

## 100 Anos da “Nova” Mecânica Quântica de Heisenberg

## 100 Years of Heisenberg’s “New” Quantum Mechanics

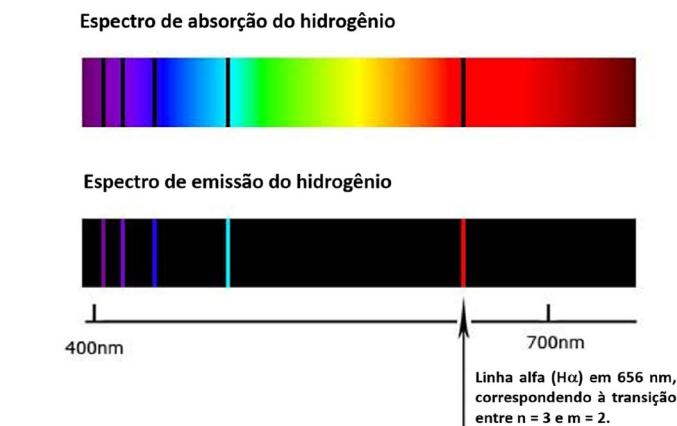
Roberto Rivelino\*<sup>a</sup>

Heisenberg's quantum mechanics, generalized by Born and Jordan, highlighted the need for a kinematic reformulation of the concepts of position and momentum of an atomic system, which should be represented by matrices instead of vectors in a three-dimensional Euclidean space. Although these new dynamical variables must satisfy equations of motion formally similar to the classical equations, they are not the objects to be directly observed in the laboratory. Contrary to common sense, these matrices provide the correct way of representing the dynamical processes of absorption and emission of electromagnetic radiation at the atomic scale in terms of quantities observed in the laboratory, such as frequencies and intensities of the electronic transitions occurring in the system. One hundred years on, the construction of the Heisenberg's “new” mechanics has generated a race to develop the operational aspects of the theory, as well as its general interpretation. Needless to say, both the interest in and the controversy over the interpretation of quantum mechanics as we know it today remain quite intense, more than a century after the development of the concept of quantization of the emitted/absorbed light by an atomic oscillator. Long live the most accurate theory currently used to describe the structure of matter.

**Keywords:** Electronic transition; Fourier transform; Rydberg-Ritz principle; observables.

## 1. Introdução

Em 29 de julho de 1925, W. Heisenberg submeteu seu artigo intitulado “Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen” para a publicação na revista *Zeitschrift für Physik*.<sup>1</sup> O título pode ser traduzido livremente do alemão como «Sobre a reinterpretação teórica quântica das relações cinemáticas e mecânicas», e é considerado o marco fundamental na história da mecânica quântica.<sup>2</sup> Segundo ideias preliminares de M. Born e P. Jordan,<sup>3</sup> Heisenberg introduziu o conceito de mecânica matricial, que lançou as bases para a mecânica quântica moderna, modificando a antiga teoria quântica de Bohr-Sommerfeld.<sup>4,5</sup> Heisenberg também considerou a interpretação de Einstein sobre a radiação de corpo negro,<sup>6</sup> que representou uma mudança drástica para a compreensão dos espectros de gases atômicos a partir do modelo de Bohr. De fato, o conceito fundamental introduzido por Einstein foi o de “probabilidade de transição por unidade de tempo” entre níveis de energia estacionários discretos. Isto representava uma ruptura com a mecânica de Newton, a qual não era fundamentada para descrever, por exemplo, os espectros de absorção/emissão de gases atômicos ou moleculares (Figura 1).



**Figura 1.** Ilustração dos espectros de absorção e emissão do hidrogênio atômico na região do espectro visível. Os comprimentos de onda associados a cada linha observada foram previstos, em 1885, pela regra empírica de Balmer

Dentre as hipóteses de Einstein,<sup>6</sup> a probabilidade de que uma das moléculas de um gás, a uma dada temperatura  $T$ , esteja em um estado de energia  $E_n$ , deve ser proporcional ao fator de Boltzmann, *i.e.*,

$$W_n = p_n e^{-E_n/kT} \quad (1)$$

mantendo-se a lei da distribuição das velocidades de Maxwell para um gás. A constante  $p_n$  na Eq. (1) é um peso estatístico característico do estado estacionário da molécula e  $k = R/N_A$  é a constante de Boltzmann (sendo  $R$  a constante universal dos gases e  $N_A$  o número de Avogadro). Dessa forma, a probabilidade para que a molécula absorva energia eletromagnética, associada a uma transição entre dois estados estacionários  $E_n$  e  $E_m$  (*cf.* Figura 1), depende do campo de radiação eletromagnética de Planck (*i.e.*, da densidade espectral de energia da radiação de corpo negro) que permeia o gás. Por outro lado, a probabilidade para que ocorra emissão espontânea de radiação depende apenas de dois estados estacionários de energia, quando  $E_m < E_n$ . Há também uma probabilidade de ocorrer uma emissão induzida ou estimulada causada pela própria densidade espectral de energia entre os estados estacionários  $E_m$  e  $E_n$  do sistema.

Enquanto a absorção e a emissão induzida possuem analogia direta com cálculos puramente clássicos, via ressonância,<sup>7</sup> a emissão espontânea da radiação é um fenômeno de natureza essencialmente quântica. Entretanto, no trabalho de Einstein,<sup>6</sup> as probabilidades de transição são tratadas como novas quantidades a se determinar, dependentes de dois estados estacionários permitidos para uma molécula ou átomo. Assim, embora sem estabelecer uma teoria quântica consistente, a abordagem de Einstein para um gás, em equilíbrio térmico com o campo eletromagnético de Planck, evidenciou claramente as vantagens que poderiam resultar de um afastamento de conceitos clássicos que mostrassem conflitos com os princípios quânticos estabelecidos até então. Os passos fundamentais para a construção de uma teoria quântica mais elaborada foram dados por Heisenberg, a partir de 1925, com base em dois pilares:<sup>8</sup> (I) a não-validade da mecânica clássica em escala atômica e (II) o princípio de correspondência de Bohr. Observa-se que (I) não se refere apenas ao conceito de estados estacionários e quantização de variáveis dinâmicas, mas a uma mudança drástica no tratamento do comportamento dinâmico dos sistemas atômicos. Por outro lado, (II) garante que a teoria quântica deve concordar no limite em que a teoria clássica fornece resultados corretos.

## 2. Os Ingredientes Clássicos da Velha Mecânica Quântica

Segundo Heisenberg, considerando um sistema mecânico-quântico tal como um átomo, por exemplo, ainda

seria possível reter as equações de movimento clássicas a fim de se estabelecer sua dinâmica. Por simplicidade, considerando um sistema com único grau de liberdade, teríamos as equações da mecânica clássica sendo válidas, *i.e.*,

$$m\dot{q}(t) = p(t), \quad \dot{p}(t) = f(q(t)), \quad f(q) = -V'(q) \quad (2)$$

sem, necessariamente, interpretar  $q(t)$  e  $p(t)$  como funções do tempo, significando posição e momento linear, respectivamente. Dessa forma, a função hamiltoniana é dada por:

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q) \quad (3)$$

O princípio da conservação da energia leva a Eq. (3), necessariamente, à seguinte forma

$$\frac{p^2(t)}{2m} + V(q(t)) = E \quad (4)$$

Considerando um potencial como o de um oscilador harmônico unidimensional, tal que

$$V(q) \rightarrow \infty \quad |q| \rightarrow \infty$$

então, tem-se, para cada solução periódica no tempo, o período dado por

$$T = \oint_{\gamma} dt = \int_{\gamma} \frac{dq}{\sqrt{\frac{2}{m}(E - V(q))}} \quad (5)$$

onde  $\gamma$  é a trajetória  $H(q, p) = E$  e  $dt = mdq/p$ . Este período será finito quando  $E$  for um valor crítico de  $V(q)$ , podendo ser escrito como

$$T = \frac{dS}{dE} \quad (6)$$

sendo  $S = \oint pdq$  a integral ação sobre este período, *i.e.*,

$$S = \int_{\gamma} \sqrt{2m(E - V(q))} dq \quad (7)$$

Partindo da definição  $J = S/2\pi$ , pode-se escrever, de forma equivalente para o movimento periódico, a relação

$$\omega = \frac{dE}{dJ} \quad (8)$$

onde  $\omega = 2\pi/T$  é a frequência angular da oscilação do movimento periódico. Nesta abordagem, a variável  $J$  é entendida como um invariante adiabático do sistema, uma vez que permanece constante durante o movimento. O postulado de Bohr-Sommerfeld<sup>4,5</sup> propõe que cada um dos invariantes adiabáticos seja um múltiplo inteiro da constante de Planck,  $h$ . Assim, a integral ação,  $S = \oint pdq = nh$ , *i.e.*, deveria ser quantizada para um sistema atômico, tal que  $\omega = \Delta E/\Delta J$ .

### 3. Reinterpretação Quântica das Relações Cinemáticas e Mecânicas

De acordo com a construção mecânica de Heisenberg, é preciso descartar observáveis clássicas tais como a posição e o período de um elétron no átomo. Entretanto, as frequências de Bohr associadas às transições entre dois estados estacionários  $n$  e  $n - \alpha = m$  podem ser observadas, i.e.,

$$\omega(n, m) = \frac{1}{\hbar} (E_n - E_m) \quad (9)$$

Considerando um modelo unidimensional para um elétron oscilante em um átomo, a coordenada  $q(n, t)$  associada a um estado  $n$ , com frequência  $\omega(n)$ , pode ser representada em termos de uma expansão de Fourier do tipo

$$q(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q_{\alpha}(n) e^{i\alpha\omega(n)t} \quad (10)$$

Na Eq. (10), o número quântico  $n$  é introduzido para garantir a condição de quantização do invariante adiabático  $J = \frac{n\hbar}{2\pi} \equiv n\hbar$ .

Como as frequências observadas são as frequências de Bohr relacionadas às transições entre dois estados estacionários discretos, Heisenberg propôs as seguintes substituições nos termos da expansão de Fourier:  $\alpha\omega(n) \rightarrow \omega(n, n - \alpha)$  e  $q_{\alpha}(n) \rightarrow q(n, n - \alpha)$ . Dessa forma, chegava-se à expansão de Fourier modificada (associada a quaisquer transições entre dois estados estacionários):

$$q(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} q(n, n - \alpha) e^{i\omega(n, n - \alpha)t} \quad (11)$$

Agora, as amplitudes de transição  $q(n, n - \alpha)$  na Eq. (11) são associadas às transições entre os estados estacionários  $n$  e  $n - \alpha$ . O momento linear é obtido da Eq. (10), i.e.,  $p(n, t) = m_e q(n, t)$ , onde  $m_e$  é a massa do elétron, e analogamente à Eq. (11), tem-se

$$p(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} p(n, n - \alpha) e^{i\omega(n, n - \alpha)t} \quad (12)$$

sendo  $p(n, n - \alpha) = im_e\omega(n, n - \alpha)q(n, n - \alpha)$ , que tem uma representação complexa mais evidente (notando-se que  $i = \sqrt{-1}$ ).

De acordo com o eletromagnetismo clássico,<sup>7</sup> a energia emitida por unidade de tempo para uma carga oscilante  $e$  é calculada como  $\frac{dE}{dt} = \frac{e^2\omega^4q^2}{6\pi\epsilon_0c^3}$ , em unidades do SI. Assim, utilizando a teoria de Heisenberg para as possíveis transições eletrônicas, i.e.,  $\omega \rightarrow \omega(n, n - \alpha)$  e  $q_{\alpha} \rightarrow q(n, n - \alpha)$ , obtém-se a probabilidade de transição<sup>9</sup> de emissão de um quantum de energia  $\hbar\omega(n, n - \alpha)$ , na unidade de tempo como

$$P(n, n - \alpha) = \frac{e^2}{3\pi\epsilon_0\hbar c^3} [\omega(n, n - \alpha)]^3 |q(n, n - \alpha)|^2 \quad (13)$$

Para Heisenberg, as amplitudes de transição  $q(n, n - \alpha)$  são observáveis que dependem apenas de dois estados estacionários e, portanto, requerem uma representação real.

A expansão de Fourier para o termo quadrático na Eq. (13) pode ser feita da seguinte forma

$$q^2(n, t) = \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} Q_{\alpha}(n) e^{i\alpha\omega(n)t} \quad (14)$$

a qual pode ser relacionada com a Eq. (10) usando uma regra de combinação para as frequências de transição, tal que

$$Q_{\alpha}(n) = \sum_{\lambda=-\infty}^{\infty} q_{\alpha-\lambda}(n) q_{\lambda}(n) \quad (15)$$

Seguindo os passos de Heisenberg, faz-se as substituições:  $Q_{\alpha}(n) \rightarrow Q(n, n - \alpha)$ ,  $\alpha\omega(n) \rightarrow \omega(n, n - \alpha)$ ; e utiliza-se a regra de combinação de Rydberg-Ritz<sup>8</sup> para as frequências espetrais medidas,

$$\omega(n, n - \beta) = \omega(n, n - \alpha) + \omega(n - \alpha, n - \beta) \quad (16)$$

Isto resulta na regra de multiplicação quântica para a Eq. (15), i.e.,

$$Q(n, n - \alpha) = \sum_{\lambda=-\infty}^{\infty} q(n, n - \lambda) q(n - \lambda, n - \alpha) \quad (17)$$

É importante notar para esta regra quântica que o produto de variáveis dinâmicas diferentes pode não comutar, como é o caso de  $q(t)$  e  $p(t)$ . Em geral, nesta estrutura, o produto de duas variáveis dinâmicas distintas  $A(t)$  e  $B(t)$  deve ser visto como não comutativo, i.e.,  $[AB](t) \neq [BA](t)$ .<sup>2</sup> A ideia de regras de comutação ficará mais evidente nas discussões a seguir.

### 4. Sobre os Aspectos Dinâmicos da Teoria Quântica de Heisenberg

A abordagem teórica de Heisenberg fez uma reformulação drástica dos componentes cinemáticos da mecânica clássica que, de certa forma, também alterava o comportamento dinâmico dos sistemas atômicos. Entretanto, ele manteve a equação de movimento clássica como ingrediente fundamental da nova teoria. Assim, para um sistema quântico com um único grau de liberdade, a dinâmica será dada por uma equação equivalente à segunda lei de Newton:

$$m \frac{d^2q}{dt^2} - f(q) = 0 \quad (18)$$

Isto manteria o esquema formal da mecânica newtoniana, porém sem necessariamente interpretar  $q(t)$  como a posição no sistema quântico. De fato, Heisenberg propôs que  $q(t)$  deveria corresponder a uma quantidade atômica observável. Como já discutido anteriormente, há uma amplitude de transição associada a dois estados estacionários.

Para determinar as frequências  $\omega(n, n - \alpha)$  e as amplitudes  $q(n, n - \alpha)$  a partir da Eq. (18), é preciso utilizar

novamente a regra de quantização de Bohr-Sommerfeld:<sup>5</sup>

$$\oint pdq = \oint p(t) \dot{q}(t) dt = nh$$

Usando a prescrição de Heisenberg, vem

$$\oint p(t) \dot{q}(t) dt = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} |q_{\alpha}(n)|^2 \alpha^2 \omega(n) = nh \quad (19)$$

com a condição realista  $q_{-\alpha}^*(n) = q_{-\alpha}(n)$ . Um ponto fundamental da abordagem de Heisenberg foi enfraquecer a condição de Bohr, aplicando-a somente no limite do princípio de correspondência, *i.e.*, para  $n \gg 1$ . Neste caso, basta escolher  $\Delta S = h$  para duas órbitas de Bohr consecutivas e escrever a Eq. (19) em termos da derivada

$$h = \frac{d}{dn} (nh) = 2\pi m \sum_{\alpha=-\infty}^{\infty} \alpha \frac{d}{dn} (\alpha \omega(n) |q_{\alpha}(n)|^2) \quad (20)$$

A derivação com relação a  $n$  na Eq. (20) é usada para reinterpretar quanticamente a condição de Bohr como sendo

$$h = 4\pi m \sum_{\alpha=0}^{\infty} \left\{ |q(n, n+\alpha)|^2 \omega(n, n+\alpha) - |q(n, n-\alpha)|^2 \omega(n, n-\alpha) \right\} \quad (21)$$

Com auxílio da Eq. (21) fica fácil mostrar a relação de comutação fundamental  $q(n, t)p(n, t) - p(n, t)q(n, t) = i\hbar$ , obtida juntamente com as Eqs. (11) e (12) (*cf.* Apêndice A da ref. 2).

## 5. Uma Breve Formulação da Mecânica Quântica de Born e Jordan

O termo “mecânica quântica” foi proposto inicialmente por M. Born, em 1924.<sup>10</sup> Entretanto, a abordagem teórica de Heisenberg abriu caminho para uma construção mais elaborada da mecânica quântica.<sup>11,12</sup> Ainda em 27 de setembro de 1925, a revista Zeitschrift für Physik recebeu o artigo de M. Born e P. Jordan, intitulado Zur Quantenmechanik, que pode ser traduzido como, “Sobre a Mecânica Quântica”,<sup>13</sup> que trazia uma formulação matricial mais clara da teoria de Heisenberg. Na abordagem de Born e Jordan, um sistema mecânico quântico periódico, com um único grau de liberdade, deve ser descrito por um par de coordenadas ( $\mathbf{q}, \mathbf{p}$ ) representados por matrizes dependentes do tempo, *i.e.*,

$$\mathbf{q} \equiv \{q_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\}, \quad \mathbf{p} \equiv \{p_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\} \quad (22)$$

para os quais  $\omega_{nm}$  são as frequências associadas às transições entre dois estados estacionários indicados pelos números inteiros  $n$  e  $m$ . Dada a condição realista das grandezas físicas, as matrizes descritas pela Eq. (22) devem satisfazer a condição de hermiticidade:  $\mathbf{q} = \mathbf{p}^\dagger$  e  $\mathbf{p} = \mathbf{p}^\dagger$  (onde o símbolo  $\dagger$  indica a transposta conjugada das matrizes).

Usando essa representação, a regra de multiplicação quântica dada pela Eq. (15) resulta do produto de matrizes, *i.e.*,

$$\mathbf{q}^2 = \left\{ \sum_{\alpha} q_{n\alpha} e^{i\omega_{n\alpha} t} q_{\alpha m} e^{i\omega_{\alpha m} t} \right\} = \left\{ \left( \sum_{\alpha} q_{n\alpha} q_{\alpha m} \right) e^{i\omega_{nm} t} \right\} \quad (23)$$

obedecendo à regra de combinação de Rydberg-Ritz:  $\omega_{n\alpha} + \omega_{\alpha m} = \omega_{nm}$ . Neste caso, as variáveis dinâmicas independentes do tempo devem ser representadas por matrizes diagonais. Por exemplo, a matriz hamiltoniana, que é uma função de  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$ , assume a forma

$$\mathbf{H} \equiv \{H_n \delta_{nm}\} \quad (24)$$

sendo que os elementos diagonais  $H_n$  são identificados com as energias  $E_n$  dos estados estacionários, obedecendo à hipótese de Bohr,  $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$ .

Outro fato importante na mecânica quântica matricial de Born e Jordan é que claramente as matrizes  $\mathbf{q}$  e  $\mathbf{p}$  não comutam entre si, *i.e.*,  $\mathbf{pq} - \mathbf{qp} \equiv [\mathbf{p}, \mathbf{q}] \neq 0$ . Além disso, pela multiplicação de matrizes e pela regra de combinação das frequências, o comutador deve ser independente do tempo, levando ao resultado

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{i}{\hbar} \mathbf{1} \quad (25)$$

onde a matriz  $\mathbf{1} \equiv \{\delta_{nm}\}$  representa a matriz unidade com elementos diagonais iguais a 1 e os elementos fora da diagonal iguais a 0. Tal resultado evidencia ainda mais a estrutura complexa da mecânica quântica.

Agora, para estabelecer a equação de movimento de uma variável dinâmica genérica, representada pela função matricial  $\mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q}) \equiv \{g_{nm} e^{i\omega_{nm} t}\}$ , toma-se sua derivada no tempo, tal que

$$\frac{d}{dt} g_{nm} e^{i\omega_{nm} t} = i\omega_{nm} g_{nm} e^{i\omega_{nm} t} = \frac{i}{\hbar} (E_n - E_m) g_{nm} e^{i\omega_{nm} t} \quad (26)$$

Usando a matriz hamiltoniana dada pela Eq. (24), obtém-se, em notação matricial

$$\frac{d\mathbf{g}}{dt} = \frac{i}{\hbar} (\mathbf{Hg} - \mathbf{gH}) = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{g}] \quad (27)$$

A Eq. (27) é conhecida como a equação de movimento de Heisenberg. Note que, aplicando a Eq. (27) para uma matriz hamiltoniana escrita na forma  $\mathbf{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\mathbf{q})$ , *i.e.*, como uma função de matrizes, obtém-se:

$$\frac{d\mathbf{q}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{q}] = \frac{i}{\hbar} \left[ \frac{\mathbf{p}^2}{2m}, \mathbf{q} \right] = \frac{i}{\hbar} \frac{1}{2m} (\mathbf{p}[\mathbf{p}, \mathbf{q}] + [\mathbf{p}, \mathbf{q}]\mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}}{m} \quad (28)$$

e, analogamente,

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\mathbf{H}, \mathbf{p}] = \frac{i}{\hbar} [V(\mathbf{q}), \mathbf{p}] = \frac{i}{\hbar} \sum_j jb_j \mathbf{q}^{j-1} [\mathbf{q}, \mathbf{p}] = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} V(\mathbf{q}) \quad (29)$$

desde que  $V(\mathbf{q}) \equiv \sum_j b_j \mathbf{q}^j$ , observando-se as propriedades algébricas  $[\mathbf{q}, \mathbf{q}] = [\mathbf{p}, \mathbf{p}] = 0$  e  $[\mathbf{q}, \mathbf{p}] = -[\mathbf{p}, \mathbf{q}] = i\hbar \mathbf{1}$ . As Eqs. (28) e (29) referem-se às Eqs. (2), na sua forma

matricial, e fornece o análogo mecânico-quântico da segunda lei de Newton.

De forma geral, a construção da mecânica matricial de Heisenberg, Born e Jordan adota um ponto de vista hamiltoniano para sistemas periódicos com um grau de liberdade, satisfazendo à condição de quantização dada pela Eq. (25). Além disso, admite-se que a matriz correspondente à hamiltoniana  $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$  seja diagonal, satisfazendo, formalmente, às equações clássicas de Hamilton:

$$\dot{\mathbf{q}} = \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{p}} \quad \dot{\mathbf{p}} = -\frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \mathbf{q}} \quad (30)$$

Uma observação importante com relação a essa construção é a condição de realidade das variáveis dinâmicas que, necessariamente, leva à condição de hermiticidade das matrizes. Assim, para uma variável dinâmica arbitrária,  $\mathbf{g}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$ , tem-se a condição  $g_{nm} = g_{nm}^*$  sobre seus elementos. Isto garante, especialmente, que os elementos das matrizes diagonais sejam quantidades reais.

Como exemplo, aplicando-se a formulação matricial ao problema do oscilador harmônico,<sup>9</sup> cuja matriz hamiltoniana é expressa como

$$\mathbf{H}(\mathbf{q}, \mathbf{p}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 \mathbf{q}^2 \quad (31)$$

tem-se que seus elementos de matriz devem satisfazer [usando as Eqs. (30)]:

$$q_{nm} + \omega_0^2 q_{nm} = 0 \quad (32)$$

Da Eq. (32) resulta que  $q_{nm} = q_{nm}^{(0)} e^{i\omega_{nm} t}$ , satisfazendo, portanto, a condição  $(\omega_0^2 - \omega_{nm}^2) q_{nm} = 0$ , i.e.,  $q_{nm} = 0$  ou  $\omega_{nm} = \pm \omega_{nm}$ . Desta forma, todas as amplitudes de transição  $q_{nm}$  são nulas, exceto aquelas para as quais  $\omega_{nm} = \pm \omega_0$ .

Adotando-se as regras de emissão/absorção, a frequência  $\omega_{nm} = \pm \omega_0$  corresponde à passagem do estado estacionário com energia  $E_n$  para o estado estacionário com energia  $E_{n-1}$  (emissão), enquanto a frequência  $\omega_{nm} = -\omega_0$  corresponde à passagem do estado estacionário com energia  $E_n$  para o estado estacionário com energia  $E_{n+1}$  (absorção), de forma que

$$E_{nm} = 0 \quad m \neq n \pm 1 \quad q_{nm} \neq 0 \quad m = n \pm 1$$

Note que esta escolha de ordenamento é adequada, visto que as linhas (ou colunas) das matrizes com índices mais altos correspondem a estados mais altos de energia, e também não altera a generalidade da solução.

Representando as soluções do problema do oscilador harmônico (supondo o estado fundamental) em termos de matrizes, vem

$$(q_{nm}) = \begin{pmatrix} 0 & q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & q_{23} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (33)$$

A matriz da quantidade de movimento tem forma similar, pois  $p_{nm} = im\omega_{nm}q_{nm}$ :

$$(p_{nm}) = im\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & -q_{01} & 0 & 0 & \dots \\ q_{10} & 0 & -q_{12} & 0 & \dots \\ 0 & q_{21} & 0 & -q_{23} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (34)$$

em virtude da condição  $\omega_{nm} = \pm \omega_0$ . Assim, usando a regra do produto matricial para  $q^2$  e  $p^2$ , obtém-se a matriz da energia total diretamente da Eq. (31):

$$(H_{nm}) = m\omega_0^2 \begin{pmatrix} q_{01}q_{10} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & q_{01}q_{10} + q_{12}q_{21} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & q_{21}q_{12} + q_{23}q_{32} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (35)$$

Exatamente como deveríamos esperar, a matriz da energia total é diagonal, indicando que a energia de um estado estacionário  $E_m = H_{mm}$  não varia com o tempo, uma vez que  $\omega_{mm} = -\omega_{mm}$ , levando o produto dos fatores temporais  $e^{\omega_{mm}t} e^{\omega_{mm}t} = 1$ .

Na forma apresentada pela Eq. (35), os elementos da matriz da energia ainda estão escritos em termos dos elementos da matriz das amplitudes de transição. Porém, usando-se a "nova regra de quantização", i.e., a Eq. (25), é possível determiná-los, resultando no sistema de equações:

$$\begin{aligned} q_{01}q_{10} &= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \\ q_{12}q_{21} - q_{01}q_{10} &= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \\ q_{23}q_{32} - q_{21}q_{12} &= \frac{\hbar}{2m\omega_0} \end{aligned} \quad (36)$$

As Eqs. (36) podem ser resolvidas sucessivamente, fornecendo

$$q_{n,n+1}q_{n+1,n} = |q_{n,n+1}|^2 = (n+1) \frac{\hbar}{2m\omega_0} \quad (37)$$

Assim, substituindo essas expressões na matriz da energia, o termo geral diagonal será dado por

$$E_n = \hbar\omega_0 \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad (n = 0, 1, 2, \dots) \quad (38)$$

que é a energia correta de um oscilador harmônico quântico com um único grau de liberdade. Este resultado indica que o oscilador possui um estado estacionário de energia mais baixa não nula, denominado energia vibracional de ponto zero, i.e.,  $E_0 = \hbar\omega/2$ .

O trabalho da mecânica matricial de Born e Jordan se consolida em um terceiro artigo<sup>14</sup> publicado conjuntamente por Born, Heisenberg e Jordan, uma trilogia que deu

sequência à “nova” mecânica quântica. Vale a pena mencionar também que Dirac chegou, independentemente, em 1925, a uma formulação equivalente da mecânica quântica,<sup>15</sup> porém sem utilizar matrizes. De fato, esses pesquisadores desenvolveram uma mecânica hamiltoniana para o átomo, evidenciando uma estrutura algébrica não comutativa para as variáveis dinâmicas, como, por exemplo, a posição e o momento linear. Seus trabalhos conduziram a uma nova era da física teórica, em que matrizes hermitianas, comutadores e problemas de autovalores tornaram-se objetos matemáticos centrais para a compreensão do mundo atômico e subatômico.

## 6. Considerações Finais

A formulação mecânica de Heisenberg, estendida por Born e Jordan, em 1925, modificou completamente a visão das ideias semiclássicas, antes requeridas para estabelecer a condição de quantização de um sistema físico microscópico. Entretanto, um elemento intrigante da teoria é seu desenvolvimento considerando matrizes complexas, necessitando da imposição da condição de realidade para as variáveis dinâmicas. O problema surge, principalmente, porque, muito anteriormente à descoberta dos fenômenos quânticos, adotamos o espaço euclidiano tridimensional como sendo o espaço de representação das variáveis dinâmicas, associadas aos sistemas físicos macroscópicos, e os números reais como o conjunto representando quantidades medidas no laboratório. Dessa forma, um sistema cartesiano tridimensional seria autossuficiente para orientar todas as observações feitas diretamente no espaço euclidiano. Todavia, o espaço onde transitam os elétrons não nos é acessível, como estabelecido por princípios fundamentais (*e.g.*, o princípio da incerteza de Heisenberg).<sup>16,17</sup>

As amplitudes de transição  $q_{nm}$  permitidas aos elétrons obedecem a regras completamente diferentes das regras usuais observadas no espaço macroscópico. Essas quantidades podem ser interpretadas como probabilidades quânticas de transição para a posição do elétron. Como construímos as leis do movimento em um pano de fundo tridimensional real, onde as regras quânticas não são observadas diretamente, fica evidente a dificuldade para tratar o movimento dos elétrons em átomos e moléculas. Torna-se necessário, portanto, ampliar a representação das variáveis dinâmicas conhecidas, ou mesmo definir outras sem analogia clássica, estendendo nossas concepções sobre o objeto matemático a ser utilizado. No caso, as matrizes hermitianas surgem como objetos necessários.<sup>18</sup> Como sabemos, pode haver uma infinidade de transições permitidas para os elétrons em um sistema atômico-molecular, representadas inicialmente por uma série de Fourier [*cf.* Eq. (11)].

Em última análise aqui, quando se pensa em variáveis dinâmicas quânticas tais como o momento angular, o qual,

por definição, deve envolver componentes simultâneas de  $\mathbf{p}$  e  $\mathbf{q}$ , o problema da indeterminação volta ao cenário. Em particular, as componentes do vetor momento angular não podem ser determinadas simultaneamente, impossibilitando que a variável dinâmica seja obtida de forma completa. Neste caso, a notação complexa nos ensina o que é possível fazer para caracterizar o sistema precisamente. Um problema semelhante ao caso do momento angular ocorre quando se analisam as medidas das componentes cartesianas do spin,  $S \equiv (S_i, S_j, S_k)$ , de um sistema quântico, as quais obedecem ao comutador  $[S_i, S_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} S_k$ , sendo  $\epsilon_{ijk}$  o tensor totalmente antissimétrico de Levi-Civita. Obtém-se, neste caso, que uma das três matrizes representando as componentes do spin deve ser necessariamente complexa. Entretanto, a condição de realidade requer que todas essas matrizes sejam hermitianas, garantindo que as suas formas diagonais forneçam apenas valores reais, os quais, de fato, são medidos no laboratório.

## Agradecimentos

O autor agradece ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado da Bahia (Fapesb) pelo apoio financeiro às atividades de pesquisa envolvendo a Física Atômica e Molecular. Estes agradecimentos são estendidos à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001, que também financia os estudantes de Pós-Graduação da área.

## Referências Bibliográficas

- Heisenberg, W.; Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen. *Zeitschrift für Physik* **1925**, 33, 879. [[Crossref](#)]
- Aitchison, I. J. R.; MacManus, D. A.; Snyder, T. M.; Understanding Heisenberg’s “magical” paper of July 1925: A new look at the calculational details. *American Journal of Physics* **2004**, 72, 1370. [[Crossref](#)]
- Born, M.; Jordan, P.; Zur Quantentheorie aperiodischer Vorgänge. *Zeitschrift für Physik* **1925**, 33, 479. [[Crossref](#)]
- Argyres, P. N.; The Bohr-Sommerfeld quantization rule and the Weyl correspondence. *Physics* **1965**, 2, 131. [[Crossref](#)]
- Eckert, M.; How Sommerfeld extended Bohr’s model of the atom (1913–1916). *The European Physical Journal H* **2014**, 39, 141. [[Crossref](#)]
- Einstein, A.; Zur Quantentheorie der Strahlung. *Physikalische Zeitschrift* **1917**, 18, 121. Uma tradução deste artigo para o português, por ocasião do Ano Mundial da Física, intitulada “Sobre a teoria quântica da radiação” foi publicada em *Revista Brasileira de Ensino de Física* **2005**, 27, 93. [[Crossref](#)]
- Heitler, W.; *The Quantum Theory of Radiation*, Dover Publications Inc.: New York, 1984.

8. Komech, A.; *Quantum Mechanics: Genesis and Achievements*, Springer: Dordrecht, 2013.
9. Born, M.; Blin-Stoyle, R. J.; Radcliffe, J. M.; *Física Atómica*. 4a. ed., Fundação Calouste Gulbenkian: Lisboa, 1986.
10. Born, M.; Über Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **1924**, 26, 379. [[Crossref](#)]
11. Fedak, W. A.; Prentis, J. J.; The 1925 Born and Jordan paper “On quantum mechanics”. *American Journal of Physics* **2009**, 77, 128. [[Crossref](#)]
12. Capellmann, H.; *The Quantum Theory of Born, Heisenberg, and Jordan*. Em *The Development of Elementary Quantum Theory. Springer Briefs in History of Science and Technology*, Springer: Cham, 2017. [[Crossref](#)]
13. Born, M.; Jordan, P.; Zur Quantenmechanik. *Zeitschrift für Physik* **1925**, 34, 858. [[Crossref](#)]
14. Born, M.; Heisenberg, W.; Jordan, P.; Zur Quantenmechanik II. *Zeitschrift für Physik* **1926**, 35, 557. [[Crossref](#)]
15. Dirac, P. A. M.; The fundamental equations of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society A* **1925**, 109, 642. [[Crossref](#)]
16. Heisenberg, W.; Über den anschaulichen Inhalt der quantentheoretischen Kinematik und Mechanik. *Zeitschrift für Physik* **1927**, 43, 172. [[Crossref](#)]
17. Heisenberg, W.; *The physical content of quantum kinematics and mechanics*. Em *Quantum Theory and Measurement*; Wheeler, J. A.; Zurek, W. H., eds.; Princeton University Press: Princeton, 1983.
18. Renou, M.-O.; Trillo, D.; Weilenmann, M.; Le, T. P.; Tavakoli, A.; Gisin, N.; Acín, A.; Navascués, M.; Quantum theory based on real numbers can be experimentally falsified. *Nature* **2021**, 600, 625. [[Crossref](#)]