

Fundamentação Clássica de Alfred Landé para a Mecânica Quântica

B. J. Mokross

*Instituto de Física de São Carlos, Universidade de São Paulo
Caixa Postal 369, CEP 13560-970, São Carlos, SP, Brasil*

Recebido em 2 de setembro, 1998

As teorias quânticas desenvolvidas por Heisenberg, Schrödinger e outros, são estruturas matemáticas que prevêm fenômenos em escala atômica com uma precisão jamais vista em outras teorias. Usualmente são interpretadas segundo a Escola de Copenhague que prega a adaptação da lógica e da linguagem ao formalismo quântico na tentativa de unificar conceitos contraditórios ou excludentes, como por exemplo, a dualidade de partícula-onda. A fim de evitar este malabarismo lógico-filosófico-semântico Alfred Landé propõe três postulados não-quânticos a partir dos quais obtém resultados quânticos básicos que são os fundamentos de todas as formulações quânticas.

Quantum Mechanics as developed by Heisenberg, Schrödinger and others are mathematical structures able to solve physical phenomena in the realm of atomic scale with a precision unmatched by any other theory. The most disseminated physical interpretation of these theories was provided by Niels Bohr by what became to be known as the Copenhagen School which, by means of "language adaptations" and by questioning the meaning of reality, united conflicting concepts as for instance the wave-particle duality. In order to avoid this logic-semantic-philosophical conundrum Alfred Landé, by starting from three simple non-quantal postulates, shows how to obtain basic quantum results on which rest all known quantum formulations.

I Introdução

É habitual abordar o estudo da Mecânica em função das dimensões do objeto em análise: no caso de fenômenos microscópicos (dimensões atômicas) são as leis da Mecânica Quântica (MQ) que resolvem o problema. Para objetos macroscópicos, isto é, objetos com dimensões que abrangem desde grãos de areia até o nosso sistema solar, a Mecânica Clássica (MC) de Newton, com poucas exceções, é plenamente satisfatória. Para dimensões interestelares e intergaláticas surgem desvios às leis de Newton que são explicados pela Mecânica Relativística (MR) de Einstein. De maneira geral, podemos então concluir que a opção por esta ou aquela mecânica (clássica, quântica ou relativística) deve ser feita em função das dimensões do sistema sob consideração. Uma vez que cada uma destas teorias se fundamenta sobre postulados e axiomas próprios, elas são capazes de prever fenômenos e efeitos às vezes imprevisíveis pelas outras teorias.

A MC, estabelecida com a publicação das Leis de Newton em 1687, além de ser a gênese da ciência moderna, demonstrou, sem violar a lógica ou a filosofia prevalescente na época, a possibilidade de se explicar a partir de alguns poucos axiomas e postulados (massa, força, aceleração, ação instantânea, tempo e

espaço absoluto, relatividade Galileana, etc.) inúmeros fenômenos naturais. A aceitação imediata do trabalho de Newton não se deve apenas ao seu espetacular sucesso ao explicar o movimento dos corpos celestes, mas também por motivos de natureza mais sutil. O crescimento geométrico e o volume de descobertas e invenções que se verificaram desde a Renascença ansiavam por um elemento que funcionasse como um substrato aglutinador. Os postulados e os conceitos empregados por Newton, apesar de abstratos, não violentavam e nem entravam em conflito direto com o conhecimento da época ao contrário do que aconteceu com as descobertas de Galileu. A publicação da *Principia* de Newton em 1687 veio no momento certo para um público receptivo e bastante preparado. Seguiu-se então um longo período de tranquilidade no mundo científico até que, em 1911, a publicação da Teoria da Relatividade Restrita de Einstein trouxe um pequeno abalo. A fim de explicar algumas anomalias astronômicas, como por exemplo o atraso na precessão do periélio do planeta Mercúrio, Einstein teve que questionar os conceitos Newtonianos de espaço e tempo que devido à sua aplicação com sucesso por centenas de anos, apesar de abstratos, adquiriram status de conceitos óbvios e incontestáveis e os embaralhou genialmente no espaço-tempo quadridimensional. Inicialmente houve uma certa indignação, entretanto, com

as confirmações experimentais feitas por Eddington em 1917, a teoria foi aceita sem maiores prejuízos. Apesar de um pouco estranho, o postulado da velocidade da luz como sendo uma velocidade limite, acabou sendo bem aceito pois eliminava a necessidade da ação instantânea à distância reforçando o conceito de causalidade. A MR se apresentava como uma generalização da MC.

Nesta mesma época surgiram os primeiros embriões da MQ. Em 1900 Max Planck avança a possibilidade da discretização da energia eletromagnética. Em 1905 esta idéia é utilizada por Einstein para explicar o efeito fotoelétrico e em 1913 Niels Bohr elabora a teoria sobre o espectro de absorção do átomo de hidrogênio com base em órbitas eletrônicas estáveis sem irradiar energia. Estes fenômenos requeriam uma série de pressupostos (órbitas eletrônicas estáveis e conservativas, energias e momentos angulares discretos, natureza ondulatória da propagação de partículas, etc.) que eram conflitantes com a MC. Em 1925 Heisenberg apresenta a Mecânica Quântica Matricial e alguns meses depois Schrödinger elabora uma teoria equivalente, a Mecânica Quântica Ondulatória, que a partir de alguns axiomas e postulados estabelecem uma estrutura matemática capaz de explicar todos os fenômenos quânticos que se multiplicavam. Estas duas teorias juntamente com outras formulações posteriores (de Schwinger, de Feynmann, de Dirac, etc.) vieram a constituir ao que hoje se denomina Mecânica Quântica Moderna, e apesar dos inúmeros progressos que se verificaram na área, ainda persiste uma grande profusão de problemas lógicos e conceituais que angustiam os cientistas até a presente data.

Em 1927 no Congresso de Volta em Como na Itália, Niels Bohr [1] propõe o seu famoso “Princípio da Complementaridade” como uma solução para acomodar contradições aparentes que surgem na interpretação dos fenômenos atômicos. Segundo seus argumentos, evidências experimentais nos obrigam a relegar como inócua qualquer tentativa para determinar a constituição da matéria, isto é, se são ondas ou partículas. Seria necessário substituir estas concepções excludentes e bem definidas por “quadros” alternativos em que o aspecto “partícula” e o aspecto “onda” se manifestariam em decorrência do tipo de observação em andamento. Esta idéia de quadro dual de partícula-onda é sintetizado no experimento da difração de elétrons ou fótons através de uma fenda dupla. No caso da abertura de apenas uma das fendas os elétrons se difratam em uma faixa que contém um máximo na posição frente à fenda. o mesmo ocorre deixando aberta apenas a outra fenda. No caso de se manter as duas fendas abertas ocorre o inesperado: ao invés de se obter uma soma das duas distribuições obtém-se uma distribuição de elétrons que apresenta máximos e mínimos que se alternam. Lugares onde havia incidência ao manter apenas uma fenda aberta passam a ser inacessíveis quando ambas estão abertas (uma explicação mais detalhada

do experimento de duas fendas pode ser encontrada na Ref. [2]). A mais direta e a mais simples (e talvez a mais ingênua) explicação para este fenômeno é, sem dúvida nenhuma, a suposição da transformação temporária dos elétrons em ondas que se estendem por todo o espaço e que após atravessarem simultaneamente as duas fendas interferem construtiva e destrutivamente. Naturalmente, antes de atingirem o painel de detecção é necessária uma nova metamorfose: agora os elétrons que são ondas estendidas no espaço voltam a se transformar em partículas, pois é necessário individualizar o local de impacto.

Estas idéias, um tanto quanto extravagantes, eram de certa forma legitimizadas pela hipótese lançada por Louis deBroglie em 1923 [3] segundo a qual cada partícula ao se propagar teria o seu momento associado a uma onda pela equação $p = h/\lambda$. Esta idéia evoluiu ao ser incorporada na equação de Schrödinger em 1926 [4] e mais tarde estendida relativisticamente por Dirac. Uma das mais rebuscadas interpretações para o aspecto ondulatório do momento linear foi apresentada por David Bohm em 1952 [5], ao expressar a função de onda por uma parte real e outra puramente imaginária. Introduzindo esta função de onda na equação de Schrödinger e separando as partes real e imaginária, obteve uma expressão que lhe permitiu generalizar o potencial clássico que ele denominou de potencial quântico. Dentro desta visão a dualidade partícula-onda (ondícula ou partonda) fica reduzida a partículas reais cuja dinâmica além de ser determinada pelo potencial clássico é influenciada adicionalmente pelo potencial quântico. Ou ainda, a natureza da entidade que se desloca seria uma partícula (na concepção clássica do termo) associada a uma onda “piloto” responsável pelas características quânticas do movimento. A interpretação de Bohm recupera a noção clássica de trajetória e estabelece a causalidade nos fenômenos quânticos (os aspectos indeterminísticos são relegados a uma distribuição estocástica das posições iniciais) mas perde ao aceitar a não-localidade (imposta pelo potencial quântico). A Ref. [2] contém um resumo bastante compreensível da teoria de Bohm.

A interpretação de Bohm apresenta sem dúvida alguma alguns progressos conceituais em relação à Escola de Copenhagen. Para isto basta meditar sobre o que esta entende por realidade objetiva das partículas atômicas [1,6]:“seja o caso de um elétron ou de um fóton, eles não podem ser ditos como sendo “existentes” no sentido usual da palavra. São um conjunto de relações matemáticas que conectam observações diferentes (positivismo lógico). Elétrons, fótons, etc. devem ser considerados como modelos úteis que consolidam na nossa imaginação aquilo que na realidade é um conjunto de relações matemáticas conectando observações” (!).

Estas interpretações (entre outras ainda mais complexas) são consequência direta do fato empírico apre-

sentado pelo comportamento estatístico de partículas que em determinados experimentos (difração por dupla fenda) apresentam aspectos de interferência ondulatória (regiões de máximos e mínimos de partículas). É por estas razões que surgiu o termo “dualidade partícula-onda” e a sua aceitação como sendo um “conceito básico do conhecimento que pela sua legitimização empírica requeria uma revisão da lógica clássica e a unificação de aspectos contraditórios em realidades físicas” [6]. A idéia de complementaridade entre partícula e onda passou a ser aceita como um princípio fundamental da natureza isto é, como sendo uma característica intrínseca do microcosmos, que além da física sem dúvida alguma deveria apresentar ramificações em outras áreas do conhecimento humano. Esta situação prevalece por mais de meio século de física quântica e até o presente, grande parte da comunidade científica, ainda aceita estas interpretações que levam, para dizer o mínimo, a conclusões um tanto quanto estranhas ou espetaculares. Este ambiente confuso e extravagante fez com que Alfred Landé refletisse sobre esta dualidade mágica especulando se ela não poderia ser reduzida para axiomas e postulados fundamentais básicos, simples e de natureza quase auto-evidente, passíveis de serem reconhecidos como uma necessidade ao invés de uma aberração. Sua atitude é oposta à adotada pela grande maioria dos físicos modernos que quando não abraçam as idéias da Escola de Copenhagen se atém ao sucesso proporcionado pelas diversas estruturas matemáticas (que explicam e prevêem fenômenos quânticos com precisão jamais vista em outras teorias) abstendo-se de interpretar (ou entender¹) a MQ a partir de uma fundamentação consistente.

Apresentamos em seguida os argumentos desenvolvidos por Alfred Landé. Para uma leitura ou estudo mais abrangente indicamos as Refs. [7-10].

II Os Postulados de Landé

A MQ surgiu como uma necessidade para explicar uma série de fenômenos que ocorrem no domínio atômico e que não podem ser explicados pela MC. Para estabelecer os postulados, essenciais para uma nova fundamentação da MQ, Landé utiliza o recurso de ‘experimentos imagináveis’ (Gedankenexperimente) que é um procedimento de grande auxílio para a conceituação de novas idéias. Desta maneira, os ‘experimentos imagináveis’, que serão expostos a seguir, correspondem a experimentos reais que podem ser executados em laboratório mas que se atém apenas aos aspectos essenciais para simplificar a argumentação. Dentro desta perspectiva o ‘experimento imaginário’ de que Landé se utiliza é o seguinte. Suponhamos que átomos da mesma espécie

têm diversas grandezas físicas A, B, C, \dots cujos valores podem ser aferidos mediante medidores da propriedade A , da propriedade B , e assim por diante. O medidor- A ao testar o átomo revela que a propriedade A pode ter qualquer um dos valores possíveis, isto é, A_1, A_2, A_3, \dots ou A_M , onde M é o número de estados da propriedade² A . Para a propriedade B as coisas ocorrem de maneira similar. O medidor- B pode detetar um dos vários valores possíveis de B , isto é, B_1, B_2, B_3, \dots ou B_N . Até este ponto não há nenhum conflito com medidas efetuadas em sistemas clássicos. Entretanto, no domínio atômico, os observáveis apresentam uma propriedade que não tem paralelo na MC: existe uma conexão probabilística entre os valores dos observáveis A e B que é a seguinte.

Se o resultado da medida da propriedade A (efetuada com o medidor- A) for A_α e se logo em seguida efetuarmos uma medida da propriedade B não podemos prever qual será o resultado. O resultado pode ser qualquer um dos valores possíveis de B , isto é, B_1, B_2, B_3, \dots ou B_N . Se efetuarmos uma série destas medidas obteremos para B resultados que apresentam uma distribuição estatística com probabilidades que designamos por $P(A_\alpha \rightarrow B_\beta)$, onde A_α e B_β são estados possíveis de A e de B . É importante observar que as medidas de B sempre são efetuadas a partir do átomo preparado no estado A_α . A soma sobre todos os possíveis β será a unidade,

$$\sum_{\beta=1}^N P(A_\alpha \rightarrow B_\beta) = 1 \quad \text{para } \alpha = 1, 2, \dots, M. \quad (1)$$

Suponhamos agora que o átomo no estado A_α é submetido a uma medida da propriedade B resultando o estado B_β . Medindo logo em seguida a propriedade A constataremos que o átomo perdeu toda a ‘memória’ relativamente ao estado inicial A_α . Repetindo este procedimento diversas vezes (medida de A quando o átomo está no estado B_β) obteremos uma série de medidas com uma distribuição estatística independente da história prévia (átomo em A_α submetido a medida B forneceu B_β) com probabilidades $P(B_\beta \rightarrow A_\alpha)$ cuja soma também é a unidade:

$$\sum_{\alpha=1}^M P(B_\beta \rightarrow A_\alpha) = 1 \quad \text{para } \beta = 1, 2, \dots, N. \quad (2)$$

Podemos compilar as probabilidades de transição P , que levam dos estados iniciais A para os estados finais B , numa matriz retangular contendo M linhas e N colunas:

¹ Richard Feynman comentou que o estudante começa a entender a Mecânica Quântica no momento em que descobre que é impossível compreender a Mecânica Quântica.

²Os argumentos que se seguem podem ser facilmente estendidos para grandezas físicas com um número infinito de valores possíveis $e/$ ou também para grandezas físicas com valores contínuos.

$$\begin{pmatrix} P(A_1 \rightarrow B_1) & \cdots & P(A_\alpha \rightarrow B_N) \\ \dots\dots\dots & \dots & \dots\dots\dots \\ P(A_M \rightarrow B_1) & \cdots & P(A_M \rightarrow B_N) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

O primeiro postulado enunciado por Landé se baseia na simetria do conceito de igualdade: a definição de igualdade fracional apenas tem sentido se os átomos B_β passarem através do filtro- A_α com a mesma probabilidade que os átomos A_α passam pelo filtro³- B_β . Neste caso de acordo com as Eqs. (1) e (2) a soma dos termos em cada coluna e em cada linha é a unidade.

Postulado da Simetria: Se o observável A de um dado sistema mecânico é medido e se o resultado desta medida é o valor A_α , e submetendo em seguida este mesmo sistema à medição da propriedade B , teremos que os resultados obtidos B_1, B_2, \dots etc são imprevisíveis, mas cada um deles ocorrerá com probabilidades (ou frequências estatísticas) definitivas, $P(A_\alpha \rightarrow B_\beta)$. Uma probabilidade análoga $P(B_\beta \rightarrow A_\alpha)$ ocorrerá quando a medida se inicia pelo valor B_β do observável B . A fim de preservar a possibilidade de existirem estados quânticos em equilíbrio é necessário que se verifique a simetria (é a contrapartida estatística da reversibilidade de processos na MC) ,

$$P(A_\alpha \rightarrow B_\beta) = P(B_\beta \rightarrow A_\alpha) \quad (4)$$

ou, simplificando a notação, $P_{\alpha\beta} = P_{\beta\alpha}$.

Como caso especial⁴ temos

$$P(A_\alpha \rightarrow A_{\alpha'}) = \delta(\alpha, \alpha') \quad (5)$$

ou, abreviadamente, $P_{\alpha\alpha'} = \delta_{\alpha\alpha'}$, onde δ é a função delta de Dirac. A expressão (5) indica que obtendo o valor A_α ao efetuar um teste no observável A , uma repetição imediata deste teste resultará com toda a certeza no valor A_α .

O postulado da simetria tem consequências sobre as propriedades das matrizes P . Se a soma dos elementos de cada coluna e de cada linha da matriz (P_{AB}) é a unidade, segue que o número de linhas é igual ao número de colunas, isto é, $M = N$ e as matrizes são matrizes P quadradas⁵. De maneira similar, para os observáveis B e C , as linhas e as colunas da matriz (P_{BC}) devem ter a mesma multiplicidade, e assim por diante. Portanto todos os conjuntos de auto-estados A, B, C, \dots de determinado sistema mecânico devem ter a mesma multiplicidade. As tabelas de probabilidades P são portanto matrizes duplamente estocásticas. O caso especial da matriz (P_{AA}) da Eq. (5) é a matriz unidade, com os valores 1 na diagonal e 0 fora da mesma.

³O filtro é um dispositivo que apenas deixa passar um determinado estado, isto é, o filtro- A_α é um medidor- A que seleciona o estado A_α .

⁴Segundo a interpretação dada às probabilidades $P(A_\alpha \rightarrow B_\beta)$ após preparar o sistema no estado A_α , a medida subsequente da propriedade A fornecerá A_α , donde $P(A_\alpha, A_{\alpha'}) = \delta_{\alpha\alpha'}$, isto é, a probabilidade de encontrar o sistema no estado $A_{\alpha'}$ é zero e de encontrar A_α é um.

⁵Somando todos os elementos de (P_{AB}) linha após linha obtemos $M \cdot 1 = M$. Somando todos os elementos de (P_{AB}) coluna após coluna obtemos $N \cdot 1 = N$. Sendo (P_{AB}) = (P_{BA}), necessariamente $M = N$.

Antes de enunciar o segundo postulado é necessário tecer algumas considerações preliminares o que fazemos ao considerar a métrica do espaço Euclideo com 1-, 2- ou M -dimensões. Para isto vamos considerar as distâncias L entre os pontos A, B, C, \dots , isto é L_{AB}, L_{AC}, L_{BC} e assim por diante. As distâncias sendo simétricas (distância de A para B é igual à distância de B para A) permite que se escreva $L_{AB} = L_{BA}$ bem como $L_{AA} = 0$. A questão que se coloca é a seguinte: conhecendo-se as distâncias L_{AB} e L_{BC} entre os pontos A e B , e entre B e C , respectivamente, será que é possível a partir destas determinar (ou pelo menos restringir) a distância L_{AC} ? Para responder a esta pergunta suponhamos que $F(L_{AB}, L_{BC}, L_{CA}) = 0$, ou de forma abreviada $F(A, B, C) = 0$, descreve esta suposta interdependência. A mesma fórmula deve se verificar para qualquer outro conjunto de três letras sem que haja contradição. Em particular, a partir de $F(A, B, C) = 0, F(A, B, D) = 0$ e $F(A, C, D) = 0$ deve seguir $F(B, C, D) = 0$ como uma consequência da eliminação de A . Em outras palavras a lei geral que estabelece a interdependência entre os L 's é simétrica e transitiva, ou seja, tem características de grupo. Se além disto os L 's satisfizerem a desigualdade

$$|L_{AB} - L_{BC}| \leq L_{AC} \leq (L_{AB} + L_{BC}), \quad (6)$$

teremos que a lei das distâncias L está determinada de uma maneira univalente. Podemos explicitar esta relação L associando a cada valor positivo $L_{AB} = L_{BA}$ dois vetores opostos $\vec{L}_{AB} = -\vec{L}_{BA}$ com módulo $\vec{L} = L$ e dando-lhes direções de forma a satisfazer ao teorema da adição triangular com $\vec{L}_{AB} + \vec{L}_{BC} = \vec{L}_{AC}$ com $\vec{L}_{AB} = -\vec{L}_{BA}$, donde $\vec{L}_{AA} = 0$, ou de forma mais simétrica,

$$\vec{L}_{AB} + \vec{L}_{BC} + \vec{L}_{CA} + \vec{L}_{BA} = \vec{L}_{AA} = 0. \quad (7)$$

O teorema da composição de vetores é simétrica e transitiva e é muito mais simples do que uma conexão direta entre as próprias quantidades positivas L onde é necessário distinguir entre diversos casos:

(a) Se os pontos A, B, C, \dots estão distribuídos sobre um plano então haverá uma relação pentagonal entre as distâncias escalares L . Cinco pontos são conectados por dez distâncias L . Para determinar uma distância a partir de outras conhecidas é necessário o conhecimento de 9 delas. A décima estará determinada por uma lei de correlação única que é simétrica nas letras A, B, C, D, E e é válida para quaisquer cinco letras.

(b) Em três dimensões há uma lei de relação L hexagonal. Seis pontos são conectados por quinze L 's. Quatorze dos quais determinam de forma única a décima quinta, e assim sucessivamente para dimensões mais elevadas. As leis de relação L , à proporção que o número de dimensões aumenta ficam cada vez mais envolvidas.

Entretanto, utilizando o conceito de vetores verificamos que o estabelecimento da lei de relação entre as distâncias no espaço Euclidiano é muito mais simples. Para isto basta aplicar a lei vetorial (7) que é válida em qualquer dimensão. O conceito de vetores que neste caso fazem o papel de ferramentas auxiliares foi desenvolvido por Herrmann Grassmann por volta de 1900. Apesar de simplificar o estudo das relações geométricas de maneira geral, os vetores trouxeram poucas inovações e acréscimos para esta área.

É o uso de vetores como elementos auxiliares para provar relações geométricas que mostraram a Landé uma maneira de construir um postulado de interdependência entre as matrizes de probabilidade P . De maneira similar ao caso das distâncias L no espaço Euclidiano, Landé procurou uma forma para determinar ou pelo menos restringir os elementos de matriz (P_{AC}) quando as matrizes (P_{AB}) e (P_{BC}) são conhecidas. Para que a relação triangular a ser determinada seja uma lei geral, como no caso das distâncias L , ela deve ser simétrica e transitiva. Em resposta à pergunta sobre a possibilidade da existência desta lei geral Landé efetuou a seguinte construção:

As matrizes P têm valores compreendidos entre 0 e 1, o que pode ser explicitado pela introdução de quantidades α reais, positivas ou negativas, com valores compreendidos entre +1 e -1. Então expressamos P através de α^2 , pois $\alpha = \pm\sqrt{P}$, permitindo-nos escrever a matriz

(P_{AB}) como

$$\begin{pmatrix} \alpha^2(A_1, B_1) & \alpha^2(A_1, B_2) & \dots \\ \alpha^2(A_2, B_1) & \alpha^2(A_2, B_2) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} = (\alpha_{AB}^2). \quad (8)$$

Representando os auto-estados A_1, A_2, A_3, \dots por um sistema de M eixos ortogonais no espaço de M dimensões e os auto-estados B_1, B_2, B_3, \dots por um outro, a notação α^2 para os P sugere uma interpretação geométrica. Como a soma dos elementos em cada linha e em cada coluna da matriz (8) é igual à unidade podemos associar a cada quantidade $\alpha(A_\alpha, B_\beta)$ o cosseno entre os eixos A_α e B_β . Esta interpretação geométrica induz a uma solução geral (simétrica e transitiva) do problema em pauta, isto é, um teorema de interdependência que conecta as matrizes quadradas das probabilidades (3). Para isto basta associar a cada quantidade positiva P uma quantidade positiva ou negativa $\alpha = \pm\sqrt{P}$ e conectar os α 's pela fórmula dos cossenos:

$$\alpha(A_\alpha, C_\gamma) = \sum_{\beta} \alpha(A_\alpha, B_\beta) \cdot \alpha(B_\beta, C_\gamma) \quad \text{com } P = \alpha^2. \quad (9)$$

A Eq. (9) tem a forma de uma transformação ortogonal e o problema de achar um postulado de interdependência geral e auto-consistente para as matrizes P estaria resolvido em princípio. É importante observar que a propriedade da soma unitária das linhas e colunas é preservada. Em notação matricial a Eq. (9) fica

$$(\alpha_{AC}) = (\alpha_{AB}) \times (\alpha_{BC}) \quad \text{com } (\alpha_{AA}) = (1), \quad (10)$$

ou, em analogia à adição vetorial (7), que resolveu o problema da interdependência das distâncias L ,

$$(\alpha_{AB}) \times (\alpha_{BC}) \times (\alpha_{CA}) = (\alpha_{AB}) \times (\alpha_{BA}) = (\alpha_{AA}) = (1). \quad (11)$$

O sinal + ou - de um dos $\alpha = \pm\sqrt{P}$ individual permanece em aberto mas é restrito pelas relações de interdependência mútua entre os α 's dada pelas equações (9) ou (10).

As transformações unitárias permitem uma generalização adicional às transformações ortogonais. Ao invés de utilizar quantidades reais positivas ou negativas introduzimos quantidades complexas ψ que devem satisfazer as mesmas relações satisfeitas pelos α 's conforme a Eq. (9). Então $P = |\psi|^2$ tal que, designando a fase por ϕ , escrevemos

$$\psi = \sqrt{P} \cdot e^{i\phi} \quad \text{ou} \quad P = |\psi|^2. \quad (12)$$

A genialidade da proposta de Landé está nesta generalização, que ele utilizou de maneira regressiva para estabelecer o segundo postulado.

Postulado da correspondência: No domínio atômico (diferentemente do que ocorre no domínio macroscópico) existe uma lei geral que conecta qualquer tríade $P_{\alpha\beta}, P_{\beta\gamma}, P_{\alpha\gamma}$, de conjuntos de probabilidade de transição entre si e que na média coincide com a lei de adição das probabilidades na física clássica⁶:

$$P(A_\alpha, C_\gamma) = \sum_{B_\beta} P(A_\alpha, B_\beta) \cdot P(B_\beta, C_\gamma),$$

⁶Para um melhor esclarecimento para as probabilidades P e seu relacionamento com as grandezas ψ veja o Apêndice I.

ou abreviadamente

$$P_{\alpha\gamma} = \sum_{\beta} P_{\alpha\beta} \cdot P_{\beta\gamma} . \quad (13)$$

Este postulado estabelece a correspondência entre as probabilidades microscópicas e as probabilidades macroscópicas P . Para obter as probabilidades que se verificam no domínio atômico Landé introduz as quantidades auxiliares ψ que se conectam com as probabilidades macroscópicas P pela relação (12), isto é,⁷

$$\psi_{\alpha\beta} = \sqrt{P_{\alpha\beta}} \cdot e^{i\phi_{\alpha\beta}} . \quad (14)$$

Os $\psi_{\alpha\beta}$ devem ser hermiteanos, isto é,

$$\psi(A_{\alpha}, B_{\beta}) = \psi^{*}(B_{\beta}, A_{\alpha}), \quad (15)$$

onde o asterísco indica complexo conjugado.

Para que a relação (13) se verifique na média é necessário que as grandezas auxiliares ψ satisfaçam a mesma relação que os α 's satisfazem nas relação (9) e (10), isto é

$$\psi_{\alpha\beta} = \sum_{\beta} \psi_{\alpha\beta} \cdot \psi_{\beta\gamma} \quad (16)$$

e

$$(\psi_{AC}) = (\psi_{AB}) \times (\psi_{BC}) \text{ com } (\psi_{AA}) = (1) . \quad (17)$$

A média da expressão (16) é obtida da seguinte maneira. Multiplicando pelo seu complexo conjugado obtemos

$$\psi_{\alpha\beta}\psi_{\alpha\beta}^{*} = \left(\sum_{\beta} \psi_{\alpha\beta}\psi_{\beta\gamma} \right) \cdot \left(\sum_{\beta'} \psi_{\alpha\beta'}^{*}\psi_{\beta'\gamma}^{*} \right) . \quad (18)$$

Separando as somatórias em partes com $\beta' = \beta$ e $\beta' \neq \beta$ obtemos

$$\psi_{\alpha\gamma}\psi_{\alpha\gamma}^{*} = \sum_{\beta} \psi_{\alpha\beta}\psi_{\beta\gamma}\psi_{\alpha\beta}^{*}\psi_{\beta\gamma}^{*} + \sum_{\beta' \neq \beta} \psi_{\alpha\beta}\psi_{\beta\gamma}\psi_{\alpha\beta'}^{*}\psi_{\beta'\gamma}^{*} . \quad (19)$$

Efetuando a média sobre todas as fases a somatória com $\beta \neq \beta'$ se anula e a Eq. (19) fica

$$|\psi_{\alpha\gamma}|^2 = \sum_{\beta} |\psi_{\alpha\beta}|^2 |\psi_{\beta\gamma}|^2 \text{ na média} \quad (20)$$

que é idêntica à Eq. (13) como foi postulado.

A interferência de probabilidades é uma consequência do produto matricial dos ψ expressa pela Eq. (16). Esta é a única maneira de interrelacionar as probabilidades quânticas ψ de forma a se reduzirem à lei

triangular das probabilidades macroscópicas P que satisfazem a Eq. (13) válida na física clássica. É importante ressaltar que o procedimento seguido por Landé não envolve nenhum conteúdo de natureza quântica, a não ser quando os observáveis quânticos A, B, C, \dots se especializam para representar quantidades mecânicas como posição, momento, etc.

A, B, C são três observáveis quaisquer, e os índices α, β, γ indicam quaisquer dos seus autovalores. Na maioria dos livros-textos da MQ a estrutura deste teorema geral é mascarada pela especialização que usualmente é feita ao colocar o observável como sendo a energia com auto valores E_j, C como sendo a cordenada de posição q e deixando A sem especificação, de forma que a Eq. (16) fica sendo igual a

$$\psi(A_{\alpha}, q_n) = \sum_j \psi(A_{\alpha}, E_j) \cdot \psi(E_j, q_n) . \quad (21)$$

Como a posição é uma cordenada continua o índice n é omitido. Deixando de explicitar o estado A_{α} a Eq. (21) pode ser escrita como

$$\psi(q) = \sum_j a_j \cdot \psi_j(q) \quad (22)$$

que é uma expansão da função-estado $\psi(q)$ em termos de uma superposição de auto-funções da energia $\psi_j(q)$. Nos livros texto tradicionais a Eq. (22) é estabelecida de forma axiomática a partir do “princípio da superposição dos auto-estados” que é de assimilação bem mais difícil do que a derivação da Eq. (22) a partir de um teorema de simples e fácil percepção como está contido nas Eq. (16).

O papel da função de onda ψ na MQ é de importância central, pois é a superposição de auto-estados que proporciona a misteriosa interferência de probabilidades. As implicações decorrentes, não raras vezes em confronto direto com a MC, é que fez com que a função de onda ψ tivesse interpretações das mais diversas e das mais contraditórias⁸.

Por outro lado a obtenção de ψ pelo método lógico-dedutivo esboçado por Landé evidencia que ela apenas expressa uma conexão entre conjuntos de probabilidades atômicas através de uma equação entre quantidades auxiliares ψ . Cada $\psi_{\alpha\beta}$ determina o correspondente $P_{\alpha\beta}$, mas o conhecimento apenas de $P_{\alpha\beta}$ deixa o correspondente indeterminado $\psi_{\alpha\beta}$. Esta situação é análoga ao que acontece na geometria, onde para estabelecer uma lei geral que relaciona distâncias L no espaço Euclideano, a utilização de vetores \vec{L} como grandezas auxiliares se mostrou de grande utilidade. Assim como a direção associada aos vetores \vec{L} não tem nenhuma implicação no que se refere ao significado das distâncias L , o caráter ondulatório das grandezas complexas ψ não

⁷ Sendo ψ grandezas complexas, as contradições inerentes às probabilidades P deixam de existir (veja Apêndice I).

⁸ Existem várias opiniões no que se refere ao significado físico da função de onda ψ . Destas, destacamos sete das mais conhecidas no Apêndice II.

confere nenhuma propriedade ondulatória (e de interferência) às probabilidades P , cujos valores são determinados a partir de medidas efetuadas com aparelhos macroscópicos.

Estabelecida a relação entre as funções ψ obtidas a partir do Postulado da Correspondência (13-15) com as funções ψ obtidas a partir de expansões em termos da superposição de auto-estados (22), é necessário fazer uma pequena digressão sobre o cálculo de valores médios de um observável antes de enunciar o terceiro postulado de Landé.

Seja S a propriedade de um átomo que medida por um aparelho apropriado fornece um dos M valores S_1, S_2, \dots, S_M . Se antes de efetuar a medida da propriedade S , o átomo é preparado no estado A_α (isto é passa por um filtro- A_α), os resultados individuais de S não podem ser previstos mas o seu valor médio pode ser calculado a partir das probabilidades $P(A_\alpha, S_\sigma)$ obtidas após efetuar diversas medidas do valor de S , sempre a partir de átomos no estado A_α , isto é,

$$S_{medio} = \sum_{\sigma} P(A_\alpha, S_\sigma) \dot{S}_\sigma, \quad (23)$$

que, em forma tensorial, pode ser escrito como

$$S(A_\alpha, A_\alpha) = \sum_{\sigma} \psi(A_\alpha, S_\sigma) \cdot S_\sigma \cdot \psi(S_\sigma \cdot A_\alpha), \quad (24)$$

onde a Eq. (14) foi utilizada para as probabilidades P . A Eq. (24) ainda pode ser abreviada para

$$S_{\alpha\alpha} = \sum_{\sigma} \psi_{\alpha\sigma} S_\sigma \psi_{\sigma\alpha}. \quad (25)$$

Este valor tensorial pode ser entendido como sendo o valor médio da propriedade na transição de A_α para A_α . Sob o ponto de vista formal a expressão (24) caracteriza o observável como sendo um tensor no espaço M -dimensional de transformações unitárias tendo vários conjuntos de eixos ortogonais correspondendo aos auto-valores de diferentes observáveis. Neste caso S_σ são os valores principais do tensor S e $S_{\alpha\alpha}$ são as componentes tensoriais de S em relação aos estados α em que outro observável A tem auto-valores A_α . O tensor S também tem componentes mistas em relação aos α , definidas como

$$S_{\alpha\alpha'} = \sum_{\sigma} \psi_{\alpha\sigma} S_\sigma \psi_{\sigma\alpha'}. \quad (26)$$

Segundo o cálculo tensorial a generalização natural de (24) seriam as componentes mistas de S em relação aos α , o que pode ser interpretado como o valor médio de S em transição do estado α para o estado α' , abreviadamente, o valor de transição de S de α para α' .

Levando a generalização adiante, podemos escrever a transformação tensorial

$$S_{\alpha\alpha'} = \sum_{\nu} \sum_{\nu'} \psi_{\alpha\nu'} S_{\nu\nu'} \psi_{\nu'\alpha'}, \quad (27)$$

que tem como caso especial⁹

$$S_{\sigma\sigma} = S_\sigma \quad e \quad S_{\sigma\sigma'} = 0.$$

Com estas definições podemos enunciar o terceiro postulado de Landé que se baseia na invariância de Galileu para a MQ não relativística.

Postulado da Covariância: Qualquer observável $T(q)$ tem elementos de matriz (ou valores de transição) $T_{pp'}$ que dependem exclusivamente da diferença $p - p'$. De maneira similar, qualquer observável $S(p)$ tem elementos de matriz $S_{qq'}$ que dependem apenas de $q - q'$. Resultados análogos se verificam para a energia E e o tempo t .

Este postulado pode ser utilizado para a definição de conjugação¹⁰ de q e de p (ou de E e de t) ao invés das definições quânticas usuais. Demonstraremos agora que a periodicidade pq da função de onda definida pela Eq. (12) decorre do Postulado da Covariância.

A partir da Eq. (27) podemos escrever a expressão que fornece a transformação do tensor expresso nas coordenadas de posição inicial $q = q'$ e final $q = q''$ para as coordenadas inicial $p = p'$ e final $p = p''$ do momento linear como sendo

$$T_{p'p''} = \sum_{q'} \sum_{q''} \psi_{p'q'} T_{q'q''} \psi_{q''p''}, \quad (28)$$

que para variáveis contínuas pode ser expresso sob a forma integral

$$T_{p'p''} = \int \psi_{q'q} \cdot T(q) \cdot \psi_{qp''} \cdot dq. \quad (29)$$

Para que esta expressão tenha significado físico (qualquer que seja o significado) ela deve depender apenas da diferença $p' - p''$ e não do valor absoluto de um deles. Se isto se verifica para qualquer forma da função $T(q)$, então também deve se verificar para a função delta de Dirac, $\delta(q) = 0$ para todos os q exceto para algum valor arbitrário $q = q_0$. Com isto a Eq. (29) se reduz a

$$\delta_{p'p''} = \psi_{p'q_0} \psi_{q_0p''} = \psi_{p'q_0} \psi_{p''q_0}^* \quad (30)$$

Para que o produto apenas dependa da diferença $p' - p''$ segue que os fatores ψ_{pq} devem ter a forma complexa exponencial

$$\psi_{pq} = A(q) \cdot \exp[ipa(q)], \quad (31)$$

⁹ $S_{\alpha\alpha'}$ é o tensor em relação aos auto-valores A_α do observável A enquanto $S_{\sigma\sigma} = S_\sigma$ é um dos auto-valores de S .

¹⁰A MQ define p e q como sendo variáveis conjugadas quando as equações de movimento tem a forma canônica $dq/dt = \delta H/\delta p$ e $dp/dt = -\delta H/\delta q$. Na MQ a conjugação é definida ou a partir da regra de comutação de Bohr, $qp - pq = h/2i\pi$, ou a partir do operador de Schrödinger, $p = (h/2i\pi)d/dq$, ou ainda quando são relacionados pela equação de onda (37), que será vista adiante.

onde $a(q)$ é alguma função real de q . Fazendo as mesmas considerações após a permuta de q e p , teremos resultados similares para qualquer função $S(p)$ e seus elementos de matriz $S_{q'q''}$, isto é,

$$\psi_{qp} = B(p) \cdot \exp[iqb(p)], \quad (32)$$

onde $b(p)$ é alguma função real. Daí

$$\psi_{pq} = B^*(p) \cdot \exp[-iqb(p)]. \quad (33)$$

Comparando (31) com (33) obtemos

$$a(q) = \frac{q}{c} \text{ e } b(q) = -\frac{p}{c}, \quad (34)$$

e também

$$A(q) = B^*(p) = \text{const.}, \quad (35)$$

de forma que as Eqs. (31) e (33) fornecem

$$\psi_{pq} = C \cdot \exp\left(\frac{i \cdot pq}{c}\right). \quad (36)$$

A constante c tem dimensões de ação e usualmente é denotada por $h/2\pi$ (o valor de h deve ser determinado empiricamente), de forma que a função de onda é recuperada na sua forma usual

$$\psi_{pq} = C \cdot \exp\left(\frac{2i\pi pq}{h}\right). \quad (37)$$

onde C (e posteriormente C') é uma constante a ser determinada a partir da normalização da função de onda. Substituindo a Eq. (37) na Eq. (29) obtemos

$$T_{p'p''} = \int T(q) \cdot \exp[2i\pi(p' - p'')q] \cdot dq, \quad (38)$$

isto é, a função $T(q)$ com elementos de matriz $T_{p'p''}$ depende apenas de $p' - p''$, o que é necessário para que os elementos de matriz de algum observável T tenham algum significado físico.

Para o par conjugado E e t obtem-se para a probabilidade de transição ψ um resultado análogo, isto é,

$$\psi_{Et} = C' \cdot \exp\left(\frac{2i\pi Et}{h}\right). \quad (39)$$

As Eqs. (37) e (39) segundo a interpretação da Eq. (14) fornecem as probabilidades de transição entre observáveis ortogonais q e p , e t e E respectivamente.

III Conclusão

A partir das funções básicas (37,39) é possível obter todos os postulados usualmente empregados para o desenvolvimento da MQ como, por exemplo, a regra do operador $p = (h/2i\pi)\delta/\delta q$, o comutador de Bohr $pq - qp = h/2i\pi$ ou a equação de Schrödinger cujas

auto-funções $\psi_E(q, t)$ são obtidas pela combinação de (37) e (39), o que é exposto detalhadamente em muitos livros-textos [11,12,13].

A motivação de Landé para estabelecer postulados simples e quase auto-evidentes (simetria, correspondência e covariância), dos quais é possível desenvolver toda a MQ, reside no seu inconformismo diante do violento conflito que as interpretações usuais apresentam. Por exemplo, respostas simplistas como “isto resulta da equação de auto-valores de Schrödinger” é uma justificativa que evita o cerne do problema uma vez que as dificuldades lógicas apresentadas pela MQ estão contidas nesta expressão matemática. A redução dos fundamentos da MQ para equações matemáticas abstratas, operadores de momento, equação de Schrödinger, auto valores de matrizes, etc. é uma atitude que Einstein certamente abominava ao escrever [14]: “A missão mais importante do físico é a de pesquisar e descobrir leis elementares de validade universal que permitem reconstruir dedutivamente o cosmos que nos cerca”.

Apêndice I

A lei das probabilidades macroscópicas (13) é válida para o cálculo de probabilidades condicionais de certos fenômenos clássicos de transporte, como por exemplo a probabilidade $P(p, t; p_0, t_0)$ de que uma partícula no instante t tenha o momento p , sabendo que no instante $t_0 < t$ seu momento era p_0 . Designando por p' o momento no instante t' , tal que $t_0 < t' < t$ podemos escrever que $P(p, t; p_0, t_0) = \sum_{p't'} P(p, t; p', t') \cdot P(p', t'; p_0, t_0)$, devido ao ordenamento temporal. Entretanto esta lei não é válida para todos os fenômenos clássicos (macroscópicos): por exemplo, um gato pode pular do local A_α para vários pontos B_1, B_2, \dots, B_β que estão aproximadamente a 3 metros de distância, e a partir dali para o ponto C_γ colocado a cerca de outros 3 metros de distância dos pontos B . O gato entretanto não tem condições para pular diretamente de A_α para C_γ , de forma que o cálculo $P(A_\alpha, C_\gamma)$ da Eq. (13) não se aplica neste caso pois o resultado deve ser igual a zero.

Outra observação que se faz necessária é o caso em que $A = C$. Neste caso, Eq. (13) fica $P(A_\alpha, A_{\alpha'}) = \sum_{B_\beta} P(A_\alpha, B_\beta) \cdot P(B_\beta, A_{\alpha'})$. Segundo o postulado da simetria e a interpretação física das probabilidades P esta expressão deve ser igual a zero para $A_\alpha \neq A_{\alpha'}$ e igual a um no caso de $A_\alpha = A_{\alpha'}$. Isto se verifica mediante a introdução das grandezas complexas pela Eq. (14) conforme está explicado no texto.

Apêndice II

Existem várias opiniões no que se refere ao significado físico da função de onda ψ . Sete das mais conhecidas descrevem a função ψ como sendo:

(1) o estado físico de um meio material contínuo no espaço e no tempo, onde as partículas são meras aparências (Schrödinger);

(2) é uma onda piloto contínua que controla eventos pontuais ao longo da sua propagação (de Broglie);

(3) é um fluido contendo forças quânticas hipotéticas inventadas *ad hoc* de forma a determinar o seu próprio movimento de acordo com as leis da hidrodinâmica (Bohm);

(4) é um estado definitivo, ou uma sequência de muitos estados de um objeto, ou de um ensemble estatístico de objetos (os livros didáticos vacilam entre estas opiniões);

(5) é um estado de onda no espaço (por exemplo na parte transmitida ou refletida de um pacote de onda no caso de reflexão parcial) e que se contrai com velocidade acima da velocidade da luz no caso da ocorrência de um evento pontual (numa das duas partes do pacote) ou apenas quando um observador toma conhecimento do mesmo (Heisenberg);

(6) é um símbolo matemático totalmente abstrato, incapaz de fornecer uma representação pictorial, e que não tem nenhum conteúdo físico, mas é ao mesmo tempo completamente “objetivo” desde que não envolva o conhecimento por parte de algum observador (Heisenberg);

(7) a função ψ é uma relação de probabilidades obtidas a partir dos resultados de experimentos específicos efetuados em um objeto microscópico com um instrumento macroscópico.

References

- [1] N. Bohr, *Atomic Physics and Human Knowledge*, Science Editions, New York, 1961.
- [2] B. J. Mokross, Rev. Bras. Ens., Fís., **19**, 136 (1997).
- [3] L. de Broglie, Nature **112**, 540 (1923); Ann. de Physique **10**, 2 (1925).
- [4] E. Schrödinger, Ann. Physik **80**, 437 (1926); *ibid.* **81**, 109 (1926).
- [5] D. Bohm, Phys. Rev. **85**, 166 (1952); **85**, 180 (1952).
- [6] C. F. von Weizsäcker, *The World View of Physics*, University of Chicago Press, 1952.
- [7] A. Landé, Am. J. Phys., **33**, 123 (1965); *ibid.* **34**, 1160 (1966); **37**, 541 (1969); *ibid.* **43**, 70 (1975).
- [8] A. Landé, Am. J. Phys., **42**, 459 (1974).
- [9] A. Landé, *Foundations of Quantum Theory*, Yale University Press, New Haven, 1955.
- [10] A. Landé, *Foundations of Quantum Mechanics*, Cambridge at the University Press, Cambridge, 1965.
- [11] L. I. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill, 1968.
- [12] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, North-Holland, Amsterdam, 1965.
- [13] A. Landé, *Quantum Mechanics in a New Key*, Exposition Press, NY, 1973.
- [14] A. Einstein, em *Mein Weltbild*, Verlag, Amsterdam, 1934.