calcular os elementos não-diagonais. Pauli respondeu-lhe: *Sim, eu sei que você gosta de formalismos tediosos e complicados. Você vai desperdiçar as idéias físicas de Heisenberg com esta matemática fútil.* Porém, convencido de sua idéia, pediu a Jordan, seu antigo colaborador, que fizesse tais cálculos. Depois de alguns dias, Jordan voltou com os cálculos, mostrando que a matriz deveria ser diagonal (elementos não-diagonais nulos) devido às equações canônicas do movimento do elétron no átomo. Assim, no dia 27 de setembro de 1925, a *Zeitschrift für Physik* recebeu para publicação o célebre trabalho de Born e Jordan, intitulado *Zur Quantenmechanik*, no qual o formalismo quântico Heisenbergiano é todo desenvolvido com o auxílio do cálculo matricial. Esse artigo foi publicado no volume 34, p. 858, também em 1925. Aliás, nesse artigo, foi demonstrada pela primeira vez a

relação:  $pq - qp = (h / 2\pi i) \mathbb{1}$ , onde  $p$  e  $q$  são matrizes, representativas do momentum e posição canonicamente conjugados, e  $\mathbb{1}$  é a matriz unitária.

Em 7 de novembro de 1925, a *Royal Society of London* recebeu um trabalho, que havia sido enviado pelo físico inglês Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984; PNF, 1933). Nele, Dirac apresentou uma nova formulação da Mecânica Matricial, ao procurar uma conexão entre ela e a Mecânica Hamiltoniana (MH). Desse modo, os novos entes matemáticos encontrados por Dirac nesse trabalho, que correspondiam às "quantidades de transição Bornianas") (por exemplo,  $x$  e  $y$  representando duas variáveis quaisquer do sistema atômico) usadas por Heisenberg, apresentavam um produto não-comutativo, cuja diferença  $xy - yx = [x, y]$ , (definido como comutador), no limite clássico, correspondia ao **parênteses ("brackets") de Poisson**:

$$\sum_i \left( \frac{\partial x}{\partial q_i} \frac{\partial y}{\partial p_i} - \frac{\partial x}{\partial p_i} \frac{\partial y}{\partial q_i} \right) = [x, y] \Rightarrow \frac{2\pi}{i\hbar} [x, y]$$

onde  $q_i$  e  $p_i$  são as variáveis canonicamente conjugadas da MH. Registre-se que esse artigo foi publicado nos *Proceedings of the Royal Society of London* A109, p. 642, em 1925. Registre-se, também, que foi o físico inglês Sir Ralph Howard Fowler (1889-1944) quem ensinou a Mecânica Matricial para Dirac. Logo em janeiro de 1926 (*Proceedings of the Royal Society of London* A110, p. 561), Dirac aplicou essa sua Mecânica Quântica ao átomo de hidrogênio, ocasião em que denominou os entes matemáticos que havia trabalhado de **q-números**, números cujo produto era não-comutativo. Com isso, ele diferenciou-os dos **c-números**, números que têm o produto comutativo.

Em 16 de novembro de 1925, a *Zeitschrift für Physik* recebeu o trabalho assinado por Born, Heisenberg e Jordan, intitulado **Zur Quantenmechanik II**, no qual estenderam a Mecânica Quântica Matricial a sistemas com diversos graus de liberdade, bem como a utilização da Teoria de Perturbação a sistemas degenerados e não-degenerados, com aplicação à teoria Planckiana do corpo negro. Nesse artigo, que foi publicado no volume 35, p. 557, em 1926, eles apresentaram as relações de comutação para o momento angular  $\vec{L}$  de um sistema de muitas partículas:

$$[L_x, L_y] = \frac{\hbar}{2\pi i} L_z, \quad [L_x, L_z] = \frac{\hbar}{2\pi i} L_y, \quad [L_y, L_z] = \frac{\hbar}{2\pi i} L_x$$

É oportuno registrar que, em 1926 (*Zeitschrift für Physik* 36, p. 336), Pauli usou a Mecânica Matricial de Born-Heisenberg-Jordan para estudar o átomo de hidrogênio ( $H$ ) em um campo eletromagnético cruzado. Também, em 1926, conforme vimos em um outro verbete, o físico austríaco Erwin Schrödinger (1887-1961; PNF, 1933) desenvolveu a **Mecânica Quântica Ondulatória**, que é isomorfa com a Mecânica Matricial, conforme o próprio Schrödinger, Pauli e o físico norte-americano Carl Eckart (1902-1976), demonstraram, em trabalhos distintos, publicados ainda em 1926.