O Postulado Quântico e o Recente Desenvolvimento da Teoria Atômica*1

NIELS BOHR (1928)

Apesar do grande prazer que tenho em aceitar o gentil convite da presidência do congresso para fazer um relato do estado presente da teoria quântica, tendo em vista abrir a discussão geral sobre este assunto que ocupa uma posição tão central na moderna ciência física, é com certa hesitação que assumo esta tarefa. Não só o venerável originador da teoria está presente ele mesmo, como na platéia se encontram vários que, devido a sua participação no notável desenvolvimento recente, certamente estarão mais versados do que eu nos detalhes do altamente desenvolvido formalismo. Mesmo assim, tentarei, fazendo uso apenas de considerações simples e sem entrar em quaisquer detalhes de caráter matemático técnico, descrever para vocês um certo ponto de vista geral que acredito ser adequado para dar uma impressão da tendência geral do desenvolvimento da teoria desde seus primórdios, e que espero seja útil para harmonizar as concepções aparentemente conflitantes adotadas por diferentes cientistas. Nenhum assunto, de fato, é mais apropriado do que a teoria quântica para marcar o desenvolvimento da física no século que passou desde a morte do grande gênio*2 que estamos aqui reunidos para comemorar. Ao mesmo tempo, justamente em um campo como este onde estamos vagando por novos caminhos e temos que confiar em nosso próprio julgamento para escapar das armadilhas que nos cercam por todos os lados, temos talvez mais oportunidade do que nunca para, a cada passo, nos lembrarmos da obra dos velhos mestres que prepararam o terreno

52

53

*1 Tradução de "The Quantum Postulate and the Recent Development of Atomic Theory", *Nature 121* (1928) 580-90. Reimpresso em N. Bohr: *Atomic Theory and the Description of Nature*, Cambridge U. Press, 1934, pp. 52-91, e em J.A. Wheeler & W.H. Zurek (orgs.): *Quantum Theory and Measurement*, Princeton U. Press, 1983, pp. 87-126. Tradução e notas de Osvaldo Pessoa Jr. Os números ao lado do texto indicam as páginas da publicação de 1934. A seção 1 pode ser trabalhada com proveito na sala de aula. Um resumo das diferentes seções é o seguinte: 1) Introdução à noção de complementaridade. 2) Introdução ao princípio de incerteza. 3) Exame mais aprofundado do princípio de incerteza. 4) Resumo histórico do desenvolvimento da mecânica matricial. 5) Resumo da mecânica ondulatória e dos problemas da interpretação de Schrödinger. 6) Exploração do conceito de estados estacionários de um átomo. 7) Perspectivas de desenvolvimento da teoria quântica.

^{*2} Trata-se de Alessandro Volta (1745-1827). Este artigo é uma versão um pouco modificada da apresentação feita por Bohr em 16 de setembro de 1927 no Congresso Internacional de Física realizado em Como, na Itália, cidade natal de Volta. Na platéia, além de Max Planck, estava presente a maioria dos fundadores da teoria quântica, com exceção de Ehrenfest e Einstein, que no entanto estariam no 5º Congresso de Solvay, no mês seguinte, onde Bohr repetiria sua palestra.

e nos forneceram nossos instrumentos.

1. Postulado Quântico e Causalidade

A teoria quântica é caracterizada pelo reconhecimento de uma limitação fundamental nas idéias físicas clássicas quando aplicadas a fenômenos atômicos. A situação assim criada é de natureza peculiar, já que a nossa interpretação do material experimental repousa essencialmente em conceitos clássicos*3. Apesar das dificuldades que, portanto, estão envolvidas na formulação da teoria quântica, parece, como veremos, que sua essência pode ser expressa no chamado postulado quântico, que atribui a qualquer processo atômico uma descontinuidade essencial, ou melhor, uma individualidade, completamente estranha às teorias clássicas e simbolizada pelo quantum de ação de Planck*4.

Este postulado implica uma renúncia com respeito à coordenação espaçotemporal causal de processos atômicos. De fato, nossa descrição usual de fenômenos físicos é baseada inteiramente na idéia de que os fenômenos envolvidos podem ser observados sem que se provoque um distúrbio apreciável sobre eles. Isso aparece de maneira clara, por exemplo, na teoria da relatividade, que tem sido tão frutífera para a elucidação das teorias clássicas. Conforme enfatizado por Einstein, toda observação ou medição repousa em última análise na coincidência de dois eventos independentes no mesmo ponto espaço-temporal. Somente estas coincidências não serão afetadas por quaisquer outras diferencas que possam existir entre a coordenação espaço-temporal de diferentes observadores. Agora, o postulado quântico implica em que qualquer observação de fenômenos atômicos envolverá uma interação com o agente da observação que não deve ser desprezada. Assim, uma realidade independente no sentido físico ordinário não pode ser atribuída nem aos fenômenos*5, nem aos agentes da observação. Afinal, o conceito de observação é arbitrário à medida que depende de quais objetos são incluídos no sistema a ser observado. Em última análise, toda observação pode, é claro, ser reduzida às nossas percepções sensoriais. No entanto, a circunstância de que, ao se interpretar observações, uso tem sempre que ser feito de noções teóricas implica em que para cada caso particular é uma questão de conveniência em que ponto

_

^{*3} Esta é a "tese da linguagem clássica", que Bohr desenvolveria ao longo de sua vida.

^{*4} Para Bohr, esta descontinuidade deve ser aceita como um princípio. Assim, o problema do colapso descontínuo da função de onda não tem importância para ele, pois a descontinuidade já está inserida no postulado quântico.

^{*5} Esta é talvez a mais célebre afirmação anti-realista de Bohr. Não faz sentido atribuir realidade ao objeto físico, independente de um observador. Notemos que o termo "fenômeno" ainda se refere ao objeto separado do observador. A partir de 1935, o termo "fenômeno" designaria o todo envolvendo objeto e todas as partes do arranjo experimental.

introduzir o conceito de observação*6, envolvendo o postulado quântico com sua inerente "irracionalidade".

Essa situação tem consequências importantes. Por um lado, a definição do estado de um sistema físico, entendido de maneira ordinária, requer a eliminação de todos os distúrbios externos*7. Mas neste caso, segundo o postulado quântico, qualquer observação será impossível, e, acima de tudo, os conceitos de espaço e de tempo perdem seu sentido imediato. Por outro lado, se, de modo a tornar possível uma observação, permitirmos certas interações com agentes apropriados de medição que não pertencem ao sistema, então uma definição sem ambigüidades do estado do sistema naturalmente não é mais possível, e não se pode falar em causalidade no sentido ordinário da palavra. A própria natureza da teoria quântica nos força assim a considerar a coordenação espaço-temporal e a asserção da causalidade, cuja união caracteriza as teorias clássicas, como aspectos complementares mas exclusivos da descrição, simbolizando a idealização da observação e da definição, respectivamente*8. Do mesmo modo que a teoria da relatividade nos ensinou que a conveniência de se distinguir de maneira exata entre espaco e tempo repousa unicamente no fato de que as velocidades ordinariamente encontradas são baixas comparadas com a velocidade da luz, aprendemos com a teoria quântica que a adequação da nossa descrição espaço-temporal causal depende inteiramente do baixo valor do quantum de ação comparado com as ações envolvidas nas percepções sensoriais usuais. De fato, na descrição de fenômenos atômicos, o postulado quântico nos apresenta a tarefa de desenvolver uma teoria da "complementaridade", cuja consistência pode ser avaliada apenas pesando-se as possibilidades de definição e observação.

Esta concepção já é claramente ressaltada na muito discutida questão da natureza da luz e dos constituintes últimos da matéria. Com respeito à luz, sua propagação no espaço e no tempo é expressa de maneira adequada pela teoria eletromagnética. Especialmente o fenômeno da interferência no vácuo e as propriedades ópticas de meios materiais são governados de maneira completa pelo

^{*6} Esta afirmação constitui a tese do "paralelismo psicofísico", mais tarde explorada formalmente por von Neumann. O corte entre sujeito clássico e objeto quântico pode ser traçado em qualquer ponto da cadeia unindo os dois. Bohr tocará novamente neste ponto na p. 67.

^{*7} Esta afirmação reflete o fato de que a equação de Schrödinger (ou outro tipo de evolução unitária) só se aplica a sistemas fechados. No caso seguinte, em que há uma interação com o aparelho de medição, não se aplica mais esta equação determinista, mas sim o postulado da projeção.

^{*8} Este é primeiro enunciado feito por Bohr do princípio de complementaridade, entre a coordenação espaço-temporal e a asserção da causalidade, ou entre a observação e a definição. Chamaremos este o 1º tipo de complementaridade. Ele é usado ao longo de todo o artigo, mas posteriormente Bohr abandonaria esta formulação, basicamente porque a "definição" se refere a entidades não-observáveis (abstrações). Notemos também que o uso que Bohr faz do termo "causalidade" deve ser entendido como "determinismo".

princípio de superposição da teoria ondulatória. Contudo, a conservação de energia e momento*9 durante a interação entre radiação e matéria, evidenciada pelos efeitos fotoelétrico e Compton, encontra sua expressão adequada apenas na idéia de quantum de luz apresentada por Einstein*10. Como é bem sabido, as dúvidas concernentes à validade do princípio de superposição, por um lado, e às leis de conservação, por outro, que foram sugeridas por essa aparente contradição, foram definitivamente refutadas através de experimentos diretos. Essa situação pareceria claramente indicar a impossibilidade de uma descrição espaço-temporal causal do fenômeno da luz. Por um lado, ao tentar traçar as leis da propagação espaçotemporal da luz de acordo com o postulado quântico, estamos confinados a considerações estatísticas. Por outro lado, a satisfação da asserção da causalidade para os processos individuais de luz, caracterizados pelo quantum de ação, acarreta uma renúncia com respeito à descrição espaço-temporal. É claro, não se pode falar em uma aplicação totalmente independente das idéias de espaço e tempo e de causalidade. Os dois pontos de vista sobre a natureza da luz devem ser considerados, mais exatamente, como tentativas diferentes de se interpretar a evidência experimental, nas quais a limitação dos conceitos clássicos é expressa de maneiras complementares.

O problema da natureza dos constituintes da matéria nos apresenta uma situação análoga. A individualidade dos corpúsculos elétricos elementares nos é imposta pela evidência geral. Contudo, experiência recente, sobretudo a descoberta da reflexão seletiva de elétrons por cristais metálicos*11, requer o uso do princípio de superposição da teoria ondulatória, em conformidade com as idéias originais de L. de Broglie. Exatamente como no caso da luz, temos conseqüentemente, no caso da natureza da matéria, enquanto aderirmos a conceitos clássicos, que enfrentar um dilema inevitável que tem que ser considerado como a própria expressão da evidência experimental. De fato, estamos aqui novamente tratando não de representações contraditórios dos fenômenos, mas representações complementares, que somente juntas oferecem uma generalização natural do modo clássico de descrição. Na discussão destas questões, não se deve esquecer que, segundo a concepção adotada acima, tanto a radiação no vácuo como partículas materiais

57

 $^{^{*9}}$ O termo momentum será sempre traduzido por "momento", significando a "quantidade de movimento".

^{*10} Bohr utiliza as distinções precedentes para desembocar na dualidade onda-partícula: os aspectos ondulatórios (princípio de superposição) e corpusculares (conservação de energia e momento) da luz – e da matéria – são complementares. Chamaremos este o 2º tipo de complementaridade. Notemos, porém, que aqui Bohr está associando o aspecto ondulatório à "definição" (à função de onda, ao não observado). Posteriormente, Bohr passaria a definir o "fenômeno ondulatório" no âmbito da observação (quando ocorre interferência) – abandonando o 1º tipo de complementaridade –, assim como o "fenômeno corpuscular" (quando é possível inferir trajetórias).

^{*11} Davisson, C.J. & Germer, L.H., Physical Review 30 (1927) 705-740.

isoladas são abstrações, sendo que suas propriedades na teoria quântica são definíveis e observáveis apenas através de sua interação com outros sistemas^{*12}. Contudo, estas abstrações são, como veremos, indispensáveis para uma descrição da experiência que tenha ligação com o nosso ponto de vista espaço-temporal ordinário.

As dificuldades que a descrição espaço-temporal causal enfrenta na teoria quântica, e que têm sido assunto de repetidas discussões, estão agora colocadas em primeiro plano pelo recente desenvolvimento de métodos simbólicos. Uma contribuição importante para o problema de uma aplicação consistente destes métodos foi recentemente feita por Heisenberg. Particularmente, ele salientou a peculiar incerteza recíproca que afeta todas as medições de quantidades atômicas. Antes de entrarmos em seus resultados, será vantajoso mostrar como a natureza complementar da descrição que aparece nesta incerteza *13 é inevitável já em uma análise dos conceitos mais elementares usados na interpretação da experiência.

2. Quantum de Ação e Cinemática

O contraste fundamental entre o quantum de ação e os conceitos clássicos é imediatamente aparente a partir das fórmulas simples que formam o fundamento comum da teoria de quanta de luz e da teoria ondulatória das partículas materiais. Se a constante de Planck for denotada por h, como é bem sabido,

$$E\tau = I\lambda = h \tag{1}$$

onde E e I são respectivamente energia e momento, τ e λ os correspondentes período de vibração e comprimento de onda. Nessas fórmulas as duas noções de luz e também de matéria aparecem em forte contraste. Enquanto a energia e o momento estão associados ao conceito de partículas, e portanto podem ser caracterizados de acordo com o ponto de vista clássico através de coordenadas de espaço-tempo precisas, o período de vibração e o comprimento de onda se referem a um trem de onda de extensão ilimitada no espaço e no tempo. Somente com a ajuda do princípio de superposição torna-se possível conseguir uma conexão com o modo ordinário de descrição. De fato, uma limitação na extensão dos campos ondulatórios no espaço e no tempo pode sempre ser considerado como resultando da interferência de um grupo de ondas harmônicas elementares. Conforme

^{*12} Estas abstrações referem-se ao que antes Bohr chamou de "definição". Na frase do texto, ele está usando a expressão "definíveis" em sentido diferente.

^{*13} Trata-se do 3º tipo de complementaridade, entre observáveis incompatíveis. Ao passo que os conceitos de onda e partícula são mutuamente excludentes na física clássica, observáveis como posição e momento são perfeitamente consistentes na mecânica clássica de partículas.

mostrado por de Broglie, a velocidade translacional dos indivíduos associados às ondas pode ser representada justamente pela chamada velocidade de grupo. Denotemos uma onda elementar plana por

$$A\cos 2\pi(vt - x\sigma_x - y\sigma_y - z\sigma_z + \delta)$$
,

onde A e δ são constantes determinando respectivamente a amplitude e a fase. A quantidade $v = 1/\tau$ é a freqüência, σ_x , σ_y , σ_z os números de onda na direção dos eixos coordenados, que podem ser considerados como componentes de vetor do número de onda $\sigma = 1/\lambda$ nas direções de propagação. Enquanto que a velocidade de onda ou de fase é dada por V/σ , a velocidade de grupo é definida como $dV/d\sigma$. Agora, segundo a teoria da relatividade, temos para uma partícula com velocidade V:

$$I = \frac{V}{c^2}E \qquad e \qquad V dI = dE \quad ,$$

onde c denota a velocidade da luz. Portanto, a partir da equação (1), a velocidade de fase é c^2/V e a velocidade de grupo V. A circunstância de que o primeiro é em geral maior do que a velocidade da luz enfatiza o caráter simbólico dessas considerações. Ao mesmo tempo, a possibilidade de identificar a velocidade da partícula com a velocidade de grupo indica o campo de aplicação das representações espaço-temporais na teoria quântica. Aqui aparece o caráter complementar da descrição, já que o uso de grupos de onda é necessariamente acompanhado de uma falta de exatidão nas definições de período e de comprimento de onda, e portanto também nas definições da energia e do momento correspondentes, conforme a relação (1).

Rigorosamente falando, um campo ondulatório limitado só pode ser obtido através da superposição de uma multiplicidade de ondas elementares correspondendo a todos os valores de v e σ_x , σ_y , σ_z . Mas a ordem de grandeza da diferença média entre esses valores para duas ondas elementares no grupo é dada, no caso mais favorável, pela condição

$$\Delta t \, \Delta v = \Delta x \, \Delta \sigma_x = \Delta y \, \Delta \sigma_v = \Delta z \, \Delta \sigma_z = 1 ,$$

onde Δt , Δx , Δy , Δz denotam a extensão do campo ondulatório no tempo e nas direções do espaço correspondendo aos eixos coordenados. Essas relações – bem conhecidas da teoria de instrumentos óticos, especialmente da investigação de Rayleigh do poder de resolução de um aparelho espectral – exprimem a condição de que os trens de onda se extinguem mutuamente através de interferência no contorno espaço-temporal do campo ondulatório. Elas podem também ser consideradas como significando que o grupo como um todo não tem fase no mesmo sentido que ondas elementares. A partir da equação (1) encontramos assim:

60

$$\Delta t \, \Delta E = \Delta x \, \Delta I_x = \Delta y \, \Delta I_y = \Delta z \, \Delta I_z = h \,, \tag{2}$$

como determinando a mais alta acuidade possível na definição da energia e do momento dos indivíduos associados ao campo ondulatório. Em geral, as condições para que se atribua um valor de energia e de momento para um campo ondulatório por meio da fórmula (1) são muito menos favoráveis. Mesmo que a composição do grupo de onda corresponda de início às relações (2), ela estará sujeita com o passar do tempo a variações tais que ela se torna cada vez menos adequada para representar um indivíduo. É exatamente esta circunstância que dá origem ao caráter paradoxal do problema da natureza da luz e das partículas materiais. A limitação nos conceitos clássicos expressa através da relação (2) está, além disso, intimamente ligada à validade limitada da mecânica clássica, que na teoria ondulatória da matéria corresponde à óptica geométrica na qual a propagação das ondas é retratada por meio de "raios". É somente neste limite que se pode definir sem ambigüidades a energia e o momento com base em representações espaçotemporais. Para uma definição geral desses conceitos estamos confinados às leis de conservação, cuja formulação racional tem sido um problema fundamental para os métodos simbólicos a serem mencionados abaixo.

Na linguagem da teoria da relatividade, o conteúdo das relações (2) pode ser resumido pela afirmação de que segundo a teoria quântica existe uma relação recíproca geral entre a exatidão máxima de definição dos vetores de espaço-tempo e dos de energia-momento associados aos indivíduos. Esta circunstância pode ser considerada como uma expressão simbólica simples da natureza complementar da descrição espaço-temporal e das asserções da causalidade. Ao mesmo tempo, contudo, o caráter geral dessa relação faz com que seja possível reconciliar até certo ponto as leis de conservação com a coordenação espaço-temporal das observações, substituindo-se a idéia de uma coincidência de eventos bem definidos em um ponto espaço-temporal pela idéia de indivíduos definidos de maneira inexata dentro de regiões espaço-temporais finitas.

Esta circunstância nos permite evitar os paradoxos bem conhecidos que são encontrados ao se tentar descrever o espalhamento da radiação por partículas elétricas livres, assim como a colisão de duas tais partículas. De acordo com os conceitos clássicos, a descrição do espalhamento requer uma extensão finita da radiação no espaço e no tempo, enquanto que na variação do movimento do elétron exigido pelo postulado quântico está-se aparentemente lidando com um efeito instantâneo ocorrendo em um ponto preciso do espaço. Contudo, exatamente como no caso da radiação, é impossível definir o momento e a energia para um elétron sem considerar uma região espaço-temporal finita. Além disso, uma aplicação das leis de conservação ao processo implica em que a acurácia *14 de definição do vetor

^{*14} Bohr usa o termo *accuracy*, que traduzimos por "acurácia", não no sentido aceito hoje em dia de "diferença entre um valor medido e o valor tomado como real", mas como a "resolução" de uma medição, ou seja, a inexatidão inerente a uma medição individual.

de energia-momento é a mesma para a radiação e para o elétron. Consequentemente, segundo a relação (2), pode-se atribuir o mesmo tamanho para as regiões espaço-temporais associadas a cada um dos indivíduos em interação.

Um comentário semelhante se aplica à colisão entre duas partículas materiais, apesar da importância do postulado quântico para este fenômeno ter sido desconsiderada antes de se perceber a necessidade do conceito de onda. Aqui, este postulado de fato representa a idéia da individualidade das partículas que, transcendendo a descrição espaço-temporal, satisfaz a asserção da causalidade*15. Enquanto que o conteúdo físico da idéia de quantum de luz está inteiramente ligado aos teoremas de conservação de energia e momento, no caso das partículas elétricas a carga elétrica precisa ser levada em conta neste contexto. Mal é necessário mencionar que para uma descrição mais detalhada da interação entre indivíduos não podemos nos restringir aos fatos expressos pelas fórmulas (1) e (2), mas temos que recorrer a um procedimento que nos permita levar em conta o acoplamento dos indivíduos, caracterizando a interação em questão, que é justamente onde aparece a importância da carga elétrica. Como veremos, tal procedimento torna necessário um afastamento adicional em relação à visualização no sentido usual.

3. Medições na Teoria Quântica

Em suas investigações sobre a consistência dos métodos da teoria quântica, as quais já mencionamos, Heisenberg forneceu a relação (2) como uma expressão da precisão máxima com a qual as coordenadas de espaço-tempo e os componentes de momento-energia de uma partícula podem ser medidos simultaneamente. Seu ponto de vista baseou-se na seguinte consideração: por um lado, as coordenadas de uma partícula podem ser medidas com qualquer grau desejado de acurácia usando, por exemplo, um instrumento óptico, desde que radiação de comprimento de onda suficientemente pequeno seja usado para a iluminação. De acordo com a teoria quântica, contudo, o espalhamento da radiação pelo objeto está sempre ligado a uma variação finita no momento, que é maior quanto menor for o comprimento de onda utilizado. O momento da partícula, por

-

^{*15} Esta passagem gera estranhamento, pois na p. 55 Bohr deixou claro que as leis de conservação associadas a um fóton se opõem à asserção da causalidade (1º tipo de complementaridade). Numa colisão entre duas partículas, como no efeito Compton, é a conservação de momento e energia que permite prever as correlações entre as posições finais das partículas. Mas *entre* a preparação inicial e a medição final, a causalidade (unitariedade) é satisfeita, não havendo coordenação espaço-temporal (posteriormente, com a noção de "fenômeno", tal análise deixaria de fazer sentido). Por outro lado, no âmbito do 3º tipo de complementaridade, como os momentos e energias antes e depois da colisão são bem definidos, isso implica em que a posição e o instante da colisão não o são (ou seja, não há coordenação espaço-temporal, mas num sentido diferente do anterior, ligado ao 3º tipo de complementaridade, e não ao 1º tipo).

63

outro lado, pode ser determinado com qualquer grau de acurácia medindo-se, por exemplo, o efeito Doppler da radiação espalhada, desde que o comprimento de onda da radiação seja tão grande que o efeito de recuo possa ser desprezado, mas neste caso a determinação das coordenadas espaciais da partícula torna-se analogamente menos acurada.

A essência dessa consideração é a inevitabilidade do postulado quântico na estimativa das possibilidades da medição. Uma investigação mais detalhada das possibilidades de definição pareceria ainda ser necessária para ressaltar o caráter complementar geral da descrição. De fato, uma variação descontínua de energia e de momento durante a observação não poderia nos impedir de atribuir valores acurados tanto para as coordenadas de espaço-tempo como para os componentes de energia-momento antes e depois do processo*16. A incerteza recíproca que sempre afeta os valores dessas quantidades é, como ficará claro a partir da análise precedente, essencialmente um resultado da acurácia limitada com a qual variações em energia e em momento podem ser definidas, quando os campos ondulatórios usados para a determinação das coordenadas de espaço-tempo da partícula são suficientemente pequenos.

Ao usar um instrumento óptico para determinações de posição, é necessário lembrar que a formação da imagem sempre requer um feixe de luz convergente. Denotando por λ o comprimento de onda da radiação utilizada, e por ε a chamada abertura numérica, isto é, o seno de metade do ângulo de convergência, o poder de resolução de um microscópio é dado pela bem conhecida expressão $\lambda/2\varepsilon$. Mesmo que o objeto seja iluminado por luz paralela, de forma que o momento h/λ do quantum de luz incidente seja conhecido tanto em relação à magnitude como direção, o valor finito da abertura impediria um conhecimento exato do recuo acompanhando o espalhamento. Ademais, mesmo que o momento da partícula fosse conhecido acuradamente antes do processo de espalhamento,

^{*16} Em outras palavras, o postulado quântico (de que trocas de energia se dão em pacotes descontínuos) por si só não basta para se deduzir o princípio de incerteza. Há algo mais envolvido, ligado à noção de complementaridade. Ilustra-se abaixo o experimento-de-pensamento do microscópio de raios γ, concebido por Heisenberg, e cuja análise Bohr aperfeiçoou.

nosso conhecimento do componente de momento paralelo ao plano focal após a observação seria afetado por uma incerteza equivalente a $2\varepsilon h/\lambda$. O produto das menores inexatidões com as quais a coordenada posicional e o componente de momento em uma direção precisa podem ser determinados é portanto dado justamente pela fórmula (2). Pode-se talvez esperar que ao estimar a acurácia da determinação de posição, não apenas a convergência mas também o comprimento do trem de onda*17 precisa ser levado em conta, já que a partícula poderia mudar de lugar durante o tempo finito de iluminação. Devido ao fato, porém, que o conhecimento exato do comprimento de onda é irrelevante para a estimativa dada acima, perceber-se-á que, para qualquer valor da abertura, pode-se sempre tomar um trem de onda suficientemente curto que uma variação da posição da partícula durante o tempo de observação pode ser desprezada, comparada com a falta de exatidão inerente na determinação de posição devida ao poder de resolução finito do microscópio.

Ao medir o momento com a ajuda do efeito Doppler - com a devida consideração pelo efeito Compton - emprega-se um trem de onda paralelo. Contudo, a extensão do trem de onda na direção de propagação é essencial para a acurácia com que a variação do comprimento de onda da radiação espalhada pode ser medida. Se supormos que as direções*18 da radiação incidente e espalhada são paralela e oposta respectivamente à direção da coordenada de posição e ao componente do momento a serem medidos, então $c\lambda/2\ell$ pode ser considerado como uma medida da acurácia na determinação da velocidade, onde ℓ denota o comprimento do trem de onda. Para simplificar, consideramos a velocidade da luz como alta comparada com a velocidade da partícula. Se m representa a massa da partícula, então a incerteza associada ao valor do momento após a observação é $cm\lambda/2\ell$. Neste caso, a magnitude do recuo, $2h/\lambda$, é suficientemente bem definida para não dar origem a uma incerteza apreciável no valor do momento da partícula após a observação. De fato, a teoria geral do efeito Compton nos permite calcular os componentes de momento na direção da radiação antes e depois do recuo, a partir dos comprimentos de onda das radiações incidente e espalhada. Mesmo que as coordenadas posicionais da partícula fossem conhecidas com acurácia no início, nosso conhecimento da posição após a observação seria contudo afetado por uma incerteza. De fato, devido à impossibilidade de se atribuir um instante preciso para o recuo, conhecemos a velocidade média na direção da observação durante o processo de espalhamento somente com uma acurácia $2h/m\lambda$. A incerteza na posição após a observação é portanto $2h\ell/mc\lambda$. Aqui, também, o produto das

_

^{*17} Ou seja, o tamanho do pulso, ℓ . Na sentença seguinte, Bohr afirma que a indeterminação $\Delta\lambda$ não afeta o valor de Δx , apesar do valor médio de λ afetá-lo.

^{*18} O termo "direção" aqui é usado em sua acepção inglesa, que engloba tanto a direção quanto o sentido de uma reta orientada. "Direções paralelas" significa assim a mesma direção e sentido, enquanto "direções opostas" significa a mesma direção mas sentidos opostos.

inexatidões na medição de posição e momento é assim dado pela fórmula geral (2).

Exatamente como no caso da determinação de posição, o tempo do processo de observação para a determinação do momento pode ser feito tão curto quanto se queira, se ao menos o comprimento de onda da radiação utilizada for suficientemente pequeno. O fato de o recuo se tornar então maior não afeta, como vimos, a acurácia da medição. Deve-se mencionar, além disso, que ao referir-nos à velocidade da partícula, como temos feito aqui repetidamente, o propósito tem sido apenas o de obter uma conexão com a descrição espaço-temporal ordinária, conveniente neste caso. Como já aparece a partir das considerações de de Broglie mencionadas acima, o conceito de velocidade deve sempre ser usado com cuidado na teoria quântica. Ver-se-á também que uma definição sem ambigüidades deste conceito está excluída pelo postulado quântico. Isto deve ser lembrado particularmente ao se comparar os resultados de observações sucessivas. De fato, a posição de um indivíduo em dois instantes definidos pode ser medido com qualquer grau de acurácia; mas se, a partir destas medições, calculássemos a velocidade do indivíduo da maneira ordinária, tem que se perceber claramente que estamos lidando com uma abstração, a partir da qual nenhuma informação sem ambigüidades concernente ao comportamento prévio ou futuro do indivíduo pode ser obtida*19.

De acordo com as considerações acima, concernentes às possibilidades de definição das propriedades de indivíduos, não fará obviamente nenhuma diferença na discussão da acurácia de medições de posição e momento de uma partícula se colisões com outras partículas materiais forem consideradas, ao invés de espalhamento de radiação. Em ambos os casos, vemos que a incerteza em questão afeta igualmente a descrição dos agentes da medição e do objeto. De fato, esta incerteza não pode ser evitada em uma descrição do comportamento de indivíduos com respeito a um sistema de coordenadas fixado da maneira ordinária por meio de corpos sólidos e relógios imperturbáveis. Vê-se que os dispositivos experimentais — orifícios que se abrem e fecham, etc. — permitem apenas conclusões concernentes à extensão espaço-temporal dos campos ondulatórios associados.

Ao remontar as observações às nossas sensações, mais uma vez tem que se levar em conta o postulado quântico com relação à percepção do agente da observação, seja através de sua ação direta no olho, ou por meio de auxiliares adequados como chapas fotográficas, [câmara de] nuvens de Wilson, etc. Vê-se facilmente, contudo, que o elemento estatístico adicional resultante não influenciará a incerteza na descrição do objeto. Pode-se até conjeturar que a arbitrariedade sobre o que é considerado objeto e o que é considerado agente da observação abriria uma possibilidade de se evitar completamente essa incerteza. Com relação à medição da

66

^{*19} Bohr refere-se aqui ao que é chamado de "retrodição", questão também explorada por Heisenberg em 1930. A aceitação da retrodição tem como conseqüência que o princípio de incerteza não se aplica para instantes do passado. É curioso que, apesar do desprezo que Bohr demonstra por esta hipótese, ela acabaria estando implícita posteriormente em sua definição de "fenômeno corpuscular".

posição de uma partícula, poder-se-ia perguntar, por exemplo, se o momento transmitido pelo espalhamento não poderia ser determinado por meio do teorema da conservação a partir de uma medição da variação de momento do microscópio – incluindo a fonte de luz e a chapa fotográfica – durante o processo de observação. Uma investigação mais detalhada mostra, contudo, que tal medição é impossível, se ao mesmo tempo se quiser conhecer a posição do microscópio com acurácia suficiente. De fato, segue-se das experiências que encontram expressão na teoria ondulatória da matéria que a posição do centro de gravidade de um corpo e seu momento total só podem ser definidos dentro dos limites de acurácia recíproca dados pela relação (2).

Em termos rigorosos, a idéia de observação pertence ao modo de descrição espaço-temporal causal. Devido ao caráter geral da relação (2), contudo, essa idéia pode ser utilizada consistentemente também na teoria quântica, se ao menos a incerteza expressa através desta relação for levada em conta. Conforme notado por Heisenberg, pode-se até obter uma ilustração instrutiva da descrição quântica de fenômenos atômicos (microscópicos) comparando esta incerteza com a incerteza, devida a medições imperfeitas, contida inerentemente em qualquer observação considerada na descrição ordinária de fenômenos naturais. Ele nota naquela ocasião que mesmo no caso de fenômenos macroscópicos podemos dizer, em um certo sentido, que eles são criados por observações repetidas *20. Não se deve esquecer, contudo, que em teorias clássicas qualquer observação subseqüente permite uma previsão de eventos futuros com acurácia cada vez maior, pois ela melhora nosso conhecimento do estado inicial do sistema. De acordo com a teoria quântica, justamente a impossibilidade de se desprezar a interação com o agente da medição significa que toda observação introduz um novo elemento incontrolável. De fato, segue-se das considerações acima que a medição das coordenadas posicionais de uma partícula é acompanhada não apenas por uma alteração finita nas variáveis dinâmicas, mas também a fixação de sua posição significa uma completa ruptura na descrição causal de seu comportamento dinâmico, enquanto que a determinação de seu momento sempre implica uma lacuna no conhecimento de sua propagação espacial. Justamente esta situação ressalta de forma extremamente notável o caráter complementar da descrição de fenômenos atômicos que surge como uma conseqüência inevitável do contraste entre o postulado quântico e a distinção entre objeto e agente da medição, inerente em nossa idéia mesma de observação.

_

^{*20} O historiador Max Jammer caracteriza a concepção de Bohr que vai até 1935 como "interacionalista", ao passo que após o artigo de Einstein, Podolsky & Rosen, sua concepção passaria a ser "relacionista", enfatizando a totalidade do fenômeno. Segundo a visão interacionalista, os objetos quânticos (enquanto tais) seriam criados durante a interação que ocorre na observação (uma posição idealista). A frase do texto se enquadra nesta visão, ao falar de "fenômenos que são criados por observações".

69 4. Princípio da Correspondência e Teoria das Matrizes

Consideramos até agora apenas certos aspectos gerais do problema quântico. Esta situação implica, contudo, em que a ênfase principal deve ser dada à formulação das leis que regem a interação entre os objetos que simbolizamos através das abstrações de partículas e radiação isoladas. Pontos de ataque para esta formulação consistem em primeiro lugar no problema da constituição atômica. Como é bem sabido, tem sido possível aqui, por meio de um uso elementar dos conceitos clássicos e em harmonia com o postulado quântico, esclarecer aspectos essenciais da experiência. Por exemplo, os experimentos concernentes à excitação do espectro por impactos eletrônicos e por radiação são adequadamente explicados através da suposição de estados estacionários discretos e de processos de transição individuais. Isso se deve principalmente à circunstância de que nessas questões não se requer uma descrição mais detalhada do comportamento espaço-temporal dos processos.

Aqui o contraste com o modo ordinário de descrição aparece de forma notável na circunstância de que as linhas espectrais, que na visão clássica seriam atribuídas ao mesmo estado do átomo, corresponderão, segundo o postulado quântico, a processos de transição separados, entre os quais o átomo excitado tem uma escolha. Apesar deste contraste, contudo, uma conexão formal com as idéias clássicas poderia ser obtida no limite onde a diferença relativa nas propriedades de estados estacionários vizinhos tende assintoticamente para zero e onde, em aplicações estatísticas, as descontinuidades podem ser desconsideradas. Através desta conexão foi possível, em grande medida, interpretar as regularidades dos espectros com base em nossas idéias sobre a estrutura do átomo.

O intuito de considerar a teoria quântica como uma generalização racional das teorias clássicas levou à formulação do chamado princípio da correspondência. A utilização deste princípio para a interpretação dos resultados espectroscópicos era baseada em uma aplicação simbólica da eletrodinâmica clássica, na qual cada processo de transição individual era associado a um harmônico no movimento das partículas atômicas, esperado segundo a mecânica ordinária. Exceto no limite mencionado, onde a diferença relativa entre estados estacionários adjacentes pode ser desprezada, só em certos casos uma aplicação tão fragmentária das teorias clássicas poderia levar a uma descrição estritamente quantitativa do fenômeno. Deve-se mencionar aqui especialmente a conexão desenvolvida por Ladenburg e Kramers entre o tratamento clássico da dispersão e as leis estatísticas formuladas por Einstein que regem os processos de transição radiativa. Apesar de ter sido justamente o tratamento de Kramers da dispersão que forneceu sugestões importantes para o desenvolvimento racional de considerações sobre a correspondência, foi somente através dos métodos quânticos criados nos últimos anos que os intuitos gerais expressos no princípio mencionado obtiveram uma formulação

adequada.

Como se sabe, o novo desenvolvimento foi iniciado em um artigo fundamental de Heisenberg, onde ele conseguiu se emancipar completamente do conceito clássico de movimento, substituindo desde o início as quantidades cinemáticas e mecânicas ordinárias por símbolos que se referem diretamente aos processos individuais exigidos pelo postulado quântico. Isto foi realizado substituindo o desenvolvimento de Fourier de uma quantidade mecânica clássica por um esquema de matriz, cujos elementos simbolizam vibrações puramente harmônicas e estão associados às possíveis transições entre estados estacionários. Ao exigir que as freqüências atribuídas aos elementos precisam sempre obedecer ao princípio de combinação para linhas espectrais, Heisenberg pôde introduzir regras simples de cálculo para os símbolos que permitem uma transcrição quântica direta das equações fundamentais da mecânica clássica. Este engenhoso ataque ao problema dinâmico da teoria atômica mostrou-se desde o início um método extremamente poderoso e fértil para interpretar quantitativamente os resultados experimentais. Através do trabalho de Born e Jordan, assim como de Dirac, deu-se à teoria uma formulação que pode competir com a mecânica clássica com respeito à generalidade e à consistência. De modo especial, o elemento característico da teoria quântica, a constante de Planck, aparece explicitamente apenas nos algoritmos aos quais os símbolos, as chamadas matrizes, estão sujeitos. De fato, as matrizes, que representam variáveis canonicamente conjugadas no sentido das equações hamiltonianas, não obedecem à lei de multiplicação comutativa, mas duas tais quantidades, q e p, têm que satisfazer à regra da troca^{*21}

$$pq - qp = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi} {.} {3}$$

71

De fato, esta relação de troca exprime de forma notável o caráter simbólico da formulação matricial da teoria quântica. A teoria das matrizes tem sido freqüentemente chamada de cálculo com quantidades diretamente observáveis. Deve-se lembrar, contudo, que o procedimento descrito é limitado somente àqueles problemas nos quais, ao se aplicar o postulado quântico, a descrição espaçotemporal pode ser em larga medida desconsiderada, e portanto a questão da observação em sentido restrito colocada em segundo plano.

Ao investigar mais a correspondência entre as leis quânticas e a mecânica clássica, a ênfase dada ao caráter estatístico da descrição quântica, que é introduzido pelo postulado quântico, tem sido de fundamental importância. Aqui a generalização do método simbólico efetuada por Dirac e Jordan representou um grande progresso, ao tornar possível a operação com matrizes, que não são ordenadas de acordo com os estados estacionários, mas nas quais os valores

^{*21} Regra de comutação.

possíveis de qualquer conjunto de variáveis podem aparecer como índices dos elementos de matriz. Em analogia com a interpretação considerada na forma original da teoria dos "elementos diagonais", ligados apenas a um único estado estacionário enquanto médias temporais da quantidade a ser representada, a teoria geral da transformação de matrizes permite a representação de tais médias de uma quantidade mecânica, em cujo cálculo qualquer conjunto de variáveis caracterizando o "estado" do sistema tem valores definidos, enquanto que as variáveis canonicamente conjugadas podem assumir todos os valores possíveis. Com base no procedimento desenvolvido por esses autores e em relação estreita com idéias de Born e Pauli, Heisenberg, em um artigo já mencionado acima, tentou uma análise mais detalhada do conteúdo físico da teoria quântica, especialmente tendo em vista o caráter aparentemente paradoxal da relação de troca (3). Neste contexto, ele formulou a relação

$$\Delta q \, \Delta p \sim h \tag{4}$$

como a expressão geral para a acurácia máxima com a qual duas variáveis canonicamente conjugadas podem ser observadas simultaneamente. Dessa maneira Heisenberg pôde elucidar muitos paradoxos que surgem na aplicação do postulado quântico, e em larga medida demonstrar a consistência do método simbólico. Com relação à natureza complementar da descrição quântica, precisamos, conforme já mencionado, constantemente lembrar das possibilidades de definição assim como das de observação. Justamente para a discussão desta questão, o método de mecânica ondulatória desenvolvido por Schrödinger mostrou-se, como veremos, de grande auxílio. Ele permite uma aplicação geral do princípio de superposição também ao problema da interação, oferecendo assim uma conexão imediata com as considerações acima concernentes à radiação e às partículas livres. A seguir retornaremos à relação entre a mecânica ondulatória e a formulação geral das leis mecânicas por meio da teoria da transformação de matrizes.

5. Mecânica Ondulatória e o Postulado Quântico

Já em suas primeiras considerações concernentes à teoria ondulatória das partículas materiais, de Broglie salientou que os estados estacionários de um átomo poderiam ser visualizados como um efeito de interferência da onda de fase associada ao elétron ligado. É verdade que inicialmente este ponto de vista não levou, no que se refere a resultados quantitativos, a nada além dos métodos anteriores da teoria quântica, o desenvolvimento dos quais Sommerfeld contribuiu de maneira tão essencial. Schrödinger, contudo, conseguiu desenvolver um método teórico ondulatório que revelou novos aspectos, e que mostrou-se de importância decisiva para o grande progresso em física atômica nos últimos anos. De fato,

73

constatou-se que as vibrações próprias da equação de onda de Schrödinger fornecem uma representação dos estados estacionários de um átomo que satisfaz a todos os requisitos. A energia de cada estado está relacionada ao correspondente período de vibração segundo a relação quântica geral (1). Além disso, o número de nós nas várias vibrações características fornece uma interpretação simples do conceito de número quântico, que já era conhecido nos métodos anteriores, mas que inicialmente não parecia surgir na formulação matricial. Além disso, Schrödinger pôde associar às soluções da equação de onda uma distribuição contínua de carga e de corrente que, se aplicada a uma vibração característica, representa as propriedades eletrostáticas e magnéticas de um átomo no estado estacionário correspondente. De maneira semelhante, a superposição de duas soluções características corresponde a uma distribuição de carga elétrica contínua e oscilante, que na eletrodinâmica clássica daria origem a uma emissão de radiação, ilustrando de maneira instrutiva as consequências do postulado quântico e a exigência de correspondência concernente ao processo de transição entre dois estados estacionários formulado na mecânica matricial. Uma outra aplicação do método de Schrödinger, importante no desenvolvimento posterior, foi feita por Born em sua investigação do problema das colisões entre átomos e partículas elétricas livres. Neste contexto, ele conseguiu obter uma interpretação estatística das funções de onda, permitindo um cálculo da probabilidade dos processos de transição individual exigida pelo postulado quântico. Isso inclui uma formulação mecano-ondulatória do princípio adiabático de Ehrenfest, cuja fertilidade surge de forma notável nas promissoras investigações de Hund sobre o problema da formação de moléculas.

Em vista desses resultados, Schrödinger manifestou a esperança de que o desenvolvimento da mecânica ondulatória irá eventualmente remover o elemento irracional expresso pelo postulado quântico e abrir caminho para uma descrição completa dos fenômenos atômicos no sentido das teorias clássicas. Em apoio desta concepção, Schrödinger, em um recente artigo, enfatiza o fato de que a troca descontínua de energia entre átomos requerido pelo postulado quântico, do ponto de vista da teoria ondulatória, é substituída por um fenômeno simples de ressonância. Particularmente, a idéia de estados estacionários individuais seria uma ilusão e sua aplicabilidade apenas uma ilustração da ressonância mencionada. Não se deve esquecer, contudo, que justamente no problema da ressonância mencionado estamos considerando um sistema fechado, o qual, de acordo com a concepção aqui apresentada, não é acessível à observação. De fato, segundo esta concepção, a mecânica ondulatória, assim como a teoria das matrizes, representa uma transcrição simbólica do problema do movimento da mecânica clássica adaptada às exigências da teoria quântica, só devendo ser interpretada através de um uso explícito do postulado quântico. De fato, as duas formulações do problema da interação podem ser ditas complementares no mesmo sentido da idéia de onda e partícula na descrição dos indivíduos livres. O aparente contraste na utilização do

76

77

conceito de energia nas duas teorias está justamente relacionado a essa diferença no ponto de partida.

As dificuldades fundamentais enfrentadas por uma descrição espaçotemporal de um sistema de partículas em interação surgem de imediato da inevitabilidade do princípio da superposição na descrição do comportamento de partículas individuais. Já para uma partícula livre o conhecimento da energia e do momento exclui, conforme vimos, o conhecimento exato de suas coordenadas de espaço-tempo. Isto implica em que está excluída uma utilização imediata do conceito de energia que tenha ligação com a idéia clássica de energia potencial do sistema. Na equação de onda de Schrödinger, essas dificuldades são evitadas através da substituição da expressão clássica do hamiltoniano por um operador diferencial, por meio da relação

$$p = \sqrt{-1} \frac{h}{2\pi} \frac{\partial}{\partial q} , \qquad (5)$$

onde p denota uma componente generalizada do momento e q a variável canonicamente conjugada. Aqui, considera-se que o valor negativo da energia é conjugado ao tempo. Até aqui, na equação de onda, tanto tempo e espaço como energia e momento são utilizados de uma maneira puramente formal.

O caráter simbólico do método de Schrödinger não surge apenas da circunstância de que sua simplicidade, semelhantemente à da teoria das matrizes, depende de maneira essencial do uso de quantidades aritméticas imaginárias. Mas sobretudo, não se pode falar em uma conexão imediata com nossas concepções ordinárias porque o problema "geométrico" representado pela equação de onda está associado ao chamado espaço de coordenadas *22, cujo número de dimensões é igual ao número de graus de liberdade do sistema, e portanto, em geral, é maior do que o número de dimensões do espaço ordinário. Além disso, a formulação de Schrödinger do problema da interação, assim como a formulação oferecida pela teoria das matrizes, envolve um desprezo da velocidade finita de propagação das forças, requerida pela teoria da relatividade.

De um modo geral, mal pareceria justificável, no caso do problema da interação, exigir uma visualização por meio de representações espaço-temporais. De fato, todo nosso conhecimento concernente às propriedades internas dos átomos é derivada de experimentos sobre suas reações de radiação ou colisão, de tal modo que a interpretação de fatos experimentais depende em última análise das abstrações de radiação no vácuo e partículas materiais livres. Portanto, toda nossa concepção espaço-temporal de fenômenos físicos, assim como a definição de energia e momento, depende em última análise destas abstrações. Ao avaliarmos as aplicações destas idéias auxiliares, devemos exigir apenas consistência interna,

^{*22} Espaço de configuração.

em relação à qual consideração especial deve ser dispensada às possibilidades de definição e observação.

Temos, nas vibrações características da equação de onda de Schrödinger, conforme mencionado, uma representação adequada dos estados estacionários de um átomo, permitindo uma definição sem ambigüidades da energia do sistema por meio da relação quântica geral (1). Isso acarreta, contudo, que na interpretação de observações uma renúncia fundamental concernente à descrição espaço-temporal é inevitável. De fato, a aplicação consistente do conceito de estados estacionários exclui, como veremos, qualquer especificação concernente ao comportamento das partículas separadas no átomo. Em problemas nos quais uma descrição deste comportamento é essencial, estamos restringidos a usar a solução geral da equação de onda que é obtida através da superposição de soluções características. Encontramos aqui uma complementaridade das possibilidades de definição bastante análoga àquela que consideramos anteriormente com relação às propriedades da luz e das partículas materiais livres. Assim, enquanto a definição de energia e momento de indivíduos está associada à idéia de uma onda elementar harmônica, todo aspecto espaco-temporal da descrição do fenômeno está baseada, conforme vimos, em uma consideração das interferências ocorrendo dentro de um grupo de tais partículas elementares. Também neste caso, a concordância entre as possibilidades de observação e as de definição podem ser diretamente mostradas.

De acordo com o postulado quântico, qualquer observação concernente ao comportamento do elétron no átomo será acompanhada por uma alteração no estado do átomo. Conforme salientado por Heisenberg, esta alteração em geral consistirá, no caso de átomos em estados estacionários de número quântico baixo, na ejeção do elétron do átomo. Uma descrição da "órbita" do elétron no átomo, com a ajuda de observações subseqüentes, é portanto impossível em tal caso. Isso está ligado à circunstância de que a partir de vibrações características com apenas poucos nós não se pode construir nenhum pacote de onda que represente mesmo aproximadamente o "movimento" de uma partícula. A natureza complementar da descrição, porém, surge particularmente da situação de que o uso de observações concernentes ao comportamento das partículas no átomo repousa na possibilidade de desprezar, durante o processo de observação, a interação entre as partículas, considerando-as assim livres. Isto requer, contudo, que a duração do processo seja curta comparada com os períodos naturais do átomo, o que novamente significa que a incerteza no conhecimento da energia transferida no processo é grande comparada com as diferenças de energia entre estados estacionários vizinhos.

Ao avaliar as possibilidades de observação, não se pode esquecer de um modo geral que as soluções da mecânica ondulatória só podem ser visualizadas à medida que elas possam ser descritas com o auxílio do conceito de partículas livres. Aqui a diferença entre a mecânica clássica e o tratamento quântico do problema da interação aparece de forma extremamente notável. No primeiro, tal restrição é desnecessária porque as "partículas" estão aqui dotadas de uma

78

"realidade" imediata, independentemente de estarem livres ou ligadas. Esta situação é particularmente importante com relação à utilização consistente da densidade elétrica de Schrödinger enquanto uma medida da probabilidade dos elétrons estarem presentes dentro de regiões espaciais definidas do átomo. Lembrando a restrição mencionada, vê-se que esta interpretação é uma conseqüência simples da suposição de que a probabilidade da presença de um elétron livre é expressa pela densidade elétrica associada ao campo ondulatório, de maneira semelhante à qual a probabilidade da presença de um quantum de luz é dada pela densidade de energia da radiação.

Conforme já mencionado, os meios para uma utilização consistente geral dos conceitos clássicos na teoria quântica foram criados através da teoria da transformação de Dirac e Jordan, com o auxílio do qual Heisenberg formulou sua relação geral de incerteza (4). Nessa teoria também a equação de onda de Schrödinger obteve uma aplicação instrutiva. De fato, as soluções características desta equação surgem como funções auxiliares que definem uma transformação de matrizes com índices representando os valores de energia do sistema para outras matrizes, cujos índices são os valores possíveis das coordenadas de espaço. É também interessante mencionar, neste contexto, que Jordan e Klein chegaram recentemente à formulação do problema da interação expresso pela equação de onda de Schrödinger, tomando como ponto de partida a representação ondulatória de partículas individuais e aplicando um método simbólico intimamente relacionado ao tratamento penetrante do problema da radiação desenvolvido por Dirac a partir do ponto de vista da teoria das matrizes, ao qual retornaremos a seguir.

6. A Realidade de Estados Estacionários

Na noção de estados estacionários estamos interessados, conforme mencionado, em uma aplicação característica do postulado quântico. Por sua própria natureza, esta noção significa uma renúncia completa com respeito a uma descrição temporal. Do ponto de vista adotado aqui, justamente esta renúncia forma a condição necessária para uma definição sem ambigüidades da energia do átomo. Ademais, a noção de um estado estacionário envolve, em termos rigorosos, a exclusão de todas as interações com indivíduos não pertencentes ao sistema. O fato de que tal sistema fechado está associado a um valor particular de energia pode ser considerado uma expressão imediata da asserção da causalidade contida no teorema de conservação de energia. Esta circunstância justifica a suposição da estabilidade supra-mecânica dos estados estacionários, segundo a qual o átomo, tanto antes como depois de uma influência externa, sempre será encontrado em um estado bem definido, e que forma a base para o uso do postulado quântico em problemas concernentes à estrutura atômica.

80

Em uma avaliação dos bem conhecidos paradoxos que essa suposição acarreta para a descrição das reações de colisão e radiação, é essencial considerar as limitações das possibilidades de definição dos indivíduos livres em reação, que é expressa pela relação (2). De fato, se a definição da energia dos indivíduos em reação tiver um tal grau de acurácia que nos autorize a falar em conservação de energia durante a reação, então é necessário, segundo esta relação, coordenar à reação um intervalo de tempo longo comparado com o período de vibração associado ao processo de transição, e ligado à diferença de energia entre os estados estacionários segundo a relação (1). Isso deve ser lembrado particularmente ao considerar-se a passagem de partículas que se movem rapidamente através de um átomo. Segundo a cinemática ordinária, a duração efetiva de tal passagem seria muito pequena comparada com os períodos naturais do átomo, e parecia impossível reconciliar o princípio de conservação de energia com a suposição da estabilidade dos estados estacionários. Na representação ondulatória, contudo, o tempo de reação está imediatamente relacionado à acurácia do conhecimento da energia das partículas em colisão, e portanto não pode nunca haver a possibilidade de uma contradição com a lei de conservação. Com relação à discussão dos paradoxos do tipo mencionado, Campbell propôs o ponto de vista de que o próprio conceito de tempo possa ser de natureza essencialmente estatística. Do ponto de vista apresentado aqui, segundo o qual o fundamento da descrição espaço-temporal é oferecido pela abstração de indivíduos livres, uma distinção fundamental entre tempo e espaço pareceria, contudo, ser excluída pela exigência de relatividade. A posição singular do tempo em problemas concernentes a estados estacionários é devido, conforme vimos, à natureza especial de tais problemas.

A aplicação do conceito de estados estacionários exige que em qualquer observação, por exemplo por meio de reações de colisão ou de radiação, que permita uma distinção entre diferentes estados estacionários, estejamos autorizados a desconsiderar a história prévia do átomo. O fato de os métodos simbólicos da teoria quântica atribuirem uma fase particular para cada estado estacionário, cujo valor depende da história prévia do átomo, pareceria por um instante contradizer a própria idéia de estados estacionários. Assim que estejamos realmente interessados no problema do tempo, contudo, a consideração de um sistema estritamente fechado está excluída. O uso de vibrações próprias simplesmente harmônicas na interpretação das observações significa, portanto, apenas uma idealização adequada que em uma discussão mais rigorosa precisa sempre ser substituída por um grupo de vibrações harmônicas, distribuídas por um intervalo finito de frequências. Agora, conforme já mencionado, é uma consequência geral do princípio de superposição que não tem sentido coordenar um valor de fase ao grupo como um todo, da mesma maneira que pode ser feita para cada onda elementar constituindo o grupo.

Essa não observabilidade da fase, bem conhecida da teoria dos instrumentos ópticos, é ressaltada de maneira particularmente simples em uma

82

discussão do experimento de Stern-Gerlach, tão importante para a investigação das propriedades de átomos individuais. Conforme salientado por Heisenberg, átomos em diferentes orientações no campo só podem ser separados se o desvio do feixe for maior que a difração na fenda das ondas de de Broglie representando o movimento translacional dos átomos. Esta condição significa, como mostra um cálculo simples, que o produto do tempo de passagem do átomo através do campo, e da incerteza da energia no campo, devida à largura finita do feixe, é pelo menos igual ao quantum de ação. Este resultado foi considerado por Heisenberg como um elemento de apoio à relação (2) com respeito às incertezas recíprocas dos valores de energia e de tempo. Pareceria, contudo, que aqui não estamos simplesmente lidando com uma medição da energia do átomo em um dado tempo. Mas como o período das vibrações próprias do átomo no campo está relacionado à energia total através da relação (1), percebemos que a condição de separabilidade mencionada significa apenas a perda da fase. Essa circunstância remove também as contradições aparentes, que surgem em certos problemas concernentes à coerência da radiação de ressonância, que têm sido discutidas freqüentemente, e que foram também consideradas por Heisenberg.

Considerar um átomo como um sistema fechado, conforme fizemos acima, significa desprezar a emissão espontânea de radiação que mesmo na ausência de influências externas põe um limite superior à vida-média dos estados estacionários. O fato de que este desprezo é justificado em muitas aplicações está relacionado à circunstância de que o acoplamento entre o átomo e o campo de radiação, que é esperado na eletrodinâmica clássica, é em geral muito pequeno comparado ao acoplamento entre as partículas no átomo. De fato, é possível em uma descrição do estado de um átomo desprezar em grande medida a reação da radiação, desconsiderando assim a falta de exatidão nos valores de energia relacionados à vida-média dos estados estacionários, de acordo com a relação (2). Essa é a razão de porque é possível tirar conclusões concernentes às propriedades de radiação usando a eletrodinâmica clássica.

O tratamento do problema da radiação pelos novos métodos quânticos significou, de início, apenas uma formulação quantitativa dessa consideração de correspondência. Este foi o próprio ponto de partida das considerações originais de Heisenberg. Pode-se também mencionar que uma análise instrutiva do tratamento de Schrödinger para o fenômeno da radiação a partir do ponto de vista do princípio de correspondência foi recentemente dado por Klein. Em uma forma mais rigorosa da teoria desenvolvida por Dirac, o próprio campo de radiação é incluído no sistema fechado sendo considerado. Tornou-se assim possível levar em conta, de maneira racional, o caráter individual da radiação, exigido pela teoria quântica, e construir uma teoria da dispersão na qual a largura finita das linhas espectrais é levada em consideração. A renúncia concernente a representações espaço-temporais que caracterizam este tratamento pareceria oferecer uma indicação notável do caráter complementar da teoria quântica. Devemos ter isto em mente

particularmente ao avaliar o afastamento radical em relação à descrição causal da Natureza encontrado em fenômenos de radiação, ao qual nos referimos acima com relação à excitação de espectros.

Em vista da conexão assintótica de propriedades atômicas com a eletrodinâmica clássica, exigida pelo princípio da correspondência, a exclusão recíproca do conceito de estados estacionários e a descrição do comportamento de partículas individuais no átomo pode ser considerada uma dificuldade. De fato, a conexão em questão significa que no limite de grandes números quânticos, onde a diferença relativa entre estados estacionários adjacentes tende a zero assintoticamente, representações mecânicas do movimento eletrônico podem ser utilizadas racionalmente. É preciso enfatizar, contudo, que esta conexão não pode ser considerada como uma transição gradual para uma teoria clássica, no sentido de que o postulado quântico perderia sua importância para números quânticos grandes. Pelo contrário, as conclusões obtidas do princípio da correspondência com o auxílio de representações clássicas dependem justamente das suposições de que os conceitos de estados estacionários e de processos de transição individuais são mantidas mesmo neste limite.

Essa questão oferece um exemplo particularmente instrutivo para a aplicação dos novos métodos. Conforme mostrado por Schrödinger, é possível, no limite mencionado, pela superposição de vibrações próprias, construir grupos de onda pequenos comparados ao "tamanho" do átomo, e cuja propagação se aproxima indefinidamente da representação clássica de uma partícula material em movimento, se os números quânticos forem escolhidos suficientemente grandes*23. No caso especial de um vibrador harmônico simples, ele conseguiu mostrar que tais grupos de onda se manterão unidos mesmo para qualquer extensão de tempo, e oscilarão de um lado para o outro de uma maneira que corresponde à representação clássica do movimento. Esta circunstância foi considerada por Schrödinger como um elemento de apoio a sua esperança de construir uma teoria ondulatória pura, sem referência ao postulado quântico. Conforme enfatizado por Heisenberg, a simplicidade do caso do oscilador é contudo excepcional e intimamente relacionada à natureza harmônica do correspondente movimento clássico. Também não há neste exemplo qualquer possibilidade de uma aproximação assintótica ao problema das partículas livres. Em geral, o grupo de ondas se espalhará gradativamente por toda região do átomo, e o "movimento" de um elétron ligado só pode ser acompanhado durante um número de períodos que é da ordem de grandeza dos números quânticos associados às vibrações próprias. Esta questão foi examinada mais detalhadamente em um artigo recente de Darwin, que contém vários exemplos instrutivos do comportamento dos grupos de onda. Do ponto de vista da teoria das matrizes, uma tratamento de problemas análogos foi conduzida por Kennard.

86

^{*23} São os hoje chamados "estados coerentes".

Aqui novamente encontramos o contraste entre o princípio de superposição da teoria ondulatória e a suposição da individualidade das partículas, no qual já estivemos interessados no caso das partículas livres. Ao mesmo tempo, a conexão assintótica com a teoria clássica, que desconhece uma distinção entre partículas livres e ligadas, oferece a possibilidade de uma ilustração particularmente simples das considerações precedentes concernente à utilização consistente do conceito de estados estacionários. Conforme vimos, a identificação de um estado estacionário por meio de reações de colisão ou de radiação implica uma lacuna na descrição do tempo, que é de pelo menos da ordem de grandeza dos períodos associados a transições entre estados estacionários. Agora, no limite de números quânticos grandes, estes períodos podem ser interpretados como períodos de revolução. Vemos assim imediatamente que nenhuma conexão causal pode ser obtida entre observações que levem à fixação de um estado estacionário e observações anteriores do comportamento das partículas separadas no átomo.

Em suma, poder-se-ia dizer que os conceitos de estados estacionários e processos de transição individuais, dentro de seu próprio campo de aplicação, possuem exatamente tanta ou tão pouca "realidade" quanto a própria idéia de partícula individual. Em ambos os casos estamos interessados em uma exigência de causalidade complementar à descrição espaço-temporal, cuja aplicação adequada é limitada apenas pelas possibilidades restritas de definição e de observação.

7. O Problema das Partículas Elementares

Quando a devida consideração é dispensada ao aspecto complementar requerido pelo postulado quântico, parece de fato possível, com o auxílio dos métodos simbólicos, construir uma teoria consistente dos fenômenos atômicos, que pode ser considerada uma generalização racional da descrição espaço-temporal causal da física clássica. Esta concepção não significa, contudo, que a teoria clássica do elétron possa ser considerada simplesmente como o caso limite de um quantum de ação que tende a zero. De fato, a conexão desta última teoria com a experiência está baseada em suposições que mal podem ser separadas do grupo de problemas da teoria quântica. Uma sugestão neste sentido já foi dada pelas bem conhecidas dificuldades encontradas nas tentativas de explicar a individualidade das partículas elétricas fundamentais através de princípios mecânicos e eletrodinâmicos gerais. No que diz respeito a isso, também, a teoria da gravitação da relatividade geral não tem satisfeito as expectativas. Uma solução satisfatória dos problemas mencionados pareceria ser possível somente através de uma transcrição quântica racional da teoria de campo geral, na qual o quantum fundamental de eletricidade encontraria sua posição natural enquanto expressão do aspecto de individualidade caracterizando a teoria quântica. Recentemente Klein chamou

87

atenção para a possibilidade de relacionar este problema com a representação unificada em cinco dimensões do eletromagnetismo e da gravitação, proposta por Kaluza. De fato, a conservação de eletricidade surge nesta teoria como algo análogo aos teoremas de conservação de energia e de momento. Da mesma maneira que estes conceitos são complementares à descrição espaço-temporal, a adequação da descrição ordinária em quatro dimensões assim como de sua utilização simbólica na teoria quântica pareceria, conforme enfatizado por Klein, depender essencialmente da circunstância de que nesta descrição a eletricidade sempre aparece em unidades bem definidas, sendo que a quinta dimensão conjugada não estaria conseqüentemente aberta à observação.

Bem à parte destes profundos problemas não resolvidos, a teoria clássica do elétron tem sido, até o presente momento, o guia para um desenvolvimento adicional da descrição da correspondência, com relação a idéia apresentada pela primeira vez por Compton de que as partículas elétricas fundamentais estão dotadas, além de sua massa e carga, de um momento magnético devido ao momento angular determinado pelo quantum de ação. Esta suposição, introduzida com notável sucesso por Goudsmit e Uhlenbeck na discussão da origem do efeito Zeeman anômalo, mostrou-se extremamente frutífera com relação aos novos métodos, conforme mostrado especialmente por Heisenberg e Jordan. Pode-se dizer, de fato, que a hipótese do elétron magnético, juntamente com o problema da ressonância elucidado por Heisenberg, que ocorre na descrição quântica do comportamento dos átomos com vários elétrons, levaram a interpretação da correspondência das leis espectrais e do sistema periódico até um certo grau de completamento. Os princípios que subjazem a este ataque possibilitaram até tirar conclusões concernentes às propriedades de núcleos atômicos. Assim, Dennison, com relação a idéias de Heisenberg e de Hund, conseguiu recentemente mostrar de maneira muito interessante como que a explicação do calor específico do hidrogênio, até agora cercada de dificuldades, pode ser harmonizada com a suposição de que o próton é dotado de um momento angular da mesma ordem de grandeza que o do elétron. Devido a sua maior massa, contudo, um momento magnético muito menor que o do elétron deve ser associado ao próton.

A insuficiência dos métodos desenvolvidos até agora concernentes ao problema das partículas elementares surge, nas questões que acabaram de ser mencionadas, do fato de que eles não permitem uma explicação sem ambigüidades da diferença entre o comportamento das partículas elementares elétricas e dos "indivíduos" simbolizados através do conceito de quantum de luz, expresso no chamado princípio de exclusão formulado por Pauli. De fato, encontramos neste princípio, tão importante para o problema da estrutura atômica assim como para o desenvolvimento recente das teorias estatísticas, uma dentre várias possibilidades, cada uma das quais satisfazendo à exigência da correspondência. Ademais, a dificuldade de satisfazer a exigência de relatividade na teoria quântica surge sob um ângulo particularmente notável com relação ao problema do elétron magnético.

90

De fato, parecia não ser possível fazer as promissoras tentativas de Darwin e de Pauli para generalizar os novos métodos abrangerem esse problema naturalmente, com relação à consideração cinemática relativista de Thomas, tão fundamental para a interpretação dos resultados experimentais. Bem recentemente, contudo, Dirac conseguiu atacar com sucesso o problema do elétron magnético através de uma nova extensão engenhosa dos métodos simbólicos, e assim satisfazer a exigência de relatividade sem abandonar a concordância com a evidência espectral. Neste ataque não apenas as quantidades imaginárias complexas que aparecem nos procedimentos anteriores estão envolvidas, mas suas próprias equações fundamentais contêm quantidades com um grau ainda maior de complexidade que são representadas por matrizes.

Já a formulação do argumento da relatividade implica essencialmente a da coordenação espaço-temporal e da exigência de causalidade caracterizando as teorias clássicas. Na adaptação da exigência de relatividade ao postulado quântico, devemos portanto estar preparados para encontrar uma renúncia à visualização no sentido ordinário que vá ainda além daquela na formulação das leis quânticas aqui consideradas. De fato, nos encontramos aqui no mesmo caminho tomado por Einstein de adaptar nossos modos de percepção, tomados emprestados a nossas sensações, ao conhecimento gradativamente aprofundado das leis da Natureza. Os obstáculos encontrados nesse caminho se originam sobretudo do fato de que, por assim dizer, toda palavra na linguagem se refere a nossa percepção ordinária. Na teoria quântica encontramos essa dificuldade imediatamente na questão da inevitabilidade do aspecto de irracionalidade caracterizando o postulado quântico. Espero, contudo, que a idéia de complementaridade seja adequada para caracterizar a situação, que traz uma analogia profunda com a dificuldade geral na formação de idéias humanas, inerente na distinção entre sujeito e objeto.