O SURGIMENTO DA MECÂNICA QUÂNTICA – UMA OU DUAS TEORIAS?

Roberto de Andrade Martins

Resumo: Até o início da década de 1920, a teoria quântica não possuía um conjunto de princípios e métodos claros, que pudesse ser aplicado a todos os fenômenos. Em meados dessa década surgiram duas propostas distintas para uma mecânica quântica: a mecânica matricial, iniciada por Werner Heisenberg e desenvolvida também por Max Born e Pascual Jordan; e a mecânica ondulatória de Erwin Schrödinger. Este artigo apresenta os principais personagens dessa história, bem como os passos mais importantes do desenvolvimento da mecânica quântica, focalizando principalmente os anos de 1925 e 1926. Apresenta também a questão da equivalência entre as duas abordagens – matricial e ondulatória – que começou a ser analisada nessa mesma época e que é discutida até hoje.
Palavras-chave: mecânica quântica; mecânica ondulatória; mecânica matricial; teoria quântica; história da física

1. INTRODUÇÃO

O início da teoria quântica remonta a 1900, com o trabalho de Max Planck sobre a radiação do corpo negro. No entanto, entre esse início e a criação da mecânica quântica, decorreram mais de 20 anos. A mecânica quântica propriamente dita foi criada em 1925 e 1926, pelas contribuições de Heisenberg, Born, Jordan, Dirac, Pauli, Wiener, Schrödinger e outros.

MARTINS, Roberto de Andrade. *Ensaios sobre História e Filosofia das Ciências I*. Extrema: Quamcumque Editum, 2021.

Antes disso, houve tentativas não muito coerentes de aplicação da ideia de quantização à radiação eletromagnética e ao calor específico dos sólidos (Albert Eintein, Johannes Stark, Peter Debye e outros), à estrutura atômica e ao espectro descontínuo de emissão dos átomos (John William Nicholson, Niels Bohr, Arnold Sommerfeld e outros) e a outros fenômenos. Mas foi apenas na década de 1920 que a teoria quântica atingiu sua maturidade, dando nascimento a uma abordagem sofisticada e ampla, que podia ser aplicada a todos os tipos de situações. Esta é a fase que será abordada neste artigo. O período inicial da teoria quântica não será apresentado aqui (ver Martins & Rosa, 2014).

Até 1924, a teoria quântica havia se desenvolvido sob a forma de trabalhos de natureza incompleta, tentando resolver problemas particulares como a radiação do corpo negro, o calor específico dos sólidos, o espectro descontínuo do hidrogênio, e outras questões semelhantes. Para cada problema eram desenvolvidos novos métodos, não existindo uma teoria básica da qual tudo pudesse ser deduzido.

A mecânica quântica propriamente dita foi criada nos anos 1925 e 1926, como resultado de diversos desenvolvimentos paralelos. Por um lado, os trabalhos de Werner Heisenberg, complementados por Max Born e Pascual Jordan (Heisenberg, 1925; Born & Jordan, 1925; Born, Heisenberg & Jordan, 1925), levaram à criação da chamada "mecânica matricial", que procurava calcular grandezas diretamente mensuráveis (como os comprimentos de onda, intensidade e polarização de linhas espectrais) utilizando um método baseado em matrizes. Por outro lado, Erwin Schrödinger, independentemente desses pesquisadores, partindo do trabalho de Louis de Broglie (1924) sobre ondas associadas a partículas, desenvolveu a "mecânica ondulatória" (Schrödinger, 1926a, 1926b, 1926d, 1926e; versão em inglês em Schrödinger, 1926g), na qual interpretava os diversos estados atômicos e moleculares como ondas estacionárias tridimensionais associadas aos elétrons, que por sua vez eram considerados como objetos extensos (não pontuais), com sua carga distribuída pelo espaço. Um terceiro desenvolvimento, também da mesma época, foi o trabalho de Paul Dirac (1925; 1926a; 1926b), que possuía um caráter mais abstrato e maior semelhança com a mecânica matricial, tendo sido inspirado pelo primeiro trabalho de Heisenberg. Ainda no mesmo período, Max Born e Norbert Wiener desenvolveram uma quarta abordagem, utilizando operadores, um método que não era equivalente à mecânica matricial, permitindo estudar fenômenos não periódicos (Born & Wiener, 1926).

A mecânica quântica atualmente ensinada e utilizada pelos pesquisadores não é a teoria de Heisenberg, Born e Jordan, nem a teoria de Dirac, nem a teoria de Schrödinger. Ela é uma teoria que reúne alguns aspectos de cada uma dessas teorias, mas não reproduz exatamente nenhuma delas.

Um aspecto central dessa história é a questão sobre a existência de uma única mecânica quântica, ou duas diferentes – a mecânica matricial e a mecânica ondulatória. Este problema é diferente da questão sobre as diversas *interpretações* da mecânica quântica. Existe a possibilidade de fazer um experimento ou uma observação para tentar decidir se uma teoria é melhor do que outra; mas não é possível fazer um experimento para decidir se uma *interpretação* de uma teoria é melhor do que outra. Se duas abordagens diferentes relacionadas a uma teoria levam a consequências experimentais diferentes, então elas são duas teorias distintas e não devem ser consideradas como meras interpretações da mesma teoria.

Este artigo não pretende oferecer uma resposta, mas sim introduzir esse problema sobre a unicidade da mecânica quântica, que não pode ser considerado resolvido e que ainda tem gerado importantes pesquisas sobre os fundamentos da mecânica quântica.

A primeira seção deste artigo descreverá algumas informações biográficas sobre os personagens centrais da criação da mecânica quântica. Acredito que essa apresentação inicial contribuirá para a compreensão do próprio desenvolvimento da teoria. As seções seguintes do artigo comentam inicialmente sobre os precedentes da mecânica quântica, indicando alguns passos preliminares (como a teoria da radiação de Bohr, Kramers e Slater) e depois descrevem as etapas fundamentais de criação da mecânica quântica propriamente dita. Embora este seja um artigo de nível introdutório, não foi possível evitar os aspectos matemáticos e técnicos centrais, pois sem eles a própria teoria não faz sentido.

2. *DRAMATIS PERSONÆ*

Vamos apresentar algumas informações biográficas sucintas sobre os principais personagens da história, para situar suas contribuições à mecânica quântica no período estudado: Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger, Max Born, Paul Dirac, Wolfgang Pauli e Pascual Jordan. Não apresentaremos informações sobre a vida inteira de cada um, mas apenas sobre o período relevante (década de 1920, especialmente em torno de 1925-1926).

Os pesquisadores que contribuíram para o surgimento da mecânica matricial estavam relacionados a três importantes institutos de física, dirigidos por Arnold Sommerfeld (em München), Niels Bohr (em Copenhagen) e Max Born (em Göttingen). Embora Sommerfeld e Bohr tenham sido personagens importantes no desenvolvimento da antiga teoria quântica e tenham estimulado diversos jovens pesquisadores a contribuir para o desenvolvimento da mecânica quântica, não participaram diretamente da criação dessa teoria. Apenas depois da formulação da mecânica quântica Bohr teve um papel importante na elaboração da sua interpretação "padrão" (interpretação de Copenhagen) e sua defesa. Por não estarem diretamente envolvidos no episódio estudado na presente pesquisa, as biografias de Bohr e Sommerfeld não foram incluídas aqui.

2.1 Werner Heisenberg

Werner Heisenberg (1901-1976) foi um dos "garotos" que ajudou a construir a mecânica quântica. Iniciou seus estudos universitários em 1921, na Universidade de München, sendo orientado por Arnold Sommerfeld (Mott & Peierls, 1977, p. 214). Nessa época, Wolfgang Pauli (apenas um ano mais velho do que Heisenberg) estava concluindo seu doutorado no grupo de Sommerfeld. Eles se tornaram amigos desde então.

Sommerfeld era uma autoridade na antiga teoria quântica aplicada ao estudo da teoria atômica e espectros, tendo publicado em 1919 um livro-texto sobre o assunto que se tornou uma referência na área, durante anos. Por sua influência, Heisenberg começou a se dedicar a esse tema.

Havia diversos problemas da física atômica que resistiam aos esforços de aplicação da antiga teoria quântica. Sommerfeld tinha consciência disso, mas era otimista e supunha que eles acabariam sendo resolvidos com algum esforço. Envolveu Heisenberg em estudos sobre fenômenos complexos, como efeito Zeeman em dubletos e tripletos, largura de raias espectrais em dubletos de raios X, e intensidade de raias em multipletos. Nenhuma dessas pesquisas levou a resultados importantes (Mott & Peierls, 1977, p. 216).

Na primavera de 1922 Heisenberg acompanhou Sommerfeld em uma visita de duas semanas a Copenhagen, onde conheceu Niels Bohr – um pesquisador que influenciou fortemente o jovem, desde essa época.

Durante o período de inverno de 1922-1923 Sommerfeld viajou para os Estados Unidos e fez arranjos para que, durante esse tempo, Heisenberg trabalhasse com Max Born, em Göttingen. Lá, Heisenberg se envolveu em pesquisas que também não proporcionaram resultados positivos, sobre átomos com vários elétrons e sobre a aplicação da teoria de perturbação ao átomo de hélio.

Paralelamente a essas pesquisas, Heisenberg também se dedicou ao estudo da hidrodinâmica. Por sugestão de Sommerfeld, começou a investigar o problema da turbulência, discutindo a estabilidade do fluxo laminar. Em meados de 1923 Heisenberg completou essa pesquisa e a submeteu como dissertação para obtenção do título de doutor (Mott & Peierls, 1977, pp. 217-218).

Depois da obtenção do seu título, Heisenberg voltou a Göttingen no segundo semestre de 1923, a convite de Max Born, como seu assistente de pesquisa. Tinha na época 22 anos de idade. Eles se dedicaram à pesquisa de problemas complexos que estavam ainda em aberto, como a teoria das moléculas, polarização atômica, multipletos em gases nobres, etc. (Mott & Peierls, 1977, p. 218).

Em 1924 Heisenberg fez um estágio em Copenhagen, junto ao grupo de Niels Bohr. Lá, desenvolveu uma pesquisa aplicando o princípio de correspondência de Bohr ao efeito Zeeman. Estudou também, com Hendrik Kramers, os problemas de emissão, absorção e espalhamento de luz por átomos e sua relação com a dispersão (Mott & Peierls, 1977, p. 219). Essa colaboração teve enorme importância e influência no trabalho posterior de Heisenberg, que começou a compreender quais das grandezas físicas características das transições atômicas são relevantes para a análise da interação dos átomos com a radiação. Vários aspectos do trabalho desenvolvido com Kramers tiveram influência, depois, no surgimento da mecânica matricial.

Na primavera de 1925 Heisenberg retornou a Göttingen, já convencido de que era necessária uma nova "mecânica quântica" (como defendia Max Born) e que era preciso abandonar a descrição dos detalhes da estrutura atômica. Começou a procurar relações entre as intensidades das raias espectrais do hidrogênio, utilizando o princípio de correspondência, mas a complexidade matemática o levou a desistir dessa tentativa. Escolheu então o oscilador não-harmônico para estudar (um oscilador com força restitutiva do tipo $F=-kx^2$). Um ataque alérgico (febre do feno) o obrigou a sair de Göttingen e a se afastar por uns 10 dias, em maio de 1925, indo para a ilha de Helgoland, onde não há gramíneas. Lá ele começou a obter os primeiros resultados positivos. Depois de retornar a Göttingen continuou a trabalhar sozinho, embora se correspondesse com seu amigo Pauli. No início de julho terminou um artigo (Heisenberg, 1925), entregou a Max Born, enviou uma cópia para Pauli e viajou para a Inglaterra. Max Born, com a ajuda do seu estudante Pascual Jordan, desenvolveu aspectos matemáticos que Heisenberg não havia conseguido elaborar e logo publicaram outro artigo (Born & Jordan, 1925). Quando Heisenberg retornou à Alemanha, os três (Born, Heisenberg, Jordan) concluíram um terceiro artigo, mais elaborado, no qual apresentavam as bases da mecânica matricial (Born, Heisenberg & Jordan, 1926).

Em maio de 1926 Heisenberg obteve seu primeiro cargo docente, em Copenhagen, no Instituto de Niels Bohr (Mott & Peierls, 1977, p. 222). No primeiro semestre de 1926, Erwin Schrödinger publicou seus trabalhos fundamentais sobre mecânica ondulatória. Heisenberg reagiu negativamente, criticando esses trabalhos e as ideias básicas de Schrödinger, embora começasse a utilizar suas técnicas (Mott & Peierls, 1977, p. 223). No segundo semestre desse ano, Schrödinger foi convidado a visitar Copenhagen, onde discutiu extensamente suas ideias com Bohr e Heisenberg, sem conseguir convencê-los. No entanto, eles perceberam que os fundamentos da mecânica quântica não estavam claros. Foi depois disso que Heisenberg se dedicou a um aprofundamento conceitual da teoria, que resultou na publicação do trabalho no qual propôs o princípio da indeterminação, em 1927.

2.2 Wolfgang Pauli

Wolfgang Ernst Pauli (1900-1958) começou a estudar na Universidade de München em 1918. Supervisionado por Arnold Sommerfeld, ele obteve o título de doutoramento em física teórica três anos depois, aos 21 anos de idade. Seu trabalho de doutorado foi a análise da molécula de hidrogênio ionizada, aplicando em seu estudo o método de quantização de Bohr-Sommerfeld. Simultaneamente ao seu doutorado, ele escreveu uma longa monografia sobre teoria da relatividade para a *Enciclopédia das Ciências Matemáticas* (*Encyclopädie der* *mathematischen Wissenschaften*), com o apoio de Sommerfeld (Peierls, 1960, pp. 175-176).

Após concluir seu doutoramento, Pauli fez um estágio na Universidade de Göttingen, onde trabalhou em colaboração com Max Born, em 1921-1922; e passou o ano seguinte em Copenhagen, trabalhando junto ao grupo de Niels Bohr, escrevendo um artigo com H. A. Kramers sobre espectros contínuos. Em 1923 obteve uma colocação na Universidade de Hamburg, como livre-docente, onde permaneceu até 1928 (Peierls, 1960, p. 176).

O interesse inicial de Pauli era a teoria da relatividade, mas logo ele se concentrou no estudo da teoria atômica e da teoria quântica. Seus primeiros artigos sobre o assunto, publicados entre 1920 e 1924, tratavam do efeito de campos magnéticos e elétricos no espectro atômico, a teoria da molécula de hidrogênio ionizada (sua tese) e a utilização da teoria de perturbação (Peierls, 1960, pp. 177 e 187-188). Em 1925, ao estudar o espectro de átomos complexos, introduziu aquilo que foi depois chamado de "princípio de exclusão de Pauli". Aparentemente, foi ao ser obrigado a introduzir esse princípio, que não tem qualquer analogia com a física clássica, que ele percebeu que a teoria quântica exigia postulados totalmente novos e que não bastava adicionar algumas regras de quantização de energia à física clássica para compreender o átomo (Peierls, 1960, p. 178).

Em 1925, quando Heisenberg estava desenvolvendo seu primeiro artigo sobre os fundamentos da mecânica quântica, ele se correspondeu longamente com Pauli, pedindo-lhe sua opinião sobre as ideias em que estava trabalhando. Logo depois da conclusão do artigo de Heisenberg, Pauli começou a aplicar a nova mecânica quântica e foi o primeiro a conseguir resolver o problema do átomo de hidrogênio utilizando o novo formalismo matricial – uma pesquisa de grande complexidade matemática (Pauli, 1926). Os trabalhos iniciais de Heisenberg, Born e Jordan apenas haviam conseguido analisar problemas muito mais simples. Assim sendo, considera-se que Pauli contribuiu fortemente para que a nova teoria quântica fosse aceita.

2.3 Max Born

Max Born (1882-1970) foi o físico mais experiente do grupo envolvido com a criação da mecânica matricial – tinha mais de 40 anos de idade, na época. Na fase que nos interessa, ele era diretor do Instituto de Física da Universidade de Göttingen, onde permaneceu de 1921 a 1933 (Kemmer & Schlapp, 1971, p. 21). Nesse período, Born estava inicialmente estudando a termodinâmica de cristais. Logo depois, no entanto, seu principal interesse se tornou a teoria quântica. Desenvolveu nos anos seguintes trabalhos sobre o assunto com seus jovens assistentes, Wolfgang Pauli e Werner Heisenberg, e com um estudante, Pascual Jordan. O primeiro artigo que publicou a respeito da quantização de sistemas mecânicos é de 1922 e foi escrito em colaboração com Pauli (Kemmer & Schlapp, 1971, p. 32).

Em 1923 Heisenberg começou a trabalhar com Born, estudando problemas atômicos altamente complexos. Publicaram um artigo sobre o átomo de hélio, que não levou a bons resultados mas que os convenceu da necessidade de uma ruptura completa com a teoria quântica semi-clássica que era praticada por todos. Em meados de 1924 Born publicou um trabalho em cujo título apareceu pela primeira vez a expressão "mecânica quântica", embora ainda não existisse de fato tal teoria (Born, 1924). Max Born estava claramente intuindo como deveria ser a nova mecânica quântica, mas apenas conseguiu apresentar algumas ideias preliminares dessa teoria (Kemmer & Schlapp, 1971, p. 33).

Em 1925 Heisenberg elaborou um primeiro trabalho sobre a mecânica quântica (Heisenberg, 1925), utilizando um novo formalismo que era obscuro até para o próprio autor. Segundo o próprio Heisenberg, foi a fé de Born na necessidade de que era necessário criar uma mecânica quântica completamente nova e autônoma que levou ao desenvolvimento dessa pesquisa (Kemmer & Schlapp, 1971, p. 32).

Foi Born, que possuía uma base matemática muito mais ampla, quem reconheceu que o cálculo utilizado por Heisenberg era equivalente à álgebra matricial. Logo em seguida, enquanto Heisenberg estava ausente de Göttingen, Born e Pascual Jordan desenvolveram o formalismo matricial da mecânica quântica (Born & Jordan, 1925). O trabalho foi completado logo depois, em conjunto, pelos três pesquisadores (Born, Heisenberg & Jordan, 1926). Pode-se dizer que a contribuição de Born foi fundamental para o desenvolvimento da mecânica matricial, sob vários aspectos, e que é injusto atribuir a teoria apenas a Heisenberg (Kemmer & Schlapp, 1971, p. 34).

Em seguida, Born passou alguns meses nos Estados Unidos, no Massachusetts Institute of Technology, onde aprofundou as bases da mecânica quântica com a colaboração de Norbert Wiener, criando um novo formalismo para a teoria, com o uso de operadores (Born & Wiener, 1926). Isso permitiu aplicar a nova mecânica quântica a fenômenos aperiódicos, que não podiam ser analisados com o formalismo matricial.

Durante o primeiro semestre de 1926, Erwin Schrödinger publicou seus trabalhos fundamentais sobre a mecânica ondulatória. Max Born apreciou a abordagem de Schrödinger e começou a utilizá-la, analisando fenômenos de colisão (espalhamento). No entanto, rejeitou a interpretação que o próprio Schrödinger dava à mecânica ondulatória e propôs a interpretação estatística da função de onda (Born, 1926). Foi principalmente por esse trabalho que Born recebeu o Prêmio Nobel, muitos anos mais tarde.

2.4 Erwin Schrödinger

Erwin Schrödinger (1887-1961) era mais jovem do que Max Born, porém já tinha 38 anos de idade quando desenvolveu a sua versão da teoria quântica – a mecânica ondulatória. Na Universidade de Viena, onde estudou, foi aluno de Fritz Hasenöhrl, que o influenciou muito. Suas primeiras pesquisas, na década de 1910, foram sobre estatística, dielétricos, magnetismo e difração de raios X (Heitler, 1961, pp. 221-222). Depois do fim da primeira guerra mundial (na qual lutou), publicou trabalhos sobre teoria da relatividade, além de assuntos que já havia pesquisado antes (mecânica estatística e difração de raios X) e teoria das cores.

Em 1921 obteve uma colocação como professor de física teórica na Universidade de Zurich, na Suíça, sucedendo a Albert Einstein e Max von Laue. Permaneceu nessa universidade durante 6 anos. Esse foi o período no qual produziu suas mais importantes pesquisas. Foi a partir de 1921 que Schrödinger começou a se interessar pela teoria quântica, mas inicialmente publicou apenas alguns trabalhos de pouca importância (Heitler, 1961, p. 222).

Em 1925 Schrödinger voltou a trabalhar com mecânica estatística, analisando a teoria dos gases ideais, utilizando o princípio de que as moléculas são não podem ser distinguidas umas das outras. Na mesma época, Einstein estava publicando trabalhos a respeito do mesmo assunto, introduzindo aquilo que posteriormente foi denominado de “estatística de Bose-Einstein”. Em um desses artigos, Einstein discutiu os fenômenos de flutuação estatística dos gases e mostrou que uma parte da equação obtida podia ser interpretada sob o ponto de vista de interferência de ondas. Sugeriu que talvez as moléculas tivessem um aspecto ondulatório, chamando a atenção para o trabalho de Louis de Broglie a respeito de ondas associadas a partículas. Schrödinger estudou esse artigo de Einstein e, através dele, tomou conhecimento das ideias de De Broglie. Segundo Wilhelm Heitler, que era estudante de doutoramento em München nessa época, as ideias de De Broglie eram muito discutidas, mas ninguém as levou muito a sério – com a exceção de Einstein e Schrödinger (Heitler, 1961, p. 222).

No final de 1925, Schrödinger começou a se dedicar intensamente à busca de uma equação de onda associada às ondas da matéria da teoria de De Broglie. Conseguiu obter os primeiros resultados importantes durante algumas semanas de férias, de dezembro de 1925 a janeiro de 1926. Logo em seguida, publicou uma sequência de 4 artigos fundamentais, apresentando a sua mecânica ondulatória e mostrando suas aplicações. Não só nesse período, mas em toda sua vida acadêmica, Schrödinger desenvolveu sua pesquisa sozinho (Heitler, 1961, p. 225).

O trabalho inicial de Schrödinger foi realizado sem conhecimento dos primeiros artigos de Heisenberg, Born e Jordan sobre mecânica matricial. No entanto, ainda durante o primeiro semestre de 1926, ele publicou um artigo no qual procurava mostrar que a mecânica matricial e a mecânica ondulatória, apesar de suas diferenças aparentes, eram equivalentes.

2.5 Paul Dirac

Paul Adrien Maurice Dirac (1902-1984) foi o único físico inglês que contribuiu significativamente na fase inicial de desenvolvimento da mecânica quântica. Era aproximadamente da mesma idade que Heisenberg e Pauli.

Dirac começou a estudar engenharia elétrica na Universidade de Bristol em 1918. Começou a se interessar pela teoria da relatividade e tentou ingressar em Cambridge, mas não teve condições financeiras de estudar lá. Começou então estudos de matemática em Bristol, completando sua graduação em 1923 (Dalitz & Peierls, 1986, pp. 141-143).

Em seguida, Dirac conseguiu uma bolsa de estudos para prosseguir seus estudos em Cambridge. Pretendia estudar relatividade, mas Ebenezer Cunningham (com quem ele queria pesquisar) não estava aceitando novos alunos. Por isso, Dirac foi trabalhar com Ralph H. Fowler, que se dedicava à mecânica estatística e à teoria atômica quântica. Dirac começou a se dedicar a esses dois temas, publicando 8 artigos em 1924 e 1925 (Dalitz & Peierls, 1986, p. 147).

No verão de 1925, Heisenberg passou algum tempo em Cambridge, apresentando seminários – embora, aparentemente, não tenha exposto o trabalho que acabara de concluir em Göttingen. Depois de retornar à Alemanha, Heisenberg enviou a Fowler uma cópia da primeira versão do seu primeiro artigo sobre mecânica quântica. Fowler o mostrou a Dirac, que inicialmente não se interessou muito, mas depois ficou intrigado com as propriedades matemáticas das grandezas utilizadas por Heisenberg, para as quais *p.q* era diferente de *q.p* (Dalitz & Peierls, 1986, p. 148). A natureza dessas grandezas não era clara no artigo de Heisenberg (depois, Max Born mostrou que podiam ser representadas por matrizes).

Dirac, refletindo sobre o trabalho de Heisenberg, logo encontrou um modo alternativo de desenvolver aquela nova mecânica, utilizando um formalismo algébrico baseado na mecânica analítica e associando os comutadores quânticos aos colchetes de Poisson. No final de 1925, ele concluiu seu primeiro artigo sobre o assunto (Dirac, 1925) no qual introduziu a álgebra dos "números q" e conseguiu vários resultados que foram obtidos paralelamente por Born, Heisenberg e Jordan, porém adotando um novo formalismo (Dalitz & Peierls, 1986, p. 163).

No início de 1926, Dirac conseguiu aplicar a mecânica quântica ao átomo de hidrogênio – paralelamente a Pauli, que também conseguira aplicar o formalismo matricial a esse problema. Em maio de 1926, utilizando seus estudos sobre a mecânica quântica, Dirac obteve seu título de doutorado (Dalitz & Peierls, 1986, p. 148). Logo em seguida, Fowler conseguiu que ele fizesse estágios em Copenhagen e Göttingen, para ter a oportunidade de discutir seus trabalhos com os outros pesquisadores que estavam desenvolvendo a mecânica quântica.

Em Copenhagen, no final de 1926, Dirac desenvolveu a teoria da transformação e elaborou um trabalho (Dirac, 1927) onde mostrou que a mecânica ondulatória e a mecânica matricial eram casos particulares de uma formulação mais geral (Dalitz & Peierls, 1986, pp. 148, 164). De acordo com Dalitz e Peierls, inicialmente Dirac não gostou do trabalho de Schrödinger, e foi Heisenberg quem o convenceu de que a mecânica ondulatória era útil para suplementar a mecânica matricial (Dalitz & Peierls, 1986, p. 164).

Em 1927, Dirac retornou à Inglaterra e obteve uma posição de pesquisador ("fellow") no St John's College, em Cambridge. Devido ao seu interesse pela teoria da relatividade, Dirac procurou associar essa teoria à mecânica quântica, aplicando as duas teorias ao estudo do efeito Compton. No final de 1927 começou a elaborar a teoria quântica relativística do elétron, que publicou em dois trabalhos em 1928, nos quais aparece a "equação de Dirac" (Dalitz & Peierls, 1986, pp. 165-166). O livro publicado por Dirac em 1930, *The principles of quantum mechanics*, foi o primeiro livro-texto sistemático sobre o tema, tornando-se rapidamente uma obra de referência sobre o assunto.

2.6 Pascual Jordan

Pascual Jordan (1902-1980) tinha interesses variados e iniciou em 1921 seus estudos de física, matemática e zoologia na Universidade Técnica de Hannover. Em 1923 transferiu-se para a Universidade de Göttingen, obtendo seu título de doutor em 1924, com uma tese sobre mecânica estatística. Sua formação matemática, especialmente na área de álgebra, era considerada excelente (Schroer, 2003, p. 2). Ele assistiu cursos com Richard Courant no departamento de matemática de Göttingen e se tornou seu assistente, mantendo também contato com David Hilbert.

Auxiliou Courant na preparação do livro *Methoden der mathematischen Physik* ("Métodos da física matemática"), de Richard Courant e David Hilbert, publicado em 1924 (Jammer, 1966, p. 207). Essa obra continha as ferramentas matemáticas essenciais que foram utilizadas logo depois para o desenvolvimento da mecânica quântica.

Em 1925 começou a trabalhar simultaneamente com o físico experimental James Franck e com o físico teórico Max Born (Schroer, 2003, p. 2), ambos de Göttingen e igualmente envolvidos com a pesquisa de fenômenos atômicos e teoria quântica. Colaborou com Franck na redação de um livro sobre fenômenos quânticos em colisões (FRANCK, James; JORDAN, Pascual. *Anregung von Quantensprüngen durch Stoesse*. Berlin: Springer, 1926).

Jordan começou também a colaborar com Max Born em estudos a respeito da teoria quântica, publicando com ele dois artigos no primeiro semestre de 1925. Em julho de 1925 Heisenberg concluiu seu primeiro artigo sobre os fundamentos da mecânica quântica (Heisenberg, 1925), que tinha várias limitações matemáticas. Max Born e Pascual Jordan conseguiram desenvolver o trabalho de Heisenberg e publicaram um artigo com as principais relações da mecânica matricial (Born & Jordan, 1925). A maior parte das demonstrações matemáticas foi desenvolvida por Jordan, que tinha 22 anos de idade. Logo depois, com a colaboração do próprio Heisenberg, publicaram um segundo artigo desenvolvendo a teoria e algumas de suas aplicações (Born, Heisenberg & Jordan, 1926).

No final de 1925 Jordan escreveu, sozinho, um trabalho sobre a estatística das partículas que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, e que denominou "estatística de Pauli". Submeteu o artigo para publicação, entregando-o a Max Born, que era editor da revista *Zeitschrift für Physik*. Porém, Born estava de partida para os Estados Unidos e esqueceu o artigo de Jordan em uma pasta, na Alemanha. Quando regressou, vários meses depois, o mesmo tipo de estatística já tinha sido estudado por Enrico Fermi e Paul Dirac, sendo por isso conhecida como "estatística de Fermi-Dirac". Assim, por um descuido de Max Born, Jordan perdeu a prioridade na publicação dessa teoria (Schroer, 2003, p. 2).

Em colaboração com Heisenberg, Jordan publicou um trabalho aplicando a nova mecânica matricial ao estudo do efeito Zeeman anômalo, introduzindo a hipótese do spin do elétron nessa teoria (Schroer, 2003, p. 6).

Jordan obteve a posição de livre-docente em Hamburg em 1926, com uma tese a respeito da teoria quântica da radiação. No segundo semestre desse ano, Jordan propôs uma demonstração, independentemente de Paul Dirac, de que as várias formulações da mecânica quântica podiam ser associadas através da teoria estatística de transformação (Beyler, 1996, p. 258). O trabalho de Jordan foi fundamental para o desenvolvimento do princípio de indeterminação de

Heisenberg, no ano seguinte (Beller, 1985). Posteriormente, Jordan teve um papel fundamental na criação da teoria quântica de campo e, a partir da década de 1930, na biologia quântica.

Em meados da década de 1920 Jordan começou mostrar tendências políticas nacionalistas e de direita e logo se envolveu fortemente com o movimento nazista (Schroer, 2003, pp. 2-3). Isso parece ter contribuído para seu posterior isolamento e perda de prestígio.

3. PRECENDENTES DA MECÂNICA QUÂNTICA

Como já indicamos, a Mecânica Quântica foi criada em 1925 e 1926, pelas contribuições de Heisenberg, Born, Jordan, Dirac, Pauli, Wiener, Schrödinger e outros.

Até o início de 1925 não se pode afirmar que existisse uma mecânica quântica propriamente dita. Havia, sim, diversos problemas que haviam sido estudados utilizando-se ideias de quantização, mas cada problema era estudado por um método diferente, baseando-se em analogias com a física clássica e introduzindo de alguma forma não muito bem justificada o quantum de ação de Planck (Jammer, 1966, p. 196).

O principal problema da teoria quântica, no início da década de 1920, era explicar os espectros atômicos e suas peculiaridades na presença de campos elétricos e magnéticos. Inicialmente o objetivo era apenas dar conta das frequências das raias espectrais, mas depois se tornou essencial compreender também as *intensidades* das mesmas, que variavam de um modo incompreensível (Rosenfeld, 1973, p. 256). As tentativas de explicar essas intensidades utilizavam o princípio de correspondência de Bohr, que estabelecia uma relação entre a física clássica e a física quântica. Em 1918, Bohr ainda supunha que a teoria atômica deveria ser desenvolvida aplicando-se a física clássica (incluindo correções relativísticas) para calcular os estados estacionários do átomo, estudando os movimentos dos elétrons em torno dos núcleos (Bohr, 1918, p. 99).

A passagem da teoria clássica para a quântica era um processo de tentativa e erro, comparando os harmônicos da física clássica às transições entre dois estados estacionários da teoria atômica: "O trabalho de pesquisa durante os anos 1919-1925 que finalmente levou à Mecânica Quântica pode ser descrito como *adivinhação sistemática, guiada pelo Princípio de Correspondência*" (Waerden, 1967, p. 8).

Em meio a essas tentativas, repletas de fracassos, Bohr e Kramers foram levados à convicção de que era necessário abandonar o modelo clássico de elétrons descrevendo órbitas elípticas em torno do núcleo atômico. Outros autores, como Sommerfeld, mantinham sua fé no antigo modelo (Rosenfeld, 1973, p. 257).

Ocorreram, a partir desse ponto, dois desenvolvimentos paralelos: a criação da mecânica matricial por Heisenberg, e o surgimento da mecânica ondulatória desenvolvida por Schrödinger a partir de ideias de Louis de Broglie.

No caso da teoria de Heisenberg, pode-se dizer que os primeiros passos foram inseguros, sem nenhuma base física clara, iniciando-se pela criação de um formalismo cuja interpretação era obscura para seu próprio autor.

A mecânica matricial começou a ser criada em meados de 1925, quando Werner Heisenberg estava na ilha de Heligoland, recuperando-se de um ataque de febre do feno (Jammer, 1974, p. 21). Nessa época, ele começou a tentar representar as quantidades físicas observáveis da teoria quântica (especialmente frequências e intensidades de raias espectrais) através de números complexos. Obteve relações matemáticas que não lhe eram familiares e que foram logo depois interpretadas por Max Born como propriedades de matrizes. O primeiro trabalho de Heisenberg (1925) era bastante obscuro. Logo depois, no entanto, a matemática subjacente ao trabalho de Heisenberg foi desenvolvida por Max Born, com a ajuda de Pascual Jordan (Born & Jordan, 1925) e do próprio Heisenberg (Born, Heisenberg & Jordan, 1925).

No caso da teoria de Schrödinger, pelo contrário, havia uma base teórica bastante sólida e compreensível, desenvolvida por Louis de Broglie, originada de uma fusão entre o princípio quântico $E=h\nu$ e a teoria da relatividade especial. Embora as ideias de De Broglie fossem novas, constituíam uma proposta bastante coerente e bem fundamentada, que dava uma interpretação original aos fenômenos de quantização, interpretando-os como fenômenos de produção de ondas estacionárias.

Os dois desenvolvimentos surgiram simultaneamente, de forma independente, passando no entanto a influenciar-se mutuamente logo em seguida. Em meados de 1926 o formalismo da mecânica quântica estava praticamente completo e havia mostrado sua fertilidade, sendo aplicado e resolvendo diversos problemas importantes da física atômica, como o cálculo dos efeitos Zeeman e Stark (Jammer, 1974, p. 22).

No caso da mecânica matricial, o trabalho de Heisenberg foi precedido por várias contribuições que prepararam o surgimento de sua abordagem, que serão descritas a seguir.

4. A TEORIA DA RADIAÇÃO DE BOHR, KRAMERS E SLATER

Uma das linhas de pesquisa, anterior à criação da mecânica quântica propriamente dita, que mais influenciou no surgimento da nova teoria foi o estudo da teoria da dispersão da radiação (Waerden, 1967, pp. 8-12). A teoria clássica da dispersão descrevia o átomo como um conjunto de osciladores, cujas frequências eram iguais às frequências de absorção. Em 1921, Rudolf Ladenburg tentou desenvolver uma teoria quântica da dispersão, mas não era possível utilizar o modelo do átomo de Bohr, porque as frequências de absorção deveriam estar associadas às frequências do elétron nos estados estacionários e a seus harmônicos – o que não ocorria. Sem se preocupar muito com o modo de justificar sua hipótese, Ladenburg manteve na sua análise quântica a ideia clássica de que o átomo poderia ser considerado como um conjunto de osciladores com frequências iguais às de absorção. Trabalhando sobre essa estrutura essencialmente clássica, mas quantizando os osciladores, ele obteve bons resultados.

Essa ideia serviu depois de base para o trabalho de Bohr, Kramers e Slater sobre a teoria da radiação, bem como para os trabalhos de Kramers e Heisenberg sobre dispersão (Waerden, 1967, p. 11). Pode-se dizer que, por influência de Ladenburg, os físicos quânticos começaram a trabalhar com uma abordagem mais abstrata para descrever o átomo, abandonando os modelos baseados na ideia de elétrons em movimento em torno de um núcleo.

De acordo com Max Jammer, o trabalho publicado por Bohr, Kramers e Slater sobre a natureza quântica da radiação (Bohr, Kramers & Slater, 1924) representou uma ruptura com a antiga teoria quântica e preparou o surgimento do trabalho de Heisenberg, de 1925 (Jammer, 1966, pp. 183-185).

Em 1924 um jovem norte-americano, John Clark Slater (1900-1976), recém-doutorado, visitou o instituto de física da Copenhagen, onde trabalhou com Niels Bohr (1885-1962) e Hendrik Anthony Kramers (1894-1952). Slater havia obtido seu doutorado em física em Harvard no ano anterior e estava realizando estágios na Europa (Cambridge e Copenhagen).

A concepção de John Slater a respeito de um "campo virtual de radiação" foi fundamental para o trabalho de Bohr, Kramers e Slater, bem como para os trabalhos posteriores de Kramers e Heisenberg sobre dispersão (Waerden, 1967, pp. 11-12). Slater publicou essa ideia sob a forma de uma carta ao editor da revista *Nature*, enviada em janeiro e publicada em março de 1924 (Slater, 1924). Na teoria eletromagnética clássica, uma carga oscilante emite radiação eletromagnética; no entanto, na teoria quântica, era necessário supor que a emissão só ocorre quando há a transição de um estado para outro.

Slater supôs que quando os osciladores estão no estado estacionário, eles estariam em comunicação (sem troca de energia) com todos os outros átomos à sua volta, através de um *campo virtual de radiação* ("virtual" porque é desprovido de energia) com frequências iguais às frequências quânticas de transição (que são diferentes das frequências de oscilação, no caso do átomo de Bohr). Esse campo virtual teria o papel de determinar as probabilidades das transições quânticas – ou seja, a emissão ou absorção de energia por um átomo dependeria não apenas de seu próprio estado, mas também das influências virtuais recebidas por parte dos outros átomos (Slater, 1924, p. 307). Slater também supôs que os quanta de radiação, ao se deslocarem pelo espaço, seriam direcionados por esse campo virtual de radiação.

Porém, ao discutir suas ideias com Kramers e Bohr, durante uma estada em Copenhagen, estes rejeitaram parte de suas ideias (pois Bohr não aceitava a ideia dos quanta de luz) e alteraram outras (Waerden, 1967, p. 12). O trabalho produzido por Bohr, Kramers e Slater (1924) utilizava a ideia do "campo virtual de radiação" de Slater, mas introduzia outras ideias devidas a Kramers e Bohr: a de que os processos de emissão e absorção de energia em átomos distantes são independentes; e que a energia e o momentum só se conservam estatisticamente, mas não em cada evento individual de absorção / emissão de energia (Waerden, 1967, pp. 12-13).

Slater originalmente imaginou que, através da comunicação entre átomos distantes através do campo virtual de radiação, haveria algum tipo de conexão entre a emissão de energia por um deles e a absorção de igual quantidade de energia por um outro (ver Bohr, Kramers & Slater, 1924, p. 160)[1]. No entanto, no trabalho de Bohr, Kramers e Slater, essa ideia foi substituída pela hipótese de que os processos de emissão e absorção que ocorreriam em átomos distantes não estariam sincronizados, apesar da existência dessa comunicação através do campo virtual de radiação.

Muitos trabalhos posteriores se basearam no artigo de Bohr, Kramers e Slater, mas utilizando apenas o princípio do campo virtual de radiação e não as outras hipóteses do artigo. Por isso, costuma-se considerar que a parte realmente importante desse trabalho foi a contribuição de Slater.

[1] Foi utilizada a reedição contida em Waerden, 1967.

Cada átomo, nessa teoria, estaria emitindo continuamente um conjunto de oscilações virtuais correspondente a todas as suas frequências possíveis. Embora essas ondas virtuais não contivessem energia, elas podiam produzir efeitos nos átomos vizinhos, sendo portanto reais. Essa ideia preparou a concepção de Heisenberg de que os átomos deveriam ser descritos simplesmente como conjuntos de osciladores com grande número de frequências, representados por matrizes (Jammer, 1966, p. 187).

Nesse artigo, a hipótese dos quanta de luz de Einstein é mencionada e descartada:

> Embora o grande valor heurístico dessa hipótese seja mostrado pela confirmação das previsões de Einstein sobre o fenômeno fotoelétrico, a teoria dos quanta de luz obviamente não pode ser considerada como uma solução satisfatória do problema da propagação da luz. Isso se torna clara pelo próprio fato de que a 'frequência' ν da radiação que aparece na teoria é definida por experimentos sobre fenômenos de interferência que aparentemente exigem para sua interpretação uma constituição ondulatória da luz. (Bohr, Kramers & Slater, 1924, p. 161)

Essa teoria da radiação, que logo foi abandonada por estar em conflito com fatos experimentais, utilizava uma concepção da luz em que esta sofria processos descontínuos de absorção e emissão sem, no entanto, ser constituída por partículas (Bohr rejeitava a ideia dos quanta de luz). A luz não seria também constituída por ondas, mas os processos de emissão e absorção estariam associados a certas ondas (um campo virtual de radiação, que não transmitiria energia), através de relações estatísticas. Os processos individuais de emissão e absorção não podiam ser explicados ou previstos, o que significava uma ruptura com a visão causal da física anterior. A ideia de relações estatísticas entre ondas e fenômenos descontínuos também foi um marco, que serviu de precedente para a análise posterior de

Max Born a respeito da interpretação estatística da mecânica ondulatória.

Segundo a teoria de Bohr, Kramers e Slater, cada átomo está continuamente interagindo (mas sem troca de energia) com todos os outros átomos próximos através de certo mecanismo que é "virtualmente equivalente ao campo de radiação da teoria clássica", ou seja, algo semelhante às ondas eletromagnéticas que seriam emitidas pela oscilação de cargas elétricas. A probabilidade de que um determinado átomo emita ou absorva radiação dependeria de seu próprio estado e também dos estados dos átomos com os quais ele está em comunicação pelo campo virtual de radiação. No entanto, a emissão ou absorção de energia por um átomo não estaria relacionada diretamente com a emissão ou absorção de energia por outros átomos, e por isso a energia apenas se conservaria sob o ponto de vista estatístico (o valor médio seria constante), e não sob o ponto de vista de cada processo individual. A luz propriamente dita não seria nem onda nem partícula, nem uma união dos dois aspectos. Essa teoria desistia de descrever a radiação em si, concentrando-se apenas nos processos de emissão e absorção de energia (Jammer, 1966, pp. 184-185).

Logo depois da proposta dessa teoria, Kramers (inicialmente sozinho e depois com a ajuda de Heisenberg) se dedicou a aplicá-la para o estudo do processo de dispersão da luz na matéria (Jammer, 1966, p. 188). Vários autores, como Sommerfeld, Debye e Davisson, já haviam tentado desenvolver uma teoria quântica da dispersão chegando, no entanto, a problemas graves, porque o modelo atômico de Bohr-Sommerfeld levava à consequência de que todos os harmônicos das frequências próprias dos elétrons deveriam ser frequências de ressonância, o que não se mostrou válido (Jammer, 1966, p. 189). Desistindo, no entanto, do uso do modelo semi-clássico de Bohr-Sommerfeld e tratando o átomo como um conjunto de osciladores virtuais, Kramers e Heisenberg conseguiram contornar o problema encontrado pelos pesquisadores anteriores.

O trabalho de Kramers sobre teoria da dispersão introduziu uma nova ideia: além de levar em conta apenas as frequências de absorção atômicas, ele introduziu na fórmula as frequências de emissão, com sinal negativo, para que a fórmula quântica obtida tivesse como limite para grandes números quânticos a fórmula clássica (Waerden, 1967, p. 14). Existiriam, portanto, os "osciladores virtuais positivos" e "osciladores virtuais negativos".

Esses e outros trabalhos estavam se afastando da física clássica, adotando uma visão mais abstrata dos processos atômicos e introduzindo um formalismo que, muitas vezes, não tinha interpretação física clara, mas levava a resultados interessantes.

5. MAX BORN E A "MECÂNICA QUÂNTICA"

Em 1924 Max Born publicou um importante trabalho (completado em junho de 1924), no qual analisou a possibilidade de criar um método geral que permitisse passar das fórmulas da física clássica para as da "mecânica quântica" (Born, 1924) – introduzindo nesse artigo o nome "mecânica quântica", que não era ainda utilizado (Waerden, 1967, pp. 15-16). O autor defendia o abandono do tratamento semi-clássico da estrutura atômica – que não tinha produzido bons resultados no caso de átomos com vários elétrons – e o estudo desses sistemas através de uma "mecânica quântica" (uma expressão que ainda não era usual) analisando a interação entre os elétrons por um método semelhante ao de Kramers (Jammer, 1966, pp. 191-192). Max Born mostrou também que havia uma correspondência entre certos resultados obtidos em sua análise e as fórmulas da mecânica analítica clássica.

Aparentemente, Max Born havia se convencido em 1922-1923 de que não era possível aplicar o modelo do átomo de Bohr a sistemas com vários elétrons. Trabalhando com seus assistentes Pauli e Heisenberg, Max Born aplicou métodos de perturbação ao átomo de hélio, porém os resultados obtidos não concordavam com os dados espectroscópicos (Waerden, 1967, pp. 19-20). “Ficamos cada vez mais convencidos de que era necessária uma mudança radical nos fundamentos da física, isto é, um novo tipo de mecânica para o qual utilizamos o termo mecânica quântica” (Born, *apud* Waerden, 1967, p. 20).

No seu artigo de 1924, Max Born discute inicialmente as dificuldades encontradas no estudo de átomos com vários elétrons. Supunha-se que os vários elétrons dentro de um átomo estavam em movimento periódico e que interagiam entre si através de campos eletromagnéticos variáveis, com frequência da mesma ordem da frequência da luz visível. Para compreender a interação entre os vários elétrons era necessário saber, primeiramente, como cada elétron interage com a radiação – e isso era o que Bohr, Kramers e Slater haviam tentado esclarecer. Generalizando as ideias dos osciladores virtuais dentro do átomo e do campo virtual de radiação, Born imaginou que seria possível superar as dificuldades encontradas, e desenvolver a teoria dos átomos com vários elétrons (Born, 1924, p. 181)[2].

Em vez de tentar descrever os próprios estados estacionários do átomo (como no caso do modelo de Bohr), Max Born raciocinou da seguinte forma:

> Sabíamos que as frequências de vibração eram proporcionais às diferenças de energia entre dois estados estacionários. Aos poucos tornou-se claro que essa era a principal característica da nova mecânica: cada grandeza física depende de dois estados estacionários e não de uma órbita, como na mecânica clássica. O problema era encontrar as leis para essas ‘quantidades de transição’. (Born, *apud* Waerden, 1967, p. 20)

Born indicou que a fórmula de dispersão de Kramers continha apenas ‘quantidades de transição’, no sentido acima, e considerou que:

[2] Foi utilizada a tradução contida em Waerden, 1967.

> Esse foi o primeiro passo do domínio luminoso da mecânica clássica para o mundo subterrâneo, ainda escuro e inexplorado, da nova mecânica quântica. Eu dei o passo seguinte com a questão: não se poderia encontrar, por um processo sistemático de adivinhação semelhante a esse, a interação entre dois sistemas eletrônicos em termos de 'quantidades de transição'? (Born, *apud* Waerden, 1967, p. 20)

Born assumiu que, para fins de cálculo de emissão, absorção e dispersão de radiação, um átomo pode ser considerado como um conjunto de "osciladores virtuais" cujas frequências $\nu(n,n')$ são dadas pelas diferenças de energia $W(n)–W(n')$ entre os estados estacionários do átomo:

$$\nu(n,n') = (1/h)[W(n) - W(n')]$$

A cada oscilador virtual corresponde (pelo princípio de correspondência de Bohr) um termo na série de Fourier do movimento do sistema no estado de energia $W(n)$, calculada classicamente. Porém, a física clássica trata as grandezas como contínuas, e a física quântica deve considerar descontinuidades. Por isso, Born sugeriu que os coeficientes diferenciais das fórmulas clássicas deveriam ser substituídos por diferenças finitas, nas fórmulas quânticas (Waerden, 1967, p. 16). Ele mostrou como aplicar essa ideia para deduzir a fórmula de dispersão de Kramers, e também fez uma análise quântica da teoria de perturbação.

Além da importância das próprias ideias do artigo de Max Born de 1924, é importante indicar que Werner Heisenberg era seu assistente em Göttingen na época em que redigiu esse trabalho, e que em uma nota de rodapé Born menciona que alguns cálculos foram feitos por Heisenberg: "Sou muito grato ao Sr. W. Heisenberg por muitas sugestões e ajuda com os cálculos" (Born, 1924, p. 182, nota 3). A participação de Heisenberg nas pesquisas de Born e de Kramers, foi certamente decisiva para seu trabalho posterior.

No inverno de 1924-1925 Heisenberg esteve em Copenhagen, trabalhando com Bohr e Kramers. Durante esse período ele escreveu com Kramers um artigo a respeito da refração da radiação (Kramers & Heisenberg, 1925), utilizando um método baseado no trabalho de Max Born de 1924: utilizaram os osciladores virtuais (que Kramers já utilizava), séries de Fourier e a substituição de diferenciais por diferenças finitas (Waerden, 1967, p. 16).

Pascual Jordan começou a trabalhar com Max Born no primeiro semestre de 1925. Eles estudaram a teoria do corpo negro de Planck, procurando reformulá-la por causa de alguns aspectos clássicos que ela ainda continha. Planck havia utilizado a física clássica para descrever a interação entre matéria e luz (absorção e emissão). Born e Jordan refizeram os cálculos, utilizando a teoria quântica para esses processos de absorção e emissão (Waerden, 1967, p. 21). O trabalho foi completado em 11 de junho de 1925.

No desenvolvimento desse trabalho surgiu outro ponto que, depois, foi incorporado à mecânica quântica:

> Ficamos impressionados pelo fato de que as 'quantidades de transição' que apareciam em nossas fórmulas sempre correspondiam a quadrados da amplitude de vibrações na teoria clássica. Assim, parecia muito plausível que pudesse ser formulada a noção de 'amplitudes de transição'. Discutimos essa ideia em nossos encontros diários, nos quais Heisenberg frequentemente participava, e eu sugeri que essas amplitudes poderiam ser quantidades centrais, e que poderiam ser manipuladas por algum tipo de multiplicação simbólica. Jordan confirmou que eu lhe falei sobre essa possibilidade. (Born, *apud* Waerden, 1967, p. 20)

6. O ARTIGO DE HEISENBERG DE 1925

Costuma-se considerar que o artigo elaborado por Werner Heisenberg em meados de 1925 representou o ponto de transição da antiga teoria quântica para a mecânica quântica propriamente dita (Waerden, 1967, p. 19). No entanto, não se pode dizer que esse artigo já continha a mecânica matricial. Nesse trabalho, Heisenberg introduziu apenas um ponto de partida para a criação da mecânica quântica – e, devemos alertar, esse trabalho nada tinha a ver com o princípio de Heisenberg, que surgiu apenas dois anos depois.

Aparentemente, Heisenberg estava ao mesmo tempo procurando resolver questões específicas da teoria atômica – como a teoria da dispersão – e preocupando-se que os próprio fundamentos daquilo que fazia. À medida que os trabalhos de física quântica se tornavam mais abstratos (como já foi mostrado) e que a física clássica deixava de ser um bom guia para o desenvolvimento das pesquisas, Heisenberg começou a procurar por um método que pudesse levar diretamente a resultados quânticos, sem passar pelas tentativas que partiam da física clássica e iam fazendo adaptações (Jammer, 1966, pp. 199-200).

Ao tentar desenvolver esse tipo de método, Heisenberg foi guiado, entre outras coisas, por alguns princípios epistemológicos. Em primeiro lugar, por influência de Bohr (Jammer, 1966, pp. 197-198), ele já havia aceitado a ideia de que a física quântica não precisava seguir ou se apoiar sobre a física clássica e que poderia necessitar introduzir conceitos que nada tivessem de familiar. Ou seja: não havia nada de sagrado na física antiga, e talvez fosse possível introduzir mudanças tão grandes quanto as da teoria da relatividade (ou maiores). Outro princípio básico foi que a física deveria se basear em grandezas observáveis e mensuráveis, e que tratar de grandezas não mensuráveis podia trazer grandes problemas. Essa ideia, de orientação empirista, tinha sido enfatizada por Einstein, em seus primeiros trabalhos sobre relatividade especial, e foi adotada por Heisenberg (Jammer, 1966, pp. 198-199).

No estudo da teoria da dispersão, Kramers e Heisenberg já haviam abandonado a descrição semi-clássica do movimento dos elétrons no átomo, trabalhando apenas com ideias mais abstratas e com as frequências dos osciladores virtuais associados aos átomos. Heisenberg começou a procurar algum tipo de procedimento que permitisse calcular as propriedades da radiação emitida pelos átomos sem fazer nenhuma hipótese sobre a estrutura desses átomos.

No início do seu artigo de 1925 Heisenberg apresenta uma lista de fracassos da antiga teoria quântica e comenta a necessidade de uma abordagem diferente para resolver esses problemas (Heisenberg, 1925, p. 261)[3]. Os fracassos principais seriam: a antiga teoria quântica não consegue proporcionar resultados adequados quanto os átomos estão submetidos a campos elétricos e magnéticos cruzados; não consegue descrever átomos com vários elétrons; e não descreve adequadamente átomos submetidos a campos periódicos. O modelo atômico da antiga teoria quântica introduzia a descrição de órbitas para os elétrons. Heisenberg comentou que essa abordagem

> [...] pode ser seriamente criticada porque contém, como elemento básico, relações entre quantidades que parecem ser inobserváveis em princípio, como a posição e o período de rotação de um elétron. Assim, falta um fundamento físico evidente a essas regras, a menos que ainda se mantenha a esperança de que as quantidades até agora não observáveis possam futuramente ser incluídas no campo da determinação experimental. (Heisenberg, 1925, p. 261)

No entanto, Heisenberg supôs que essa esperança não devia ser mantida, pois as próprias regras fundamentais de Bohr – segundo as quais a frequência da radiação emitida por um átomo não tem relação com a frequência de revolução do elétron – mostravam uma quebra completa em relação à física clássica. Por isso, em vez de tentar desenvolver a teoria quântica segundo a abordagem antiga, Heisenberg afirmou:

> Nesta situação, parece razoável abandonar toda esperança de observar as quantidades que até hoje são inobserváveis,

[3] Utilizamos a tradução contida em Waerden, 1967.

> como a posição e o período do elétron, e aceitar que a concordância parcial das regras quânticas com a experiência é mais ou menos casual. Em vez disso, parece mais razoável tentar estabelecer uma mecânica quântica teórica análoga à mecânica clássica, mas na qual apenas ocorrem relações entre quantidades observáveis. (Heisenberg, 1925, p. 262)

No seu trabalho, Heisenberg assumiu explicitamente que a mecânica clássica não era válida no domínio atômico. Essa era a opinião aceita pelos grupos de Bohr e de Born, na época. No entanto, as fórmulas quânticas deveriam convergir para equações válidas na física clássica, para grandes números quânticos, de acordo com o princípio de correspondência de Niels Bohr, que estava guiando grande parte das pesquisas quânticas desde 1918. Todas as fórmulas do artigo de Heisenberg possuem um equivalente clássico, nesse sentido (Waerden, 1967, p. 28). Para satisfazer o princípio de correspondência, Heisenberg adotou nesse artigo a estratégia que Born já havia empregado antes: substituir diferenciais por diferenças finitas.

Uma ideia nova que aparece nesse artigo é a de que é necessário desenvolver uma nova *cinemática* quântica. Basicamente, a própria descrição dos movimentos utilizada em modelos como o do átomo de Bohr devia ser abandonada, substituída por outro tipo de descrição. Na física clássica, a equação do movimento relaciona a posição $x(t)$ às suas derivadas. Heisenberg supôs que o próprio significado da quantidade x deveria ser alterado e que ele não deveria mais representar a posição de uma partícula no espaço (Waerden, 1967, p. 29).

Podemos considerar que, em parte, esse passo era justificável utilizando-se um ponto de vista epistemológico empirista (como o utilizado por Einstein na relatividade especial, em 1905) negando a validade de introduzir na física grandezas inobserváveis, como a posição de um elétron no átomo. De fato, a posição de Heisenberg nessa época era que devia ser desenvolvida uma mecânica quântica teórica baseada completamente em relações entre quantidades observáveis (Waerden, 1967, p. 33). Ele considerava a posição de um elétron como inobservável. Note-se que isso está em conflito com o princípio de indeterminação de Heisenberg, desenvolvido dois anos depois, que estabelece que é possível determinar tão exatamente quanto se queira a posição de uma partícula, desde que não se tente determinar ao mesmo tempo seu momentum. Foi essa postura que o levou a procurar uma nova interpretação de $x(t)$. No entanto, esse ponto de vista poderia levar Heisenberg simplesmente a rejeitar o uso da grandeza x, em vez de tentar atribuir-lhe um significado diferente. "Se, em vez de uma quantidade clássica $x(t)$ tivermos uma quantidade quantum-teórica, qual quantidade quantum-teórica aparecerá no lugar de $x(t)$?" (Heisenberg, 1925, p. 263).

> [...] é necessário ter em mente que na teoria quântica não foi possível associar o elétron com um ponto no espaço, considerado como uma função do tempo, por meio de quantidades observáveis. No entanto, mesmo na teoria quântica, é possível atribuir ao elétron a emissão de radiação. Para caracterizar essa radiação, necessitamos primeiramente das frequências que aparecem como função de duas variáveis. (Heisenberg, 1925, p. 263)

Heisenberg se perguntou qual quantidade quântica poderia substituir no lugar de $x(t)$, pensando implicitamente em fenômenos periódicos, pois estava preocupado com questões de radiação emitida ou absorvida por átomos. No caso da física clássica, a função $x(t)$ que descreve uma função periódica com frequência angular ω pode ser desenvolvido em uma série de Fourier:

$$x(t) = \sum_{-\infty}^{\infty} a_\alpha \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\omega\mathrm{t}}$$

Na teoria quântica, as frequências dependem de um número quântico n, por isso Heisenberg escreveu inicialmente:

$$x(t) = \sum_{-\infty}^{\infty} a_\alpha\,(n)\ e^{i\alpha\omega n t}$$

No entanto, as grandezas quânticas observáveis não são os estados estacionários dos sistemas atômicos e sim a radiação emitida ou absorvida, que depende de dois estados estacionários (e, portanto, de dois números quânticos). Assim, em vez dos termos usuais da série de Fourier, Heisenberg introduziu outros termos:

$$a(n,n-\alpha)\ e^{i\alpha\omega(n,n-\alpha)t}$$

Este termo corresponderia à transição do estado estacionário descrito pelo número quântico *n* para o estado correspondente ao número quântico $n-\alpha$, com emissão de radiação de frequência $\nu=\omega/2\pi$.

Essas "quantidades de transição" $a(n,n\pm\alpha)$ são um componente importante do trabalho de Heisenberg. Como vimos, Born já havia considerado que seria importante introduzir "amplitudes de transição" na nova mecânica quântica. Ambos pesquisadores estavam preocupados com a possibilidade de calcular as intensidades de linhas espectrais, que deveriam ser proporcionais ao quadrado da amplitude de transição (Waerden, 1967, pp. 29-30). Van der Waerden aponta, em sua análise do trabalho de Heisenberg, que ele utilizou ideias e simbolismo que já apareciam no seu artigo com Kramers sobre osciladores virtuais: vetores complexos, que determinariam a polarização e a fase da luz emitida, descritos pela expressão

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

onde os $\mathsf{A}(n,n-\alpha)$ seriam as amplitudes (vetoriais) dos momentos elétricos dos osciladores virtuais correspondentes à transição do estado *n* para o estado $n-\alpha$ (Waerden, 1967, pp. 30-31).

No trabalho de Kramers e Heisenberg apareciam certos termos representados por $f(n+\alpha,n)$ que, como van der Waerden mostrou, correspondem (a menos de uma constante) à expressão

$|a(n,n-\alpha)|^2\ \nu(n,n-\alpha)$ do artigo de Heisenberg de 1925 (Waerden, 1967, p. 31). Os coeficientes $a(n,n-\alpha)$ também permitiriam calcular a probabilidade de emissão e absorção de radiação pelo átomo.

Voltemos, no entanto, ao artigo de Heisenberg. Ele introduziu como grandezas quânticas fundamentais (e, em princípio, observáveis) os vetores complexos

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

que podiam ser interpretados como amplitudes dos momentos elétricos dos osciladores virtuais, determinando intensidade, polarização e fase, sendo considerados vetores complexos e, portanto, tendo 6 componentes.

> Para completar a descrição da radiação é necessário não apenas ter as frequências, mas também as amplitudes. As amplitudes podem ser tratadas como vetores complexos, cada um determinado por seis componentes independentes, e determinam tanto a polarização quanto a fase. (Heisenberg, 1925, p. 263)

Como van der Waerden comentou, é possível medir a polarização e a intensidade da radiação, mas não sua fase; assim, na verdade, havia um aspecto não-observável na descrição de Heisenberg (Waerden, 1967, p. 33).

No decorrer de seu artigo, Heisenberg abandona a grandeza vetorial complexa acima descrita e passa a utilizar o escalar $a(n,n-\alpha)$ em vez de $\mathsf{A}(n,n-\alpha)$.

O ponto de partida de Heisenberg foi a expansão de Fourier (em forma complexa) de uma função periódica do tempo, que tem papel fundamental em qualquer teoria clássica de oscilações e ondas (Jammer, 1966, pp. 200-202),

$$\xi_n = \sum_p x_{(n,p)} . e^{i2\pi\nu(n,p)t}$$

onde os coeficientes $x_{(n,p)}$ são as amplitudes correspondentes a cada frequência $\nu_{(n,p)}$.

Heisenberg procurou inicialmente um equivalente quântico da série de Fourier, mas não conseguiu. Em vez de uma série (somatório), começou então a analisar o conjunto infinito de termos da série, mas sem somá-los, e tentou trabalhar com esse conjunto, considerando que a grandeza ξ_n poderia corresponder, de alguma forma, ao conjunto de termos que representou como:

$$\xi_n \leftrightarrow X_{(n,n-p)} \exp\,(2\pi i\nu_{(n,n-p)}t)$$

> Se agora considerarmos uma dada quantidade $x(t)$ da teoria clássica, ela pode ser considerada como representada por um conjunto de quantidades da forma
>
> $$A_\alpha(n).e^{i\omega(n)\alpha t}$$
>
> (Heisenberg, 1925, p. 264)

No caso das quantidades quânticas, Heisenberg considerou que a introdução das somas ou integrais de Fourier não teria sentido, porque as grandezas dependem de *dois* números inteiros, e não de um único número (Heisenberg, 1925, p. 264). Por isso, a grandeza $x(t)$ seria representada, na física quântica, pelo *conjunto de quantidades*

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

onde n e α podem adquirir uma infinidade de valores.

Posteriormente, Born vai substituir $n-\alpha$ por m e perceber que Heisenberg está introduzindo *matrizes* para representar as grandezas quânticas.

Antes de Heisenberg, como vimos, vários autores estavam analisando o átomo como um conjunto de osciladores virtuais. No entanto, ninguém havia considerado que *uma grandeza física* deverias ser substituída, na física quântica, por um conjunto infinito de quantidades.

Heisenberg analisou, em seguida, o que significaria elevar ao quadrado uma grandeza quântica, ou multiplicá-la por outra.

Nas equações da física clássica, é comum o surgimento do produto de duas grandezas (ou o quadrado de uma grandeza). Qual seria o correspondente quântico?

Se multiplicarmos $A(n,n-\alpha).e^{i\omega(n,n-\alpha)t}$ por $A(n-\alpha,n-\beta).e^{i\omega(n-\alpha,n-\beta)t}$ obteremos

$$\{A(n,n-\alpha).e^{i\omega(n,n-\alpha)t}\}.\{A(n-\alpha,n-\beta).e^{i\omega(n-\alpha,n-\beta)t}\} =$$

$$= [A(n,n-\alpha).A(n-\alpha,n-\beta)].[e^{i\omega(n,n-\alpha)t}.e^{i\omega(n-\alpha,n-\beta)t}] =$$

$$= A(n,n-\alpha).A(n-\alpha,n-\beta).e^{it[\omega(n,n-\alpha)+\omega(n-\alpha,n-\beta)]}$$

Esse expoente pode ser substituído por $i\omega(n,n\text{-}\beta)t$, por causa da regra das frequências de Bohr. Portanto, o produto seria dado por:

$$\{A(n,n-\alpha).e^{i\omega(n,n-\alpha)t}\}.\{A(n-\alpha,n-\beta).e^{i\omega(n-\alpha,n-\beta)t}\} =$$

$$= A(n,n-\alpha).A(n-\alpha,n-\beta).e^{i[\omega(n,n-\beta)t]}$$

É razoável considerar que o produto $A(n,n-\alpha).A(n-\alpha,n-\beta)$ pode ser considerado como uma nova amplitude que, para ser coerente com o expoente, seria $A(n,n-\alpha).A(n-\alpha,n-\beta)= B(n,n-\beta)$. Porém, no produto acima, a relação é válida *qualquer que seja o valor de* α. Para considerar *todos os valores de* α, deve-se então fazer um somatório sobre esse número, e teremos então:

$$B(n,n-\beta).e^{i[\omega(n,n-\beta)t]} =$$

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

Como a expressão da esquerda é obtida a partir do produto de duas expressões semelhantes, Heisenberg considerou que, no lado direito, $B(n,n-\beta).e^{i[\omega(n,n-\beta)t]}$ poderia ser considerado como sendo o quadrado de $A(n,n-\beta).e^{i[\omega(n,n-\beta)t]}$ (Heisenberg, 1925, p. 265). Note-se que a parte exponencial é igual dos dois lados e não depende de α. A parte importante da fórmula acima é aquela que se refere às amplitudes.

A regra de multiplicação de Heisenberg parece ter se originado da análise daquilo que ocorre numa sequência de transições atômicas (Waerden, 1967, p. 32-34). Se um átomo passa do estado caracterizado pelo número quântico *n* para outro estado de $n-\alpha$ e, depois, deste estado para um outro estado $n-\beta$, as frequências angulares ω das radiações emitidas são $\omega(n,n-\alpha)$ e $\omega(n-\alpha,n-\beta)$, proporcionais às diferenças de energia entre os estados estacionários. Se o átomo passar diretamente de *n* para $n-\beta$, a frequência resultante $\omega(n,n-\beta)$ será a soma das duas anteriores:

$$(h/2\pi)\omega(n,n-\alpha) = E_n - E_{n-\alpha}$$

$$(h/2\pi)\omega(n-\alpha,n-\beta) = E_{n-\alpha} - E_{n-\beta}$$

$$\therefore\ (h/2\pi)\omega(n,n-\beta) = E_n - E_{n-\beta} =$$

$$= (E_n - E_{n-\alpha}) + (E_{n-\alpha} - E_{n-\beta}) =$$

$$= (h/2\pi)[\omega(n,n-\alpha)+\omega(n-\alpha,n-\beta)]$$

Qual a regra que se aplicaria às grandezas $a(n,n-\alpha).e^{i\alpha\omega(n,n-\alpha)t}$ com as quais Heisenberg quer representar os fenômenos? Evidentemente, não é possível *somar* duas expressões desse tipo para obter uma terceira, de acordo com a regra de frequência acima, porque

$$a(n,n-\alpha).e^{i\alpha\omega(n,n-\alpha)t} + a(n-\alpha,n-\beta).e^{i\alpha\omega(n-\alpha,n-\beta)t} \neq$$

$$\neq a(n,n-\beta).e^{i\alpha\omega(n,n-\beta)t}$$

No entanto, pode-se satisfazer a regra de adição das frequências *multiplicando* duas grandezas desse tipo, pois nesse caso os expoentes (onde aparecem as frequências) se somam:

$$\{a(n,n-\alpha).e^{i\alpha\omega(n,n-\alpha)t}\}.\{a(n-\alpha,n-\beta).e^{i\alpha\omega(n-\alpha,n-\beta)t}\} =$$

$$= a(n,n-\alpha).a(n-\alpha,n-\beta).e^{i\alpha\omega(n,n-\beta)t}$$

Portanto, era natural interpretar $a(n,n-\alpha).a(n-\alpha,n-\beta)$ como sendo igual a $a(n,n-\beta)$. Essa parece ter sido a origem da regra de multiplicação de Heisenberg, embora esse raciocínio não apareça claramente no artigo (Waerden, 1967, p. 34).

Partindo dessa representação do quadrado de uma grandeza quântica, Heisenberg representou o produto de duas grandezas quânticas diferentes, mas indicou apenas as amplitudes – já que a parte exponencial é sempre do mesmo tipo (Heisenberg, 1925, p. 266):

$$E(n,n-\beta) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} A(n,n-\alpha).B(n-\alpha,n-\beta)$$

Heisenberg comentou então que o produto assim definido não é comutativo: "Enquanto na teoria clássica $x(t)y(t)$ é sempre igual a $y(t)x(t)$, isso não é necessário na teoria quântica" (Heisenberg, 1925, p. 266). Essa parte do artigo de Heisenberg, em que ele introduz as grandezas quânticas e a regra do produto, foi chamada por ele de "cinemática da teoria quântica".

Em outra parte de seu trabalho, Heisenberg analisou a "dinâmica" da teoria quântica. A condição de quantização de Bohr-Sommerfeld era expressa da seguinte forma, na antiga teoria quântica:

$$J = \oint p.dq = \int_0^T mv^2 dt = nh$$

Na antiga teoria quântica, essa regra de quantização era aplicada a partir de um modelo semi-clássico do fenômeno estudado (por exemplo, movimento dos elétrons em torno do núcleo atômico). Heisenberg queria, no entanto, obter regras que permitissem aplicar a condição de quantização diretamente às grandezas mensuráveis, ou seja, as amplitudes (ou intensidades) de radiação de cada frequência, sem introduzir um modelo microscópico envolvendo grandezas inobserváveis. Através de uma série de substituições, ele acabou por obter a fórmula (Jammer, 1966, pp. 202-203):

$$\mathrm{h}=8\pi^2\mathrm{m}\sum_{p=0}^{\infty}\left\{\left|x_{n+\mathrm{p,n}}\right|^2 \nu_{n+\mathrm{p,n}} - \left|x_{\mathrm{n,n}-p}\right|^2 \nu_{\mathrm{n,n}-p}\right\}$$

Essa equação envolve apenas as frequências e suas amplitudes, associando-os à constante de Planck h. Satisfaz, assim, o princípio que Heisenberg estava tentando satisfazer, de apenas utilizar grandezas observáveis e mensuráveis na teoria. Note-se que o "x" nessas equações não representa coordenadas; e que não há nenhuma introdução de constantes espaciais, velocidade, nem propriedades do elétron (massa, carga).

Por fim, Heisenberg aplicou os resultados acima indicados à análise do oscilador não-harmônico, com uma força contendo termos de primeira e segunda ordem em x:

$$\ddot{x} + \varpi_o^2 x + \lambda \mathrm{x}^2 = 0$$

Deduziu que a energia desse oscilador deveria obedecer à seguinte relação, válida como aproximação de segunda ordem em λ:

$$\mathrm{W} = \frac{\mathrm{h}\varpi_0}{2\pi}\left(\mathrm{n} + \frac{1}{2}\right) = \mathrm{h}\nu\left(\mathrm{n} + \frac{1}{2}\right)$$

Como o valor de λ não aparece na equação, ela deve ser válida também para o caso limite λ=0. No entanto, esse é o caso do oscilador harmônico simples, para o qual se utilizava a expressão $W=nh\nu$, em vez da indicada acima. O surgimento de um fator 1/2 já havia ocorrido, na verdade, em uma versão da teoria de Planck do corpo negro; mas não era aceita, de um modo geral.

Analisando um sistema em rotação, Heisenberg também obteve um fator 1/2 na expressão de sua energia (Jammer, 1966, p. 203). Sua equação estava de acordo com os resultados experimentais obtidos três anos antes por A. Kratzer, na análise do espectro de rotação de moléculas.

Pode-se dizer que esse foi o único resultado obtido por Heisenberg em seu trabalho que era novo e que tinha alguma aplicação direta à experiência. Os outros resultados que ele obteve ou já eram conhecidos ou eram apenas expressões matemáticas sem uso imediato.

Vemos que esse primeiro trabalho de Heisenberg estava longe de constituir uma base sólida para a teoria quântica. O autor concluiu seu artigo com um comentário que parece indicar quão inseguro ele estava:

> Apenas depois que os procedimentos que aqui foram aplicados de forma bastante superficial tiverem sido submetidos a uma investigação matemática penetrante, ficará claro se um método de determinar os dados teóricos quânticos em termos de relações entre grandezas observáveis – como proposto aqui – já pode ser considerado como satisfatório em princípio, ou se ele é ainda uma abordagem grosseira demais para o problema obviamente muito complicado de uma mecânica quântica teórica. (Heisenberg, 1925, p. 276)

7. O ARTIGO DE BORN E JORDAN

Apesar de sua interação com Max Born, Heisenberg desenvolveu o seu primeiro trabalho sobre mecânica quântica sozinho. Ele parece ter iniciado esse trabalho em maio de 1925. Em uma carta de Heisenberg para Kronig, datada de 5 de junho de 1925, ele analisa o oscilador não-harmônico[4] e introduz a multiplicação de grandezas quânticas (Waerden, 1967, p. 24).

---

[4] Heisenberg já havia começado a estudar em 1922 o oscilador não-harmônico, com uma força contendo tanto termos de primeira quanto de segunda ordem. Há uma carta de Heisenberg a Pauli, de setembro de 1922, em que ele estuda esse oscilador (Waerden, 1967, p. 23).

Durante o mês de junho, teve um forte ataque de febre do feno e se refugiou durante cerca de 10 dias na ilha de Helgoland, onde não há grama. Lá surgiram algumas das ideias fundamentais de seu artigo. Retornando depois a Göttingen, comunicou-se com Pauli, trocando ideias a respeito do seu trabalho. Há uma carta datada de 21 de junho na qual ele descreve que o trabalho em que tentava "fabricar uma mecânica quântica" estava se desenvolvendo lentamente. Ele se refere a alguns resultados que havia obtido, como a energia do oscilador que deveria ser $(n+½)h\nu$ e não $nh\nu$, como se aceitava na época (Waerden, 1967, p. 25).

Outras cartas a Pauli, de 24 de junho, 29 de junho e 9 de julho, mostram o desenvolvimento de sua pesquisa (Waerden, 1967, pp. 25-27). Essa correspondência, e a falta de discussão com Max Born sobre o assunto, mostram que Heisenberg se sentia mais à vontade para discutir suas novas ideias com o antigo colega do que com seu professor.

O texto final do artigo de Heisenberg ficou pronto no dia 9 de julho de 1925, quando ele enviou o trabalho para Pauli e pedindo-lhe que dissesse sua opinião. Como os comentários foram positivos, Heisenberg fez uma versão final do artigo e o entregou a Max Born alguns dias depois, pedindo-lhe que decidisse se valia a pena publicá-lo, pois temia que fosse ainda incipiente mas não estava conseguindo avançar, pedindo também a Born que tentasse desenvolvê-lo mais (Waerden, 1967, p. 36). Sem esperar a opinião do professor, Heisenberg viajou para a Inglaterra, atendendo a um convite para apresentar um seminário em Cambridge a respeito de trabalhos anteriores (Jammer, 1966, pp. 203-204).

Depois de estudar o trabalho de Heisenberg, Born percebeu após alguns dias que a regra de multiplicação introduzida no artigo era equivalente à operação de multiplicação de duas matrizes, que ele próprio havia aprendido enquanto era estudante. De fato, o produto z_{ef} de duas matrizes x_{ab} e y_{cd} (suponhamos que ambas sejam quadradas e de mesma ordem, para simplificar) é dado por:

$$z_{ef} = \sum_k x_{ek} y_{kf}$$

Na época, o estudo de matrizes não era parte da formação matemática dos físicos, pois até essa época tal ramo da matemática praticamente não tinha aplicações científicas. Heisenberg não conhecia o cálculo matricial. Born, que conhecia esse formalismo e já o havia aplicado em um trabalho sobre teoria de cristais (Jammer, 1966, p. 207), dispunha da ferramenta matemática necessária para desenvolver de forma adequada o trabalho de Heisenberg.

Max Born descreveu sua primeira reação ao trabalho de Heisenberg:

> Lembro-me que não li esse manuscrito imediatamente porque eu estava cansado após o período escolar [...] Mas quando, alguns dias depois, eu o li, fiquei fascinado. Heisenberg havia tomado a ideia das amplitudes de transição e desenvolvido um cálculo para elas, seguindo a correspondência com os coeficientes da expansão clássica de uma quantidade vibratória em suas componentes harmônicas (série de Fourier). Se multiplicarmos duas expansões desse tipo, obteremos a nova expansão para o produto [...] Heisenberg sugeriu esquecer as séries em si e considerar o conjunto de coeficientes que representam as quantidades físicas em questão; então obtém-se uma regra de multiplicação para esses conjuntos de coeficientes. (Born, *apud* Waerden, 1967, p. 36)

Depois de ler o trabalho de Heisenberg e se convencer de que era uma contribuição valiosa, Born o enviou para publicação na revista *Zeitschrift für Physik* e continuou a pensar sobre seu conteúdo. Depois de alguns dias, percebeu o que estava por trás da regra de multiplicação de Heisenberg:

> Uma manhã [...] eu repentinamente vi a luz: a multiplicação simbólica de Heisenberg nada mais era do que o cálculo matricial, que eu conhecia bem desde meus dias de estudante, pelas aulas de Rosanes em Breslau. Encontrei isso

> simplificando um pouco a notação: em vez de $q(n,n+\tau)$ eu escrevi $q(n,m)$ e, reescrevendo a equação de Heisenberg para as condições de quantização de Bohr, reconheci imediatamente seu significado formal. Significava que os dois produtos matriciais $\boldsymbol{pq}$ e $\boldsymbol{qp}$ não são idênticos. (Born, *apud* Waerden, 1967, p. 37)

Apesar de conhecer o cálculo matricial, Born encontrou dificuldades em desenvolver o trabalho de Heisenberg. Entre outras coisas, não conseguia demonstrar que os termos não-diagonais da relação matricial $\boldsymbol{pq}-\boldsymbol{qp}$ eram nulos. Pediu inicialmente a colaboração de Pauli, que não quis se envolver nesse estudo. Depois convidou Jordan para auxiliá-lo e este aceitou, resolvendo rapidamente as dificuldades encontradas (Waerden, 1967, pp. 37-38).

Um dos poucos livros-texto da época que apresentava o cálculo matricial foi publicado em 1924: *Methoden der mathematischen Physik* ("Métodos da física matemática"), de Richard Courant e David Hilbert. Um dos assistentes de Courant na preparação desse livro foi Pascual Jordan (Jammer, 1966, p. 207), e foi Jordan quem auxiliou Max Born no desenvolvimento da teoria esboçada por Heisenberg.[5]

Born enviou o artigo de Heisenberg para publicação no final de julho de 1925 e começou a trabalhar com Pascual Jordan para aperfeiçoar as ideias incipientes daquele trabalho. Dois meses depois, no final de setembro de 1925, Born e Jordan enviaram para publicação um trabalho intitulado "Sobre a mecânica quântica" em que aperfeiçoavam as ideias lá esboçadas, apresentando aquilo que Max Jammer considera "a primeira formulação rigorosa da mecânica matricial" (Jammer, 1966, p. 209). Nesse trabalho (Born & Jordan, 1925) eles apresentam

[5] Segundo Max Jammer, "Publicado no final de 1924, ele [o livro de Courant e Hilbert] continha exatamente as partes da álgebra e análise sobre as quais o desenvolvimento posterior da mecânica quântica tinha que se basear; seus méritos para o rápido crescimento posterior da nossa teoria não pode ser exagerado" (Jammer, 1966, p. 207).

inicialmente o ferramental matemático básico do cálculo das matrizes – de forma análoga ao que Einstein fez, apresentando os princípios básicos do cálculo tensorial, em seu trabalho sobre relatividade geral de 1916. Depois, passam a construir uma mecânica em que as grandezas (como coordenada e momento) são representadas por matrizes. Note-se que esse é um passo novo, que não havia sido introduzido por Heisenberg, já que este não havia utilizado tais grandezas em seu artigo. A posição *q* é representada pela matriz

$$\mathbf{q} = [q_{mn} \exp(2\pi i\nu_{mn}t)]$$

a velocidade $\dot{q}$ pela matriz

$$\dot{q} = [2\pi i\nu_{mn}q_{mn} \exp(2\pi i\nu_{mn}t)]$$

e o momento *p* pela matriz

$$p = [p_{mn} \exp(2\pi i\nu_{mn}t)]$$

A partir das matrizes de momento e posição, Born e Jordan escreveram a representação matricial do Hamiltoniano *H*(*p,q*) e mostraram a validade de equações equivalentes às equações canônicas da mecânica clássica:

$$\dot{q} = \partial H/\partial p; \quad \dot{p} = -\partial H/\partial q$$

Eles também construíram o equivalente matricial do princípio de ação mínima, utilizando como Lagrangeano (matricial) a expressão análoga à da física clássica:

$$L = p\dot{q} - H(p,q)$$

Nesse trabalho, Born e Jordan estabeleceram pela primeira vez aquilo que posteriormente foi chamado de "relação de comutação" da mecânica quântica, sob forma matricial (Jammer, 1966, p. 210):

$$pq - qp = (h/2\pi i)\mathbf{1}$$

onde **1** representa a matriz unitária.

Born e Jordan estudaram também, nesse artigo, o oscilador harmônico, o oscilador não-harmônico e a quantização do campo eletromagnético. Essas aplicações são desenvolvidas de um modo muito mais natural do que no artigo de Heisenberg.

Os pontos principais do artigo de Born e Jordan são (Waerden, 1967, p. 38): a interpretação da multiplicação simbólica de Heisenberg como um produto matricial; a obtenção da fórmula matricial para $\boldsymbol{pq}-\boldsymbol{qp}$; a prova de que a derivada de $\boldsymbol{pq}-\boldsymbol{qp}$ era nula e, a partir daí, a demonstração da conservação da energia; a demonstração da condição de frequências de Bohr; a justificação da suposição de Heisenberg de que os quadrados dos módulos dos elementos na matriz determinavam as probabilidades de transição; e uma proposta de quantização do campo eletromagnético.

Pode-se dizer que foi este artigo de Born e Jordan – e não o de Heisenberg – que lançou os fundamentos da *mecânica matricial*, pois ao escrever o seu artigo Heisenberg nem sequer estava pensando em matrizes.

8. O ARTIGO DE DIRAC

Independentemente dos trabalhos de Born e Jordan, Paul Adrien Maurice Dirac, na Inglaterra, conseguiu também desenvolver um novo formalismo algébrico para representar a teoria quântica, tomando como ponto de partida o trabalho de Heisenberg de 1925 (Jammer, 1966, pp. 228-229; Waerden, 1967, pp. 40-42).

Dirac, na época, era um estudante de doutoramento em Cambridge, orientado por Ralph H. Fowler. Heisenberg esteve em Cambridge logo depois de concluir seu artigo, mas Dirac não tomou conhecimento das ideias do trabalho através do próprio Heisenberg, e sim depois que ele já tinha retornado à Alemanha, através de um *preprint* do artigo que Heisenberg enviou a Fowler (Waerden, 1967, p. 41). Segundo o próprio Dirac, inicialmente ele não deu muito valor ao artigo, mas depois percebeu que continha algumas ideias-chave para o desenvolvimento da teoria quântica. Passou então a reformular suas ideias, utilizando outro formalismo, baseado na mecânica hamiltoniana clássica, a partir dos colchetes de Poisson.

Dirac possuía um bom conhecimento da antiga teoria quântica e também da física clássica, tendo estudado mecânica principalmente pelo livro de Whittaker, *Analytical dynamics* (Jammer, 1966, p. 229). Em setembro de 1925 Dirac leu um *preprint* do artigo de Heisenberg. Inicialmente não lhe deu muito valor, mas depois de duas semanas considerou que o trabalho continha a chave para o problema da teoria quântica. A forma do trabalho de Heisenberg, no entanto, lhe pareceu insatisfatória (especialmente a propriedade não-comutativa do produto das grandezas quânticas). Dirac acreditava que a nova mecânica deveria se basear no formalismo da mecânica de Hamilton-Jacobi, através de algum tipo de generalização, utilizando o princípio de correspondência de Bohr.

Em poucas semanas, Dirac conseguiu desenvolver sua versão da mecânica quântica, sem ter conhecimento dos trabalhos de Max Born e Pascual Jordan. Seu artigo foi completado no dia 7 de novembro de 1925 e publicado nos *Proceedings of the Royal Society* no mês seguinte (Dirac, 1925).

No seu trabalho, Dirac se baseia na representação de Heisenberg das quantidades quânticas fundamentais como sendo as amplitudes x_{mn} e as frequências de radiação emitida numa transição entre dois estados estacionários, ν_{mn} (Jammer, 1966, p. 230). Dirac parece não ter reconhecido que a multiplicação simbólica utilizada por Heisenberg correspondia ao cálculo matricial. Ele simplesmente representa a regra da "multiplicação de Heisenberg" sob a forma:

$$(xy)_{nm} = \sum_k x_{nk} y_{km}$$

Dirac procurou a forma da operação diferencial *d/dv* mais geral que obedecesse às propriedades:

$$\frac{d}{dv}(x+y)=\frac{d}{dv}x+\frac{d}{dv}y$$

$$\frac{d}{dv}(xy)=\left(\frac{d}{dv}x\right)y+x\left(\frac{d}{dv}y\right)$$

A primeira condição é de que a operação de diferenciação seja linear. Note-se que, na segunda expressão, Dirac não escreveu

$$\frac{d}{dv}(xy)=\left(\frac{d}{dv}x\right)y+\left(\frac{d}{dv}y\right)x$$

ou

$$\frac{d}{dv}(xy)=y\left(\frac{d}{dv}x\right)+x\left(\frac{d}{dv}y\right)$$

porque assumiu que, em geral, o produto não será comutativo. Ele deduziu que o operador deve satisfazer a condição:

$$\left(\frac{d}{dv}x\right)_{nm}=\sum_k\left\{x_{nk}a_{km}-a_{nk}x_{km}\right\}$$

ou, utilizando a "multiplicação de Heisenberg":

$$\frac{dx}{dv}=xa-ax$$

Dirac procurou estabelecer uma conexão entre esse tipo de expressão e a física clássica. Ele conseguiu mostrar (Jammer, 1966, pp. 231-232) que uma expressão quântica do tipo *xy–yx* podia ser associada aos colchetes de Poisson [*x,y*] da física clássica:

$$[x,y]=\frac{\partial x}{\partial \omega}\frac{\partial y}{\partial J}-\frac{\partial y}{\partial \omega}\frac{\partial x}{\partial J}$$

onde J é a ação e ω é uma variável angular, sendo x e y representados em função de J e de ω.

Utilizando os colchetes de Poisson, Dirac mostrou que $xy-yx$ podia ser representado por $(ih/2\pi)[x,y]$. Na física clássica, o valor do colchete de Poisson para duas variáveis dinâmicas canonicamente associadas p e q é igual a $[p,q]=1$, por isso Dirac pôde concluir que

$$pq - qp = h/2\pi i$$

que é a regra de comutação de Born-Jordan.

Assim, de uma forma original, Dirac mostrou que o formalismo da física clássica permitia introduzir as relações quânticas básicas, e por isso era possível aproveitar toda a mecânica analítica como ferramental para o desenvolvimento da mecânica quântica. Note-se também que Dirac, ao contrário de Heisenberg, passou a utilizar variáveis dinâmicas

Utilizando sua abordagem, Dirac provou que, para qualquer função $f(p,q)$ das variáveis quântica p, q, a equação básica de movimento podia ser representada por:

$$df/dt = (2\pi/hi)\,(fH - Hf)$$

onde $H(q,p)$ é o hamiltoniano do sistema.

Dirac, no seu artigo, generalizou todas as relações para sistemas com n graus de liberdade (Jammer, 1966, p. 232). Se os índices r,s variam de 1 até n, as seguintes relações são válidas:

$$q_r q_s - q_s q_r = 0$$

$$p_r p_s - p_s p_r = 0$$

$$p_r q_s - q_s p_r = \delta_{rs}\,(h/2\pi i)$$

Entre outros resultados, Dirac deduziu a relação de Bohr entre frequência da radiação e diferença de energia do sistema:

$$h\nu_{nm} = H_{nn} - H_{mm}$$

Pode-se dizer que Dirac aplicou o princípio de correspondência de Bohr para estabelecer uma relação fundamental entre a mecânica analítica clássica e a nova mecânica quântica. Tendo estabelecido essa relação, tornava-se possível aplicar o ferramental da mecânica clássica (como os colchetes de Poisson) aos problemas quânticos.

Note-se que a abordagem de Dirac é bem diferente da abordagem de Heisenberg, Born e Jordan, pois ele manteve o uso de grandezas dinâmicas inobserváveis (como q e p), atribuindo-lhes um significado físico importante na mecânica quântica.

Dirac desenvolveu depois o seu formalismo, bem como suas aplicações. Em 1926 ele publicou um outro trabalho no qual apresentou a mecânica quântica sob a forma de uma álgebra dos "números *q*", baseada em certos postulados (Dirac, 1926). Os "números *q*" são grandezas quânticas (e não números quânticos) que não obedecem à propriedade comutativa dos "números *c*" (as grandezas clássicas). Embora (em certos casos) os "números *q*"possam ser representados por matrizes (como mostrado por Born e Jordan), Dirac preferia tratá-los através de uma álgebra, sem analisar sua estrutura. Por causa dessa correspondência entre os "números *q*" e as matrizes, esse formalismo tinha uma limitação: era incapaz de ser aplicado a fenômenos não periódicos (ao contrário do que ocorreu depois, com o formalismo dos operadores de Born e Wiener).

Nesse trabalho de 1926, Dirac foi capaz de obter um resultado que Heisenberg, Born e Jordan não tinham conseguido ainda: a dedução do espectro do hidrogênio. Praticamente ao mesmo tempo, Wolfgang Pauli publicou um artigo no qual obteve também as frequências de emissão do átomo de hidrogênio utilizando o formalismo matricial (Jammer, 1966, pp. 234-235). Além disso, Pauli obteve resultados novos, que não haviam sido obtidos através da antiga teoria quântica: a análise das perturbações de energia do átomo de hidrogênio quando submetido simultaneamente a campos elétricos e magnéticos cruzados. Esse foi o primeiro resultado novo com significado empírico testável que resultou da mecânica matricial, mostrando pela primeira vez a real superioridade dessa teoria em relação à antiga teoria quântica.

Pode-se dizer que Dirac introduziu as grandezas quânticas de um modo mais abstrato e geral do que Born, Heisenberg e Jordan. Em vez de utilizar matrizes, ele utilizou uma álgebra geral não-comutativa, definindo os "números *q*" (quânticos), em oposição às grandezas clássicas ou "números *c"* (Waerden, 1967, p. 58). Dirac mostrou que, no caso de sistemas multiplamente periódicos (que possuem um espectro discreto de energias) os "números *q*" podem ser representados por matrizes; porém, nos outros casos (espectro contínuo de energias), os "números *q*" não podem ser reduzidos a matrizes.

John von Neumann mostrou, em 1932, que a mecânica quântica podia ser formalizada como um cálculo de operadores hermitianos no espaço de Hilbert e que as teorias de Heisenberg e Schrödinger eram representações particulares desse cálculo, podendo por isso ser consideradas como equivalentes (Jammer, 1974, p. 22).

Devemos apontar que o formalismo desenvolvido por Paul Adrien Maurice Dirac para a mecânica quântica é diferente do utilizado por von Neumann e incompatível com o mesmo (Jammer, 1974, pp. 7-8). Além disso, não está claro até que ponto os formalismos desenvolvidos depois por outros autores podem ser considerados como equivalentes a estes.

9. O "TRABALHO DOS TRÊS HOMENS" (BORN, HEISENBERG, JORDAN)

Logo depois de completar o artigo mencionado na seção anterior, Born viajou por algumas semanas, de férias, para a Suíça. Heisenberg ainda estava na Inglaterra. Após retornar, Born continuou a trabalhar com Jordan, correspondendo-se também com Heisenberg. Em meados de novembro completaram um artigo assinado pelos três pesquisadores (Born, Heisenberg & Jordan, 1926), chamado "Sobre a mecânica quântica II" – porque consideraram que era uma continuação do trabalho de Born e Jordan – e o enviaram para publicação. Esse artigo passou a ser referido frequentemente como “o trabalho dos três homens” (*Dreimännerarbeit*) pelos autores da época e também pelos historiadores da física.

O “trabalho dos três homens” foi escrito enquanto Born e Jordan estavam em Göttingen e Heisenberg estava em Copenhagen, em setembro e outubro de 1925. Van der Waerden apresentou uma análise detalhada das partes principais desse trabalho, procurando esclarecer quem foi o autor de cada seção e como as ideias foram surgindo durante a discussão entre os autores (Waerden, 1967, pp. 42-57). Aparentemente, as duas primeiras partes foram escritas por Heisenberg, a terceira por Born e a quarta por Heisenberg e Jordan; mas todas as partes foram discutidas conjuntamente.

Os três autores generalizam inicialmente a relação de comutação de modo que ela possa ser aplicada a qualquer função (matricial) f(p,q) do momento e da posição (por exemplo, o Hamiltoniano):

$$fq - qf = (h/2\pi i)\ \partial f/\partial p$$

$$pf - fp = (h/2\pi i)\ \partial f/\partial q$$

O artigo mostra que a forma matricial do Hamiltoniano é diagonal, que a derivada do Hamiltoniano é zero, e que os termos diagonais do Hamiltoniano constituem as energias dos estados estacionários de um sistema físico (Jammer, 1966, pp. 212-213). A partir daí eles deduzem a relação de Bohr para a frequência emitida por um átomo ao passar de um estado estacionário para outro:

$$\nu_{mn} = (W_n - W_m)/h$$

O método geral introduzido nesse artigo de resolver as equações canônicas do movimento para sistemas quantizados seria: (1) encontrar duas matrizes hermitianas p^0 e q^0, independentes do tempo (ou seja, sem o termo exponencial) e em termos das quais o hamiltoniano do sistema seja uma matriz diagonal; (2) acrescentar o termo exponencial dependente do tempo às matrizes de p e q.

Born, Heisenberg e Jordan desenvolvem em seguida, no seu artigo conjunto, os métodos matemáticos para encontrar essas matrizes, primeiramente trabalhando com matrizes hermitianas p^0 e q^0, independentes do tempo para as quais o hamiltoniano *não é diagonal*, e depois introduzindo transformações que diagonalizam o hamiltoniano, baseando-se em grande parte no livro de Courant e Hilbert já citado acima (Jammer, 1966, pp. 213-215).

As matrizes utilizadas na teoria são infinitas. As demonstrações apresentadas no artigo apenas valiam para matrizes finitas, e os autores assumiam que resultados semelhantes deveriam valer para matrizes infinitas (Jammer, 1966, p. 215).

Pode-se dizer que com os artigos de Born e Jordan e, depois, de Born, Heisenberg e Jordan, estavam dados os primeiros passos para a construção de uma mecânica quântica matricial, mas que havia muitos aspectos matemáticos que ainda precisavam ser desenvolvidos.

10. OUTROS DESENVOLVIMENTOS DA MECÂNICA MATRICIAL

Antes da publicação do "trabalho dos três homens", Wolfgang Pauli havia feito uma importante contribuição, conseguindo analisar o átomo de hidrogênio por meio da nova mecânica matricial. Seu artigo foi submetido para publicação em meados de janeiro de 1926, embora provavelmente tenha sido concluído em dezembro de 1925 (Pauli, 1926). Quase simultaneamente, Paul Dirac também conseguiu chegar ao mesmo resultado, como já foi indicado acima (Dirac, 1926a). Além de obter os resultados já conhecidos da teoria de Bohr, Pauli conseguiu desenvolver as perturbações causadas por campos elétrico e magnético cruzados – um resultado novo, na época. Segundo van der Waerden, o artigo de Pauli convenceu a maioria dos físicos que a mecânica quântica de Heisenberg, Born e Jordan era correta e superior à teoria quântica antiga (Waerden, 1967, p. 58).

No final de outubro de 1925, pouco depois de colaborar no “trabalho dos três homens”, Max Born viajou para os Estados Unidos, para um estágio no *Massachusetts Institute of Technology* (MIT), com conferencista convidado. Lá, iniciou uma colaboração com o matemático Norbert Wiener para o desenvolvimento da mecânica quântica.

Born percebeu que o formalismo desenvolvido nos primeiros trabalhos tinha uma forte limitação: ele só podia ser aplicado a fenômenos periódicos e por isso não era aplicável a situações tão simples quanto o movimento retilíneo uniforme de uma partícula. Certamente era necessário desenvolver um formalismo que abrangesse também fenômenos não-periódicos, e essa era a meta da colaboração entre Born e Wiener.

Pouco antes da chegada de Born ao MIT, Wiener havia publicado um trabalho sobre cálculo operacional. Quando Born lhe contou suas dificuldades e a necessidade de ampliar a abrangência da mecânica matricial, Wiener imediatamente lhe sugeriu que a generalização do cálculo das matrizes seria obtida utilizando-se operadores. Born tinha inicialmente muitas dúvidas sobre a validade dessa abordagem, suspeitando que não fosse um método rigoroso, mas acabou por aceitá-la (Jammer, 1966, p. 221). No início de janeiro de 1926 os dois autores completaram um artigo no qual apresentavam a nova formulação da mecânica quântica, enfatizando no título do trabalho que essa nova abordagem permitia estudar tanto fenômenos periódicos quanto não-periódicos (Born & Wiener, 1926). Born e Wiener introduziram primeiramente um operador q que transforma uma função x_n que não depende explicitamente do tempo em uma outra função $y(t)$, da seguinte forma (Jammer, 1966, pp. 221-222):

$$x_n = \lim_{T=\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} x(s).\exp - i \frac{2\pi}{h} W_n s ds$$

$$q(t,s) = \sum_{m,n} q_{mn} \exp[i2\pi(W_m t - W_n s)/h]$$

$$q = \lim_{T=\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} ds.q(t,s)$$

$$y(t) = qx_n$$

$$y(t) = \lim_{T=\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} q(t,s)x(s)ds = \sum_{m} y_m \exp[i2\pi(W_m t/h)]$$

Note-se que há uma matriz q_{mn} associada ao operador q. Depois, é introduzido o operador $D=d/dt$, da seguinte forma:

$$\dot{y}(t) = Dqx(s) = \lim_{T=\infty} \frac{1}{2T} \int_{-T}^{T} \frac{\partial q(t,s)}{\partial t} x(s)ds$$

As matrizes associadas a Dq e a qD seriam:

$$(Dq)_{mn} = \left(i\frac{2\pi}{h} W_m q_{mn} \right) = i\frac{2\pi}{h} Wq$$

$$(qD)_{mn} = \left(i\frac{2\pi}{h} W_n q_{mn} \right) = i\frac{2\pi}{h} qW$$

onde $W=W_n\delta_{mn}$. A partir daí, os autores mostram que a matriz correspondente a $Dq–qD$ seria:

$$Dq - qD = i\frac{2\pi}{h}(W_m - W_n)q_{mn} = (i2\pi)\nu_{mn} q_{mn}$$

O operador *Dq–qD* foi definido como sendo um novo operador, representado por $\dot{q}$. A relação de comutação

$$pq - qp = (h/2\pi i)\mathbf{1}$$

foi também interpretada como uma relação entre operadores, ou seja, Born e Wiener associaram um operador a cada grandeza física. No caso do hamiltoniano eles mostraram que o operador correspondente seria $(h/2\pi i)D$. No entanto, como Max Jammer comentou (Jammer, 1966, p. 223), eles não chegaram a identificar a forma do operador correspondente a *p*, que seria $(h/2\pi i)\partial/\partial q$.

Born e Wiener aplicaram o novo método quântico para o estudo do oscilador harmônico simples e para descrever um movimento uniforme unidimensional. Mostraram, assim, que o formalismo de operadores podia ser aplicada para a análise quântica de fenômenos periódicos e aperiódicos. Mas não encontraram nenhuma aplicação com resultados físicos novos.

É importante notar que a proposta apresentada por Born e Wiener *não é* equivalente à mecânica matricial, já que esta segunda só podia ser aplicada a fenômenos periódicos. Assim, embora não se costume fazer a distinção entre o formalismo de operadores e o formalismo matricial (como se ambos fossem variantes da teoria quântica matricial), trata-se na verdade de duas abordagens que não são equivalentes.

11. A MECÂNICA ONDULATÓRIA DE SCHRÖDINGER

Paralelamente ao desenvolvimento da mecânica quântica por Heisenberg, Born, Jordan, Wiener e Dirac, surgiu a mecânica ondulatória, desenvolvida por Erwin Schrödinger a partir dos trabalhos de Louis de Broglie (ver Martins & Rosa, 2014; Martins, 2010).

Schrödinger tomou conhecimento do trabalho de Louis de Broglie em 1925, primeiramente de forma indireta, por uma citação feita por Albert Einstein em seu trabalho sobre a estatística de Bose-Einstein – um assunto sobre o qual Schrödinger escreveu um artigo no final de 1925 (Jammer, 1966, p. 257). Nessa época, Schrödinger se correspondeu com Einstein sobre esse tema, e este lhe sugeriu a leitura da tese de De Broglie. Schrödinger leu a tese em novembro de 1925 e apresentou um seminário sobre seu conteúdo, na Escola Politécnica de Zurich, no final do mesmo mês.

Um dos resultados importantes da teoria de De Broglie era a dedução da quantização de Bohr-Sommerfeld para átomos com um único elétron, supondo que o elétron era acompanhado por uma onda e que havia um número inteiro de comprimentos de onda ao longo da trajetória do elétron. Havia, no entanto, um aspecto pouco aceitável nessa proposta: o comprimento de onda associado ao elétron era comparável ao tamanho do próprio átomo; e não havia nenhum motivo para supor que a onda fazia uma trajetória curva, seguindo o elétron.

Durante o seminário, Peter Debye sugeriu que as ondas de De Broglie deveriam ser estudadas de uma outra forma, através de uma equação de onda. Isso parece ter sido o que levou Schrödinger a tentar encontrar uma equação de onda que obedecesse às propriedades das ondas de De Broglie. Inicialmente, como a teoria de De Broglie era relativística, Schrödinger também tentou encontrar uma equação de onda relativística (Jammer, 1966, pp. 257-258). Chegou àquilo que é atualmente conhecido como "equação de Klein-Gordon", mas abandonou essa equação (sem publicá-la) porque levava a resultados errados, quando era aplicada ao problema do átomo de hidrogênio (essa equação se aplica a bósons, não a férmions, por isso não descreve o comportamento dos elétrons de forma correta). Depois, desenvolveu a equação de onda no limite clássico, obtendo resultados satisfatórios.

Schrödinger obteve seus principais resultados durante um período de férias de poucas semanas que passou em um hotel chamado Villa Herwig, em Arosa, nos Alpes, de dezembro de 1925 a janeiro de 1926, acompanhado por uma amante desconhecida. Há uma carta escrita por Schrödinger para

Wilhelm Wien, de 27 de dezembro, na qual ele descreve que estava obtendo progresso na equação de onda relativística. Deve ter sido nas primeiras semanas de janeiro que ele desenvolveu a equação de onda no limite clássico. Logo depois de retornar a Zurich, Schrödinger escreveu e enviou para publicação uma sequência de seis artigos sobre mecânica quântica, com o título geral de "quantização como um problema de autovalores". Schrödinger tinha já experiência no estudo da física ondulatória e da análise de problemas de autovalores (Jammer, 1966, p. 256). No entanto, ele teve dificuldades com as ferramentas matemáticas necessárias para desenvolver seu trabalho (as quais, como ocorreu no caso de Heisenberg, encontravam-se no livro *Methoden der mathematschen Physik* de Courant e Hilbert) e pediu ajuda, em alguns pontos, a seu colega de trabalho Hermann Weyl.

O primeiro artigo de Schrödinger sobre a mecânica ondulatória (Schrödinger, 1926a) foi recebido por Wilhelm Wien (que era o editor da revista *Annalen der Physik*) no dia 27 de janeiro de 1926. Nesse trabalho ele introduziu uma função distribuída pelo espaço e mostrou que as regras de quantização podiam ser reduzidas a problemas de autovalor dessa função. O segundo artigo foi recebido pela revista um mês depois, no dia 23 de fevereiro. O terceiro (no qual defendeu a equivalência entre a mecânica matricial e a mecânica ondulatória), no dia 18 de março. O quarto, no dia 10 de maio. O quinto e o sexto, em junho, completando a série de trabalhos. Portanto, em uma sucessão muito rápida, iniciada durante a estada nos Alpes em janeiro de 1926, Schrödinger desenvolveu, praticamente sozinho, toda a mecânica ondulatória.

Schrödinger utilizou no seu primeiro artigo a relação $p=(k/\Psi).(\partial\Psi/\partial q)$, sem explicar sua origem (Jammer, 1966, p. 263). É fácil mostrar que ele partiu da relação de De Broglie entre momentum e comprimento de onda, λ=h/p. Uma onda plana movendo-se na direção x, segundo a teoria de De Broglie, seria representada por $\Psi=A.cos\ 2\pi(x-Vt)/\lambda$, ou $\Psi=A.cos$

$2\pi(p/h)(x\text{-}Vt)$. Sob forma exponencial, essa onda poderia ser representada por:

$$\Psi = A.\exp 2\pi i(p/h)(x - Vt)$$

Portanto, temos que $\partial\Psi/\partial x = 2\pi i(p/h)\Psi$, e o momentum da partícula associada à onda seria $p=(k/\Psi).(\partial\Psi/\partial x)$ onde $k=h/(2\pi iA)$ ou, para uma coordenada genérica q, $p=(k/\Psi).(\partial\Psi/\partial q)$. Essa é uma relação básica que Schrödinger utilizou, baseando-se em De Broglie, para construir a equação de onda, no seu primeiro artigo. Note-se que, nesse primeiro trabalho, ele ignorou o fator tempo da função de onda.

A equação de onda independente do tempo foi apresentada de forma detalhada por Schrödinger no seu segundo artigo, apenas. A equação de onda construída por Schrödinger por analogia com a física clássica, baseou-se na relação entre momentum e comprimento de onda de De Broglie (que era uma equação relativística; ver Brown & Martins, 1984) e na relação da física clássica entre momentum e energia cinética, $p^2=2Km=2m(E-U)$. Portanto, como $p= h/\lambda$, temos que $2m(E-U)=(h/\lambda)^2$, ou seja:

$$\lambda^2 = \frac{h^2}{2m(E-U)}$$

Considerando uma onda representada por $\Psi=A.cos\ 2\pi\nu t$ e partindo da equação de onda clássica

$$\Delta\Psi - \frac{1}{V^2}\frac{d^2\Psi}{dt^2} = 0$$

temos que $d^2\Psi/dt^2 = -4\pi^2\nu^2 A.cos\ 2\pi\nu t = -4\pi^2\nu^2\Psi$ e, portanto,

$$\Delta\Psi + \frac{4\pi^2\nu^2}{V^2}\Psi = 0$$

e como $V/\nu=\lambda$, substituindo o valor de λ^2 obtido acima a partir da teoria de De Broglie, obtemos:

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\Psi = 0$$

Para que essa equação tenha sentido, já que ela envolve derivadas segundas (no laplaciano), Schrödinger supôs que a função de onda era contínua e diferenciável pelo menos até segunda ordem. Schrödinger supôs também, no primeiro artigo, que a função Ψ era real.

No primeiro artigo (antes, portanto, de justificar a equação de onda do modo acima), Schrödinger já havia apresentado a equação e aplicado à dedução do espectro do hidrogênio. No caso específico do átomo de hidrogênio, Schrödinger introduziu a energia potencial clássica $U=-e^2/r^2$ entre duas partículas de carga e, a uma distância mútua r (no sistema eletrostático de unidades). Conseguiu resolver a equação de onda, utilizando (com a ajuda de Hermann Weyl) a transformada de Laplace, chegando à condição de que, para uma energia total E negativa, só existiam soluções da equação diferencial para valores inteiros de $me^2/[k(-2mE)^{1/2}]$, sendo $k=h/2\pi=\hbar$. Portanto, os valores de energia do átomo de hidrogênio são discretos:

$$E = -\frac{me^4}{2k^2n^2}$$

que é o resultado de quantização da energia obtido na teoria de Bohr. Quando Schrödinger obteve esse resultado, ainda não havia sido publicado o trabalho de Pauli aplicando a mecânica matricial de Heisenberg ao átomo de hidrogênio e obtendo os mesmos resultados.

Note-se que, na teoria de Schrödinger, desaparecem as órbitas dos elétrons e o modelo simplificado de De Broglie perde o sentido. Não existem ondas descrevendo órbitas, acompanhando os elétrons. As ondas formam um sistema de oscilações tridimensional em torno do núcleo atômico.

Schrödinger não esclareceu o significado da função de onda Ψ, mas ela foi introduzida como uma função das coordenadas e do tempo semelhante a uma onda, e por isso ele sugeriu que Ψ poderia representar algum processo de vibração dentro do átomo. A condição de que a equação de onda tivesse uma solução unívoca significa, na teoria ondulatória, que Schrödinger havia obtido as quantização de energia a partir da condição de ondas estacionárias. Como as ondas de Schrödinger são tridimensionais, trata-se de ondas estacionárias semelhantes às ondas acústicas que podem existir em uma cavidade tridimensional. Mas que ondas são essas, afinal? Seriam ondas eletromagnéticas, ou de um novo tipo? No primeiro artigo, o autor não quis discutir isso.

Supondo, no entanto, que essas ondas representadas por Ψ são uma realidade física (alguma coisa que está realmente oscilando), associada aos elétrons (ou seja, associada a uma carga elétrica), Schrödinger propôs uma interpretação da relação de Bohr, de que a frequência ν da radiação emitida pelo átomo é dada por $\nu=(E_1-E_2)/h$. Cada estado estacionário teria uma frequência própria, $\nu_i=E_i/h$; a passagem de uma energia para outra seria semelhante ao processo de coexistência de duas ondas de frequências diferentes, produzindo um batimento cuja frequência é, pela teoria clássica, a diferença entre as frequências das duas ondas básicas. Isso, portanto, explicaria a relação de Bohr para a frequência da radiação emitida (Jammer, 1966, p. 260).

No seu segundo trabalho, Schrödinger discutiu um pouco a relação entre sua teoria ondulatória e o conceito de partícula. De Broglie já havia mostrado que a velocidade V da onda associada a um elétron que tenha velocidade v é dada por $V=c^2/v$, sendo portanto maior do que a velocidade da luz. No entanto, provou também que a velocidade de grupo das ondas associadas a um elétron é exatamente igual à velocidade do próprio elétron.

Considerando-se um certo número de ondas de De Broglie com frequências próximas, é possível construir-se um grupo de ondas de pequenas dimensões (poucos comprimentos de onda). No caso de uma partícula livre, Schrödinger interpretou o próprio grupo de ondas como sendo a "partícula", isto é, aquilo que chamamos de partícula seria simplesmente um pequeno grupo de ondas. Supôs que o grupo de ondas obedeceria às mesmas equações de um ponto material. No entanto, quando se estuda uma "partícula" presa em certo sistema (como o elétron em um átomo), essa localização dada pelo pacote de ondas pode perder totalmente o sentido, porque o comprimento de onda pode ser da mesma ordem de grandeza da região onde a "partícula" está confinada. Nesse caso, a "partícula" estaria espalhada por toda a região, e já não seria possível falar sobre sua localização. Tentar tratar essa situação como se existisse uma partícula pontual seria, segundo Schrödinger, como tentar analisar um fenômeno óptico de difração utilizando a óptica geométrica (Jammer, 1966, pp. 263-264).

Ainda no seu segundo artigo (submetido para publicação no final de fevereiro de 1926), Schrödinger aplicou sua teoria ao estudo do oscilador harmônico, de um sistema rígido em rotação com eixo fixo, um sistema rígido em rotação com eixo livre, e um sistema com rotação e vibração (como uma molécula diatômica na qual a distância entre os dois átomos não é constante).

No caso do oscilador harmônico simples, Schrödinger obteve uma quantização de energia que concordou com os resultados obtidos por Heisenberg, ou seja, a energia seria dada por $E_n=(n+½)h\nu$, onde n é um número inteiro – e não $E_n=nh\nu$, como na antiga teoria quântica (Jammer, 1966, p. 264).

O terceiro trabalho publicado em 1926 por Schrödinger discutia a equivalência entre a mecânica ondulatória e a mecânica matricial. Ele foi submetido para publicação no final de março de 1926.

O quarto artigo (que constituída, na verdade, a terceira parte da contribuição de Schrödinger à mecânica ondulatória) introduziu métodos de perturbação para a obtenção de soluções aproximadas em casos de maior complexidade. Ele aplicou esse método primeiramente à teoria do efeito Stark, conseguindo calcular não apenas a frequência das raias espectrais do átomo submetido ao campo elétrico, mas também as intensidades das componentes, obtendo resultados que concordavam com os dados experimentais (Jammer, 1966, p. 266).

Na quarta e última parte de seu trabalho (que foi o sexto artigo publicado por ele em 1926), Schrödinger introduziu a dependência do tempo, ou seja, situações em que a energia total não é constante. Evidentemente, a equação de onda que ele havia utilizado inicialmente não permitia fazer essa extensão, pois nela aparecia o termo (*E-U*) como equivalente à energia cinética, pressupondo a relação de conservação da energia.

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2}(E - U)\Psi = 0$$

Para chegar a uma expressão mais geral, Schrödinger eliminou a energia *E* dessa equação, da seguinte forma. Supôs que a função de onda poderia ser representada por uma oscilação modulada espacialmente, $\Psi = \varphi(q) exp[2\pi i(E/h)t]$ e que, portanto, $\partial\Psi/\partial t = 2\pi i(E/h)\Psi$, logo o produto da energia *E* pela função de onda Ψ podia ser substituído por $E\Psi = (h/2\pi i)(\partial\Psi/\partial t)$. Assim, a equação de onda adquire a forma:

$$-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\Delta\Psi + U\Psi = \frac{h}{2i\pi}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$

Agora, tendo eliminado da equação a energia total, Schrödinger supôs que ela era válida não apenas nesse caso, mas também quando a função *U* da energia potencial varia com o tempo. Schrödinger aplicou essa equação ao estudo do fenômeno de dispersão, supondo que um átomo estivesse sujeito a um campo externo variando periodicamente com o tempo (onda eletromagnética incidente). Em primeira ordem, Schrödinger obteve resultados iguais aos que haviam sido obtidos por Kramers e Heisenberg em 1925 (antes do desenvolvimento da mecânica matricial).

Note-se que, na nova equação, aparece a unidade imaginária i, que não aparecia na equação anterior. Ela surgiu porque Schrödinger assumiu uma função de onda do tipo $\Psi=\varphi(q)\, exp[2\pi i(E/h)t]$. Poderia, no entanto, ter utilizado apenas funções reais, fazendo $\Psi=\varphi(q)\, cos[2\pi(E/h)t]$, mas nesse caso não teríamos a relação como $E\Psi=(h/2\pi \mathrm{i})(\partial\Psi/\partial t)$ e sim $E^2\Psi=(h/2\pi)^2(\partial^2\Psi/\partial t^2)$. A substituição na equação de onda não levaria a uma relação "razoável".

Tendo introduzido uma função de onda complexa, Schrödinger precisou reconhecer que existiriam duas grandezas físicas distintas: a função real $\varphi(q)$ ou $\varphi(x,y,z)$ que seria um escalar; e a função de onda Ψ propriamente dita, que seria complexa (Jammer, 1966, p. 266). Isso introduzia uma dificuldade adicional na interpretação física dessa grandeza. Schrödinger supôs, nesse artigo, que a função de onda Ψ em si mesma não teria uma interpretação física direta, mas que o seu módulo ao quadrado $\Psi\Psi^*$ representaria a densidade de carga elétrica de uma "partícula" distribuída pelo espaço. No caso do átomo de hidrogênio, por exemplo, o elétron seria uma "nuvem" distribuída no espaço em torno do núcleo, estando a sua carga espalhada nessa região de tal modo que a densidade de carga em cada ponto fosse proporcional a $\Psi\Psi^*$.

A teoria de Schrödinger era, assim, anti-corpuscular. Enfatizava a ideia de uma entidade distribuída de forma contínua pelo espaço, obedecendo à equação de onda. Pode-se dizer que era uma teoria muito próxima à física clássica, seguindo a estrutura da mecânica analítica, mantendo os conceitos antigos de espaço e de tempo, não introduzindo qualquer descontinuidade mas adotando a ideia de De Broglie de entidades extensas (e não pontuais) associadas a ondas. Na mecânica ondulatória de Schrödinger não havia a rejeição aos inobserváveis, defendida por Heisenberg.

12. REAÇÕES AO TRABALHO DE SCHRÖDINGER

Muitos físicos reagiram positivamente à proposta de Schrödinger, como Einstein e Sommerfeld (Jammer, 1966, p. 271). Louis de Broglie não aceitou o trabalho de Schrödinger por não ser relativístico, tendo assim abandonado um aspecto que parecia fundamental para De Broglie. Heisenberg, Bohr e seus colaboradores rejeitaram imediatamente as concepções de Schrödinger. Heisenberg, muito tempo depois, declarou a Thomas Kuhn:

> Não queríamos retornar à antiga linha e isso nos desapontou com Schrödinger. [...] Eu senti, "Agora Schrödinger nos coloca em um estado mental que já havíamos superado e que certamente precisa ser esquecido". (Heisenberg, citado por Cushing, 1994, p. 116)

No entanto, consideraram que seu *formalismo* era útil, e passaram a utilizar a equação de onda, sem atribuir a ela o significado que Schrödinger lhe havia dado.

Edward Condon esteve em Göttingen em meados de 1926, desenvolvendo seu doutorado (época em que Schrödinger divulgou seus trabalhos sobre mecânica ondulatória) e trabalhando com Max Born. Ele conta que assistiu a um curso de David Hilbert sobre a teoria quântica no segundo semestre de 1926, e narra uma história muito interessante, sobre isso:

> Hilbert estava rindo muito de Born e Heisenberg e dos físicos teóricos de Göttingen porque, quanto eles descobriram primeiramente a mecânica matricial, estavam tendo, é claro, o mesmo tipo de dificuldade que todos têm em resolver problemas e manipular e fazer as coisas direito com matrizes. Então foram até Hilbert e pediram ajuda, e Hilbert disse que as únicas vezes em que ele tinha feito alguma coisa com matrizes foi quando elas eram um tipo de subproduto dos autovalores das condições de contorno de uma equação diferencial. Por isso, sugeriu que se eles procurassem a equação diferencial que leva a essas matrizes, eles poderiam

> provavelmente fazer mais coisas com elas. Eles pensaram que essa era uma ideia tola e que Hilbert não sabia sobre o que estava falando. Por isso, ele estava depois se divertindo muito, mostrando-lhes que eles poderiam ter descoberto a mecânica ondulatória de Schrödinger seis meses antes, se tivessem dado mais atenção ao que ele havia dito. (Condon, 1962, p. 46)

De acordo com James Cushing, o trabalho de Schrödinger representou uma forte ameaça à linha de pesquisa desenvolvida por Heisenberg, Born e colaboradores. O formalismo da mecânica matricial não tinha tido muitas aplicações bem sucedidas e ainda estava engatinhando quando a abordagem de Schrödinger abriu caminho para uma ampla variedade de aplicações (Cushing, 1994, p. 117).

Os problemas da mecânica matricial eram, por um lado, o formalismo de difícil manipulação e, por outro, a ausência total de um suporte analógico na física clássica que facilitasse o desenvolvimento de aplicações. A teoria de Schrödinger permitia aos pesquisadores visualizarem as situações estudadas e utilizar toda a bagagem da tão familiar teoria ondulatória clássica para analisar novas situações. Assim, foi a mecânica ondulatória e não a mecânica matricial que passou a ser a principal ferramenta da teoria quântica – até mesmo por parte dos defensores da mecânica matricial.

> Paradoxalmente, foram principalmente as técnicas de Schrödinger que estabeleceram a dominância da interpretação associada à mecânica matricial. Heisenberg e seus colaboradores combinaram de forma desavergonhada os métodos matriciais (para o spin do elétron) com a equação diferencial de Schrödinger para resolver vários dos problemas mais importantes da espectroscopia atômica. (Cushing, 1994, p. 117)

Em agosto de 1926, Schrödinger foi convidado por Arnold Sommerfeld a apresentar uma palestra sobre suas ideias em München. Sua apresentação foi muito bem recebida por quase todos, mas Heisenberg, que estava presente, apresentou diversas objeções (Jammer, 1974, p. 56). Logo depois, este escreveu uma carta a Bohr, que convidou Schrödinger a visitar Copenhagen em setembro do mesmo ano. Durante essa visita, Heisenberg também estava presente. Ele e Bohr não aceitaram as ideias de Schrödinger – e vice-versa – mas sentiram a necessidade de desenvolver com mais clareza as bases da teoria quântica. Foi a partir dessa preocupação que Heisenberg desenvolveu o princípio de indeterminação, publicado em 1927 – um aspecto do desenvolvimento da mecânica quântica que não será abordado aqui.

13. UMA OU DUAS TEORIAS?

As abordagens da mecânica ondulatória (Schrödinger) e da mecânica matricial (Heisenberg, Born, Jordan) eram muito diferentes. A primeira proporcionava uma nova visão do mundo microscópico, trazendo a promessa de uma compreensão quase clássica da estrutura dos átomos e moléculas. A segunda negava a possibilidade de construir uma teoria do mundo atômico que pudesse ser visualizada. Os formalismos matemáticos eram diferentes, e as semelhanças visíveis eram pequenas. No entanto, vários problemas específicos podiam ser tratados com as duas abordagens, e levavam a resultados idênticos.

Essa estranha situação levou o próprio Schrödinger a investigar se havia uma equivalência entre as duas abordagens. Entre o segundo e o terceiro artigo em que apresentava sua teoria, ele publicou uma análise em que procurava mostrar que a mecânica ondulatória era realmente equivalente à mecânica matricial (Schrödinger, 1926c). Independentemente, Carl Eckart também publicou um artigo tentando estabelecer essa equivalência (Eckart, 1926). Wolfgang Pauli, em um trabalho que não foi publicado na época[6], estudou o mesmo problema; e Paul Dirac também propôs uma demonstração dessa equivalência (Dirac, 1927).

[6] Carta de Pauli a Jordan, em Waerden 1973, pp. 289-293.

Atualmente, quase todos os textos didáticos de mecânica quântica se referem rapidamente a essas duas abordagens e afirmam, sem qualquer análise detalhada, que a mecânica matricial e a mecânica ondulatória eram apenas dois modos diferentes de descrever a mesma teoria – a mecânica quântica. No entanto, a questão não é tão simples assim, como será mostrado mais adiante.

14. AS PROPOSTAS SOBRE EQUIVALÊNCIA ENTRE AS ABORDAGENS

Erwin Schrödinger, em seu terceiro artigo de 1926 (Schrödinger, 1926c), procurou mostrar que as duas abordagens eram equivalentes (Jammer, 1966, pp. 272-273).

No seu artigo, Schrödinger partiu da relação matricial de Born-Heisenberg

$$pq - qp = (h/2\pi i)\mathbf{1}$$

e mostrou que correspondia à seguinte equação da mecânica ondulatória:

$$\left(\frac{h}{2i\pi}\frac{\partial}{\partial q}\right)q\Psi - q\left(\frac{h}{2i\pi}\frac{\partial}{\partial q}\right)\Psi = \frac{h}{2i\pi}\Psi$$

Mostrou então que era possível obter as equações da mecânica matricial a partir das equações da mecânica ondulatória, da seguinte forma. Primeiramente, para cada função $F(p,q)$ representando uma grandeza física clássica em função das variáveis dinâmicas p, q era possível construir um operador diferencial $[F,\bullet]$ obtido substituindo, na função F, a grandeza p pelo operador $(h/2\pi i)(\partial/\partial q)$:

$$[F,\bullet] = F\left(\frac{h}{2i\pi}\frac{\partial}{\partial q}, q\right)$$

Construindo esses operadores e as matrizes correspondentes, Schrödinger mostrou em seguida como era possível associar uma matriz F_{ij} com cada função $F(p,q)$. Provou também que as matrizes possuíam as propriedades algébricas adequadas, de acordo com a mecânica matricial. Reescrevendo a equação de onda com o uso desses operadores, Schrödinger mostrou que a obtenção dos autovalores da equação de onda era equivalente à diagonalização da matriz *H* correspondente ao hamiltoniano do sistema.

Uma consequência curiosa deste trabalho de Schrödinger foi que os pesquisadores "do outro lado" passaram a se sentir à vontade para combinar a mecânica matricial com a mecânica ondulatória, utilizando o formalismo de Schödinger para abordar problemas que não conseguiam resolver utilizando o método de matrizes.

Por outro lado, houve reações negativas de Heisenberg e Niels Bohr à teoria de Schrödinger, *mesmo depois da publicação da sua demonstração de equivalência* (Moore, 1989, pp. 220-222; 225-229). Heisenberg, por exemplo, questionou se a mecânica ondulatória poderia explicar fenômenos como o efeito fotoelétrico e o espectro do corpo negro. Se as duas teorias eram equivalentes, por que motivo a teoria de Schrödinger era criticada? Ou não havia equivalência, ou havia motivos extra-científicos para isso.

Há um trabalho de Carl Eckart sobre a equivalência entre os dois formalismos (Jammer, 1966, pp. 275-276) que foi publicado em duas partes, quase simultaneamente ao artigo de Schrödinger. Na primeira (Eckart, 1926a), submetida para publicação em março de 1926 (duas semanas depois do artigo de Schrödinger), ele apenas anunciou sua intenção e esboçou a análise de equivalência em um caso particular (do oscilador harmônico). Três meses depois, ele publicou o segundo artigo (Eckart, 1926b), com a análise completa.

Assim como no caso de Schrödinger, Eckart partiu da mecânica ondulatória e obteve as equações da mecânica matricial. Ele não tentou fazer o caminho inverso, pois considerou que a teoria de Schrödinger era mais fundamental do que a mecânica matricial.

De acordo com Max Jammer, tanto Eckart quanto Schrödinger foram influenciados por um trabalho de Kornelius Lanczos. Este, em artigo submetido em dezembro de 1925 (Lanczos, 1926), havia mostrado que a teoria de Heisenberg-Born-Jordan podia também ser formulada em termos de equações integrais (Jammer, 1966, p. 276).

A terceira tentativa de demonstração de equivalência entre a mecânica matricial e a mecânica ondulatória foi elaborada por Wolfgang Pauli, mas ele não a publicou. Esse trabalho foi mencionado em um artigo de Gregor Wenzel, submetido para publicação em junho de 1926; portanto, o trabalho de Pauli foi certamente escrito mais ou menos na mesma época dos trabalhos de Schrödinger e de Eckart, sem ter conhecimento dos mesmos, pois eles ainda não haviam sido publicados (Jammer, 1966, p. 276).

Wenzel não deu detalhes sobre o trabalho de Pauli. Em 1973, van der Waerden publicou uma carta de Pauli para Jordan, de 12 de abril de 1926, que discute a relação entre a teoria de Schrödinger (cujo primeiro trabalho acabara de ser publicado) e a mecânica matricial (Waerden, 1973). É provável que esse seja o trabalho ao qual Wenzel se referiu.

A análise de Pauli, como o de Schrödinger e o de Eckart, parte da teoria de Schrödinger e procura mostrar que é possível obter, a partir dela, o cálculo da mecânica matricial (Waerden, 1973, pp. 280-281).

Existe ainda um outro trabalho da época, escrito por Dirac, que procurou estabelecer a equivalência entre a mecânica matricial e a mecânica ondulatória, no artigo intitulado “The physical interpretation of the quantum dynamics” (Dirac, 1927). Nesse trabalho, escrito durante uma estada em Copenhagen no segundo semestre de 1926, Dirac desenvolveu a teoria da transformação e mostrou que a mecânica matricial e a mecânica ondulatória são casos especiais de uma abordagem mais geral (ver Dalitz & Peierls, 1986, p. 148 e pp. 164-165).

Há autores que afirmam que as demonstrações de equivalência de Schrödinger, Eckart e Pauli, eram erradas ou incompletas, mas que Von Neumann teria conseguido posteriormente estabelecer uma demonstração rigorosa da equivalência (Neumann, 1932; Neumann, 1955).

Mais adiante indicaremos dúvidas que foram levantadas a respeito dessas demonstrações.

15. A INTERPRETAÇÃO ESTATÍSTICA DE MAX BORN

Não vamos aqui descrever o desenvolvimento posterior da mecânica quântica, exceto pelo surgimento da interpretação estatística da função de onda. Como já foi mencionado, Schrödinger atribuiu um significado físico à função de onda, supondo que a carga elétrica de cada "partícula" estaria espalhada pelo espaço, com densidade de carga proporcional a $\Psi\Psi^*$. Essa interpretação pareceu problemática a quase todos os físicos da época, por vários motivos (Jammer, 1966, pp. 282-283). Abandonar a ideia de partículas, substituindo-a pela de pacotes de onda, tinha o inconveniente de que esses pacotes vão aumentando de tamanho com o tempo, de tal forma que o conceito de localização de sua energia não faz sentido. Além disso, na teoria de Schrödinger, no caso de sistemas com várias partículas (mais de 3 graus de liberdade), a função de onda não é mais uma simples função espacial e sim uma função do espaço de fase, sendo difícil nesse caso reter a interpretação de Schrödinger.

Schrödinger procurou interpretar inicialmente a mecânica ondulatória de um modo puramente clássico. Ele supôs que a função de onda Ψ associada a uma partícula representava a densidade de carga elétrica dessa partícula que estaria, portanto, distribuída pelo espaço e não concentrada em um ponto (Jammer, 1974, pp. 24-27). No seu quarto trabalho (Schrödinger, 1926d) ele apresentou a densidade de carga da partícula como sendo proporcional a $\Psi\Psi^*$. Com essa interpretação, ele calculou as intensidades das raias espectrais dos efeitos Zeeman e Stark, obtendo resultados concordantes com os valores conhecidos.

A interpretação de Schrödinger logo encontrou problemas, no entanto. Em maio de 1926, Lorentz escreveu a Schrödinger comentando que uma partícula seria representada por um pacote de ondas que aumentaria de tamanho com o passar do tempo, não correspondendo assim ao conceito aceito de uma partícula. Além disso, quando se estuda um sistema com duas ou mais partículas, a função de onda já não pode ser interpretada como uma densidade de carga distribuída no espaço. Logo surgiram outras dificuldades (Jammer, 1974, pp. 32-33).

Por outro lado, se a "partícula" fosse um pacote de ondas, o que aconteceria com ele quando passasse por um cristal, por exemplo, que funciona como uma rede de difração? A "partícula" se separaria em várias outras? E em fenômenos de colisão (espalhamento): a onda incidente deveria se transformar em uma onda esférica, depois da colisão; poderia isso significar que a partícula se expandiria para todos os lados? Aparentemente não, pois os fenômenos de colisão de partículas pareciam indicar que existia uma localização bem definida das mesmas.

Quase ao mesmo tempo em que Schrödinger enviava seu quarto artigo para publicação, Max Born concluiu um trabalho em que propunha uma interpretação puramente probabilística para a função de onda Ψ (Born, 1926). Embora Born estivesse fortemente associado ao desenvolvimento da mecânica matricial, ele havia se interessado pelo trabalho de Schrödinger por causa de alguns de seus aspectos formais, rejeitando, no entanto, a interpretação do próprio Schrödinger (Jammer, 1974, pp. 38-39). Born estava plenamente convencido da natureza corpuscular do elétron, e a visão de Schrödinger lhe parecia inadmissível. Para Born, nessa época, um elétron teria, em cada instante, posição e velocidade bem definidas, e a função de onda Ψ representaria fundamentalmente nossa ignorância da real situação da partícula (Jammer, 1974, pp. 42-44). Essa primeira interpretação estatística da função de onda era inadequada, pois não permitia explicar os fenômenos de interferência de elétrons passando por uma fenda dupla.

Ao tentar aplicar a teoria de Schrödinger a fenômenos de espalhamento de partículas, Max Born pensou em outra interpretação da função de onda: ela estaria associada à probabilidade de que a partícula fosse desviada em cada direção. Mais exatamente, a probabilidade seria proporcional a $\Psi\Psi^*$, ou seja, a $|\Psi|^2$ (Born, 1926). De certa forma, a função de onda seria um tipo de "campo fantasma" que guiaria as partículas.

Apesar de recusar a interpretação de Schrödinger, Born apreciou positivamente a teoria e chegou a afirmar nesse trabalho de 1926 que "entre as várias formas da teoria [quântica], apenas o formalismo de Schrödinger se mostra apropriado para esse propósito [análise de fenômenos de colisão]; por esta razão, estou inclinado a considerá-lo como a formulação mais profunda das leis quânticas" (Jammer, 1966, p. 284).

16. O DEBATE SOBRE A EQUIVALÊNCIA

A questão de saber se a diferença entre as abordagens de Schrödinger e de Heisenberg-Born-Jordan seria apenas em relação à *interpretação* da teoria é bastante complexa. Max Jammer esclareceu, em seu livro, que é necessário ter em mente diferentes sentidos do termo "interpretação de uma teoria" (Jammer, 1974, pp. 9-17). Uma teoria física *T* contém, por um lado, um formalismo abstrato *F* e um conjunto *R* de "regras de correspondência" que dão um significado empírico à teoria. Em certo sentido, *R* proporciona uma interpretação de *F*. Porém, além disso, podem existir outros princípios externos a *F*+*R* que complementam a teoria e lhe dão um "sentido", e uma teoria pode também estar associada a um modelo *M*, ou seja, um conjunto de proposições completamente interpretadas cuja estrutura lógica é semelhante ou isomórfica ao conjunto *F*+*R*, mas que tem natureza epistemológica diferente. Além de tudo isso, uma teoria física *T* pode ser eventualmente substituída por uma proposta alternativa *T'* que contém muitos mas não todos os aspectos de *T* (e vice-versa), mas que apresenta de certa forma uma nova interpretação da antiga teoria. Para analisar as relações entre a mecânica ondulatória e a mecânica matricial, é necessário levar em conta essas e outras distinções importantes.

Vários autores questionam as provas de equivalência entre as duas abordagens. Em geral, eles discutem mais detalhadamente apenas a suposta demonstração de Schrödinger, não analisando com o mesmo cuidado as de Eckart e Pauli.

Norwood Russell Hanson (1961a; 1961b) procurou mostrar que a teoria de Schrödinger, do modo como havia sido formulada inicialmente (isto é, do modo como era concebida quando o próprio Schrödinger tentou provar a equivalência)[7], não era capaz de abordar certos fenômenos descritos pela mecânica matricial (porque Schrödinger apenas havia estudado o caso sem dependência do tempo) e tinha conseqüências experimentais diferentes das que podiam ser deduzidas da mecânica matricial, *mas que essas conseqüências se mostraram falsas*. Logo depois, no entanto, Max Born sugeriu uma nova interpretação para a função de onda (Born, 1926) – a interpretação probabilística – que levava a novas conseqüências experimentais. A teoria de Schrödinger, *modificada por Born*, levava a conseqüências iguais às da mecânica matricial *depois que esta também sofreu mudanças*, e assim essas duas teorias se tornaram equivalentes, sob o ponto de vista empírico; mas não eram equivalentes, quando Schrödinger tentou fazer a demonstração.

Frederick Muller concorda com as conclusões de Hanson, mas critica seus argumentos[8]. Ele utilizou uma análise baseada na abordagem semântica ou estrutural de Patrick Suppes. Sua análise não adota um estilo histórico, empregando pelo contrário uma *reconstrução* das teorias que analisa, o que torna um pouco problemáticas suas demonstrações. Suas teses principais são:

---

[7] Inicialmente, Schrödinger não entendia a função de onda como associada a probabilidades e sim com a densidade de carga do elétron extendido, que se espalhava em torno do núcleo de hidrogênio, por exemplo.

[8] “Hanson nega a equivalência mas, infelizmente, por razões completamente erradas” (Muller, 1997, p. 37, nota 4).

(1) Quando Schrödinger e Eckart apresentaram suas demonstrações de equivalência, a mecânica matricial e a mecânica ondulatória não eram equivalentes nem sob o ponto de vista matemático nem empírico.

> Desde o início era óbvio e reconhecido por todos os jogadores que a mecânica matricial e a mecânica ondulatória eram distintas *ontologicamente*, no sentido de fazer afirmações conflitantes sobre a realidade atômica. Mas argumentando contra a equivalência *matemática* e *empírica*, o autor pretende questionar pelo menos todos os testemunhos do Mito da Equivalência referidos acima[9]. Uma razão para a falha da equivalência matemática é o fato de que enquanto a mecânica matricial podia em princípio descrever a evolução no tempo de sistemas físicos (pela equação de Born-Jordan), mas se limitava desnecessariamente a fenômenos periódicos, a mecânica ondulatória não o podia – a equação de onda dependente do tempo, de Schrödinger, data de 3 meses depois de sua prova de equivalência. Outras razões para a falha da equivalência matemática são: a ausência na mecânica matricial de um espaço de estados, mas sua presença na mecânica ondulatória (o espaço de funções de onda); o fato de que o espaço Euclidiano e um conjunto de densidades de carga e matéria, ambos presentes de forma proeminente na mecânica ondulatória, não possuíam correspondentes na mecânica matricial; e o fato de que a mecânica matricial produziu a primeira teoria do campo eletromagnético quantizado por meio de campos com valores matriciais, enquanto Schrödinger enfatizava que não havia motivo para brincar com as equações de Maxwell na mecânica ondulatória. A não-equivalência empírica entre a mecânica matricial e a mecânica ondulatória provém das densidades de carga espalhadas, que tornam concebível realizar um

[9] Muller apresentou no seu artigo uma longa lista de trabalhos que admitem o “mito da equivalência”: que a mecânica matricial e a mecânica ondulatória eram equivalentes quando apareceram as demonstrações de 1926, e que as provas de Schrödinger e Eckart eram válidas.

experimentum crucis por medidas de carga em elétrons. (Muller, 1997, p. 38)

Outra diferença inicial interessante, apontada por Muller, é que inicialmente a mecânica ondulatória não era capaz de calcular as intensidades das raias espectrais (que a teoria matricial calculava), mas logo Schrödinger adicionou um novo postulado, que permitia fazer esses cálculos (Muller, 1997, pp. 57-58).

Muller também alega que: (2) A diferença ontológica entre as duas teorias estava embutida nas suas estruturas matemáticas, sendo impossível representar na mecânica matricial algo equivalente ao espaço Euclidiano, as densidades de carga e matéria e as ondas estacionárias; (3) Mesmo sob o ponto de vista matemático, a demonstração de Schrödinger é falha; (4) Existe uma equivalência matemática, como a que Schrödinger queria demonstrar, mas que só foi demonstrada por Von Neumann (1932), e que depende de modificações das duas teorias[10]; (5) A equivalência só se tornou possível porque as matrizes infinitas originais passaram depois a ser consideradas apenas como especificações parciais de operadores lineares atuando no espaço de Hilbert de seqüências complexas. Muller propôs uma nova prova de que as "versões finais" das duas mecânicas (que não correspondem às teorias iniciais, sob o ponto de vista histórico) são matematicamente e empiricamente equivalentes.

O próprio van der Waerden, que publicou a carta em que Pauli procura mostrar a equivalência entre as duas abordagens, considera que não existe tal equivalência. Ele apresenta de

[10] Hanson colocou em questão a própria demonstração de Von Neumann, pelo seguinte motivo: Von Neumann desenvolveu uma nova versão da mecânica quântica, utilizando operadores Hermitianos em um espaço de Hilbert e a mecânica quântica desenvolvida anteriormente *não* utilizava esse formalismo. Depois, Von Neumann provou que a mecânica ondulatória e a matricial podiam ser considerados como casos particulares desse novo formalismo. Hanson aponta que há problemas graves em uma prova desse tipo.

forma esquemática as hipóteses fundamentais das duas teorias e discute quais podem ser deduzidas (ou são equivalentes) às outras. Vamos apresentar rapidamente esse argumento:

De acordo com van der Waerden, a mecânica ondulatória (MO) exposta por Schrödinger nos seus dois primeiros artigos se baseia nas seguintes hipóteses (Waerden, 1973, p. 276):

MO1) Há estados estacionários determinados por funções de onda complexas $\psi(q)$, que permanecem finitas em todos os pontos do espaço.

MO2) A função ψ satisfaz uma equação diferencial $H\psi=E\psi$, onde E é o valor da energia e H é um operador obtido a partir do hamiltoniano clássico $H(q,p)$ substituindo os momentos pelo operador diferencial $(k/\mathrm{i})(\partial/\partial \mathrm{q})$, onde $k=h/2\pi$.

MO3) Os autovalores da equação diferencial acima são os valores da energia do sistema.

MO4) A frequência da radiação emitida quando o sistema passa de um estado de energia E_m para outro estado de energia inferior E_n é dado pela relação de Bohr $E_m–E_n=\mathrm{h}\nu_{mn}$.

Van der Waerden descreve, por outro lado, a mecânica matricial (MM) apresentada no "trabalho dos três homens" como estando baseada nas seguintes hipóteses (Waerden, 1973, pp. 276-277):

MM1) O comportamento de um sistema mecânico é determinado pelas matrizes **p** e **q** (uma matriz **q** para cada coordenada q e uma matriz **p** para cada coordenada p).

MM2) É válida a relação matricial $\mathbf{pq}-\mathbf{qp}=(k/\mathrm{i})\mathbf{1}$, se p está associado à coordenada q, ou igual a zero, no caso contrário.

MM3) A matriz $\mathbf{W}=\mathrm{H}(\mathbf{p},\mathbf{q})$ é diagonal, e seus elementos diagonais são os valores da energia do sistema.

MM4) As equações do movimento são:

$$\dot{\mathrm{p}} = -\frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathrm{q}}, \quad \dot{\mathrm{q}} = \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial \mathrm{p}}$$

Como consequência dessa hipóteses podem ser obtidas as frequências ν_n associadas aos diversos estados do sistema e os

coeficientes a_{mn} que determinam as amplitudes: $E_n=h\nu_n$; $p_{mn}=a_{mn}\, exp[2\pi i(\nu_m-\nu_n)t]$.
MM5) O postulado de Bohr, $E_m-E_n=h\nu_{mn}$.
MM6) As probabilidades de transição são proporcionais a $|a_{mn}|^2$.

Antes de prosseguir com a descrição da análise de van der Waerden, é importante mencionar que a hipótese MO4 era, para Schrödinger, uma consequência de sua concepção (a frequência do batimento de duas oscilações diferentes) e não uma hipótese adicional, como já foi mencionado.

Se as duas teorias fossem equivalentes, seria possível deduzir os conjunto MM(1,2,3,4,5,6) do conjunto MO(1,2,3,4) e vice-versa. As hipóteses MO4 e MM5 são idênticas. Van der Waerden afirma que a demonstração de Schrödinger corresponde a provar que a partir de MO(1,2,3) é possível deduzir MO(1,2,3) e que, no caso em que se assuma que a função ψ pode depender do tempo (o que não faz parte das hipóteses dos dois primeiros artigos de Schrödinger) é possível também provar MM4. No entanto, não é possível provar MM6 a partir das hipóteses de Schrödinger (Waerden, 1973, p. 277).

Van der Waerden também afirma que é impossível deduzir as hipóteses de Schrödinger a partir da mecânica matricial porque a mecânica ondulatória contém o conceito de "estado estacionário" (ver MO1) que não existe na mecânica matricial. Ou seja: de acordo com o autor, nem é possível deduzir MM(1,2,3,4,5,6) de MO(1,2,3,4), nem é possível deduzir MO(1,2,3,4) de MM(1,2,3,4,5,6).

Outro autor que questionou as demonstrações de equivalência foi Enrico Giannetto (1997). Em sua análise, ele enfatizou que, na época da tentativa de demonstração de equivalência, a teoria matricial somente podia ser aplicada a grandezas físicas discretas (como o espectro atômico descontínuo) e não a grandezas físicas contínuas. Pelo contrário, a teoria de Schrödinger abrangia grandezas contínuas, levando apenas em casos particulares a algumas situações em que apareciam indiretamente grandezas físicas discretas (estados estacionários). Somente depois da suposta demonstração de equivalência, e sob a inspiração do trabalho de Schrödinger, a mecânica matricial foi modificada (pelo formalismo dos operadores) de modo a poder incorporar o caso contínuo. Além disso, Giannetto indica também que as duas teorias eram diferentes sob os pontos de vista matemático (com linguagens que, *pelo modo como eram usadas*, não eram equivalentes), ontológico e epistemológico[11]. Este autor também enfatiza que o trabalho de Born não foi uma inocente reinterpretação, mas uma mudança profunda do trabalho de Schrödinger, resultando em uma nova teoria com diferente conteúdo físico. Ele também afirma que, a partir da teoria matricial, teria sido impossível desenvolver uma teoria relativística de campos, pois esta pressupõe um espaço-tempo contínuo, que não pode ser representado no formalismo matricial.

Cada um desses trabalhos aponta diferentes aspectos do problema. Eles concordam em alguns pontos – especialmente quanto à não equivalência entre as duas mecânicas, em 1926 – mas discordam em muitos outros. Pode-se dizer que a questão de saber até que ponto as duas abordagens eram ou não equivalentes ainda está em aberto.

17. CONSIDERAÇÕES FINAIS

> Geralmente se considera o progresso da Ciência como um tipo de avanço racional, limpo, ao longo de uma linha reta ascendente; na verdade, ele segue um caminho em zigue-zague, algumas vezes mais desconcertante do que a evolução do pensamento político. Em particular, a história das teorias cósmicas pode ser chamada, sem exagero, de uma história de obsessões coletivas e de esquizofrenias controladas; e a maneira pela qual se chegou a algumas das descobertas individuais mais importantes nos lembra mais o desempenho

[11] "A linguagem das equações diferenciais da mecânica ondulatória está não apenas historicamente, mas também estruturamente (sintaticamente) conectada ao determinismo mecanicista, causal e continuista, espaço-temporal e reversibilista, da ontologia da física clássica" (Giannetto, 1977, p. 3).

> de um sonâmbulo do que o de um cérebro eletrônico. (Koestler, 1959, p. 15)

Arthur Koestler, em seu livro *Os sonâmbulos*, sugere que a chamada Revolução Copernicana foi realizada por pessoas que produziam suas contribuições astronômicas sem estar totalmente conscientes sobre o que estavam fazendo (Koestler, 1959). O desenvolvimento da mecânica quântica apresenta uma situação que se enquadra com a visão de Koestler. É muito claro que Heisenberg não tinha a menor ideia sobre o que estava fazendo quando escreveu seu primeiro artigo de 1925. Os criadores da mecânica quântica não partiram de ideias claras nem utilizaram deduções bem fundamentadas, mas produziram trabalhos cuja única justificativa, no período inicial, era que conseguiam dar conta de algum fenômeno já conhecido. Havia problemas em todos os trabalhos iniciais e os pesquisadores iam tateando, alterando pontos importantes da teoria, explorando novas hipóteses e métodos matemáticos, sem ter uma visão muito clara a respeito do que estavam construindo.

A mecânica matricial (Heisenberg, Born, Jordan) e a mecânica ondulatória (Schrödinger) foram construídas independentemente uma da outra, com pontos de partida completamente diferentes e utilizando também técnicas distintas. As duas tiveram sucesso na explicação de fenômenos quânticos. Trata-se de duas teorias, ou apenas formas diferentes de uma mesma teoria? Esta é uma pergunta importante, para a qual Schrödinger, Dirac, Pauli, von Neumann e outros importantes pesquisadores tentaram fornecer uma resposta. No entanto, ainda há dúvidas sobre essa questão, que merece uma investigação mais profunda.

AGRADECIMENTOS

O autor agradece o apoio recebido através da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BELLER, Mara. Pascual Jordan's influence on the discovery of Heisenberg's inderminacy principle. *Archives for the History of Exact Sciences* **33**: 337-349, 1985.

BOHR, Niels. On the quantum theory of line-spectra. *Kongelige Danske Videnskabernes Skrifter, Naturvidenskabelig og Mathematisk Afdeling*, **4**.1: 1-36, 37-100, 1918.

BOHR, Niels; KRAMERS, Hendrik Antony & SLATER, John Clarke. The quantum theory of radiation. *Philosophical Magazine* **47**: 785-802, 1924.

BORN, Max. Über Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **26**: 379-395, 1924.[12]

BORN, Max. Zur Quantenmechanik der Stossvorgänge. *Zeitschrift für Physik* **37**: 863-867, 1926; **38**: 803-827, 1926.[13]

BORN, Max. *My life: Recollections of a Nobel laureate*. New York: Scribner, 1978.

BORN, Max; HEISENBERG, Werner & JORDAN, Pascual. Zur Quantenmechanik II. *Zeitschrift für Physik* **35**: 557-615, 1925.[14]

BORN, Max; JORDAN, Pascual. Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **34**: 858-888, 1925.[15]

BORN, Max; WIENER, Norbert. A new formulation of the laws of quantization of periodic and aperiodic phenomena. *Journal of Mathematical Physics* **5**: 84-98, 1926.[16]

BROGLIE, Louis de. *Recherches sur la théorie des quanta.* Thèses présentées à la Faculté des Sciences de l'Université

[12] Tradução: Waerden, 1967, pp. 181-198.
[13] Tradução: Ludwig, 1968, pp. 206-225.
[14] Tradução: Waerden, 1967, pp. 307-385.
[15] Tradução: Waerden, 1967, pp. 277-306.
[16] O mesmo trabalho foi publicado em alemão: BORN, Max; WIENER, Norbert. Eine neue Formulierung der Quantengesetze für periodische und nicht periodische Vorgänge. *Zeitschrift für Physik* **36**: 174-187, 1926.

de Paris pour obtenir le grade de docteur ès sciences physiques. Paris: Masson et Cie., 1924.[17]

CONDON, Edward U. Sixty years of quantum physics. *Physics Today* **15** (10): 37-49, October 1962.

CUSHING, James T. Quantum mechanics: historical contingency and the Copenhagen interpretation. Chicago: The University Chicago Press, 1994.

DALITZ, R. H.; PEIERLS, Rudolf. Paul Adrien Maurice Dirac. 8 August 1902-20 October 1984. B*iographical Memoirs of Fellows of the Royal Society* **32**: 138-185, 1986.

DIRAC, Paul Adrian Maurice. The fundamental equations of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London* [Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character] **109** (752): 642-653, 1925.

DIRAC, Paul A. M. Quantum mechanics and a preliminary investigation of the hydrogen atom. *Proceedings of the Royal Society of London* **A 110**: 561-579, 1926 (a).

DIRAC, Paul A. M. The elimination of nodes in quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London* **A 111**: 281-305, 1926 (b).

DIRAC, Paul Adrien Maurice. The quantum algebra. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* **23**: 412-418, 1926 (c).

DIRAC, Paul A. M. The physical interpretation of the quantum dynamics. *Proceedings of the Royal Society of London* **A 113**: 621-641, 1927.

ECKART, Carl. The solution of the problem of the single oscillator by a combination of Schrödinger's wave mechanics and Lanczos' field theory. *Proceedings of the National Academy of Sciences* **12**: 473-476, 1926 (a).

[17] Esta tese de Louis de Broglie, defendida em novembro de 1924, foi depois publicada na íntegra sob a forma de um artigo: BROGLIE, Louis de. Recherches sur la théorie des quanta. *Annales de Physique*, **3**: 44-61, 1925.

ECKART, Carl. Operator calculus and the solution of the equations of motion of quantum dynamics. *Physical Review* **28**: 711-726, 1926 (b).

GIANETTO, Enrico Antonio. Note sulla rivoluzione della meccanica delle matrici di Heisenberg, Born e Jornan e sul problema dell'equivalenza com la meccanica di Schrödinger. *In*: REDUZZI, Luca (org.). *Atti del XVII Congresso Nazionale di Storia della Fisica e dell'Astronomia*. Milano: Universitá degli Studi di Milano, 1997.[18]

HANSON, Norwood Russell. Are wave mechanics and matrix mechanics equivalent theories? *Czechoslovakian Journal of Physics* **11**: 693-708, 1961 (a).

HANSON, Norwood Russell. Are wave mechanics and matrix mechanics equivalent theories? Pp. 401-428, *in*: FEIGL, H. & MAXWELL, G. (eds.). *Current issues in the philosophy of science*. New York: Holt, Rinehart and Winston, 1961 (b). [19]

HEISENBERG, Werner. Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik* **33**: 879-893, 1925.[20]

HEITLER, W. Erwin Schrödinger. 1887-1961. *Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society* **7**: 221-228, 1961.

JAMMER, Max. The conceptual development of quantum mechanics. New York: McGraw Hill, 1966.

JAMMER, Max. The philosophy of quantum mechanics. The interpretations of quantum mechanics in historical perspective. New York: John Wiley, 1974.

[18] Disponível em: <http://albinoni.brera.unimi.it./Atti-Como-97/>. Acesso em: 06 de outubro de 2003.

[19] Apesar de terem o mesmo título, estes dois trabalho de Hanson não são idênticos e o segundo contém também comentários feitos por E. L. Hill a respeito da análise de Hanson.

[20] Tradução: Waerden, 1967, pp. 261-276; Ludwig, 1968, pp. 168-182.

KEMMER, N.; SCHLAPP, R. Max Born. 1882-1970. *Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society* **17**: 17-52, 1971.

KOESTLER, Arthur. The sleepwalkers: a history of man's changing vision of the universe. London: Hutchinson, 1959.

LANCZOS, Kornelius. Über eine feldmässige Darstellung der neuen Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **35**: 812-830, 1926.

LUDWIG, Günter (ed.). *Wave mechanics*. Oxford: Pergamon Press, 1968.

MARTINS, Roberto de Andrade. De Louis de Broglie a Erwin Schrödinger: uma comparação. Pp. 393-409, *in*: FREIRE JR, Olival; PESSOA JR., Osvaldo; BROMBERG, Joan Lisa (orgs). *Teoria quântica: estudos históricos e implicações culturais*. Campina Grande: EDUEPB; São Paulo: Livraria da Física, 2010.

MARTINS, Roberto de Andrade; ROSA, Pedro Sérgio. *História da teoria quântica: a dualidade onda-partícula, de Einstein a De Broglie*. São Paulo: Livraria da Física, 2014.

MEHRA, Jagdish (ed.). *The physicist's conception of nature*. Dordrecht: D. Reidel, 1973.

MOORE, Walter. *Schrödinger: life and thought*. Cambridge: Cambridge University, 1990.

MOTT, Nevill; PEIERLS, Rudolf. Werner Heisenberg. 5 December 1901 – 1 February 1976. *Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society* **23**: 212-251, 1977.

MULLER, Frederick A. The equivalence myth of quantum mechanics. *Studies in the History and Philosophy of Modern Physics* **28**: 35-61; 219-247, 1997; **30**:543-545, 1999.

NEUMANN, John von. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Berlin: Springer, 1932.

NEUMANN, John von. *Mathematical foundations of quantum mechanics*. Translated by R. T. Beyer. Princeton: Princeton University Press, 1955.

Nobel Lectures, Physics 1922-1941. Amsterdam: Elsevier Publishing Company, 1965.

Nobel Lectures, Physics 1942-1962. Amsterdam: Elsevier Publishing Company, 1964.

PEIERLS, Rudolf E. Wolfgang Ernst Pauli. 1900-1958. *Biographical Memoirs of Fellows of the Royal Society* **5**: 174-192, 1960.

PRICE, William C.; CHISSICK, Seymour S.; RAVENSDALE, Tom (ed.s). *Wave mechanics: The first fifty years. A tribute to Louis de Broglie, Nobel laureate, on the 50th anniversary of the discovery of the wave nature of the electron*. New York: Wiley, 1973.

ROSENFELD, Léon. The wave-particle dilemma. Pp. 251-261, *in*: MEHRA, Jagdish (ed.). *The physicist's conception of nature*. Dordrecht: D. Reidel, 1973.

SCHRÖDINGER, Erwin. Quantisierung als Eigenwertproblem. Erste Mitteilung. *Annalen der Physik* **79**: 361-376, 1926 (a).[21]

SCHRÖDINGER, Erwin. Quantisierung als Eigenwertproblem II. *Annalen der Physik* **79**: 489-527, 1926 (b).[22]

SCHRÖDINGER, Erwin. Über das Verhältnis der Heisenberg-Born-Jordanschen Quantenmechanik zu der meinen. *Annalen der Physik* **79**: 734-756, 1926 (c).[23]

SCHRÖDINGER, Erwin. Quantisierung als Eigenwertproblem III. *Annalen der Physik* **80**: 437-490, 1926 (d).[24]

SCHRÖDINGER, Erwin. Quantisierung als Eigenwertproblem IV. *Annalen der Physik* **81**: 109-139, 1926 (e).[25]

[21] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 1-12.
[22] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 13-40.
[23] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 45-61.
[24] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 62-101.
[25] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 102-121.

SCHRÖDINGER, Erwin. Der stetige Übergang von der Mikro- zur Makromechanik. *Naturwissenschaften* **14**: 664-666, 1926 (f).[26]

SCHRÖDINGER, Erwin. An undulatory theory of the mechanics of atoms and molecules. *Physical Review* [series 2] **28**: 1049-1070, 1926 (g).

SCHRÖDINGER, Erwin. Energieaustausch nach der Wellenmechanik. *Annalen der Physik* **83**: 956-968, 1927.[27]

SCHRÖDINGER, Erwin. *Collected papers on wave mechanics*. Translated by J. F. Shearer & W. M. Deans. London: Blackie & Son, 1928.

SCHROER, Bert. Pascual Jordan, his contributions to quantum mechanics and his legacy in contemporary local quantum physics [2003]. Disponível em <http://arxiv.org/pdf/hep-th/0303241>, acessado em 20/01/2006.

SUPPES, Patrick (ed.). *Studies in the foundations of quantum mechanics*. East Lansing, MI: Philosophy of Science Association, 1980.

WAERDEN, Bartel Leendert van der (ed.). *Sources of quantum mechanics*. Amsterdam: North-Holland, 1967.

WAERDEN, Bartel Leendert van der. From matrix mechanics and wave mechanics to unified quantum mechanics. Pp. 276-293, *in*: MEHRA, Jagdish (ed.). *The physicist's conception of nature*. Dordrecht: D. Reidel, 1973.

[26] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 41-44.
[27] Tradução: Schrödinger, 1928, pp. 137-146.

Scientiarum Historia et Theoria Studia, volume 4

Roberto de Andrade Martins

Ensaios sobre História e Filosofia das Ciências I

Extrema: Quamcumque Editum, 2021

Sumário

Paperback edition: ISBN 978-65-996890-6-2
Kindle edition: ISBN 978-65-996890-7-9

Available at:
https://www.amazon.com/dp/659968906X