

Sobre a Gênese da Mecânica Ondulatória

ROLAND KÖBERLE

Instituto de Física e Química de São Carlos, Universidade de São Paulo

Recebido em 6 de Abril de 1978

The ideas which led Erwin Schrödinger to his discovery of wave mechanics are exposed in this paper in a pedagogical manner. We hope that: the material presented may be usefully employed in introductory courses of quantum mechanics, which are usually offered in the last year of the undergraduate curriculum.

Apresentamos neste artigo, de uma maneira didática, as idéias que levaram Erwin Schrödinger à descoberta da mecânica ondulatória. Esperamos que o presente trabalho possa ser utilizado em cursos de introdução à mecânica quântica, que usualmente são dados no quarto ano de bacharelado em Física.

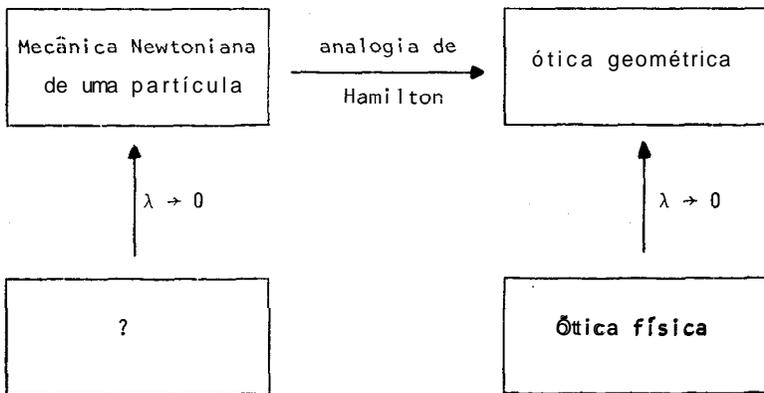
1. INTRODUÇÃO

Os passos dados por Heisenberg, com o intuito de transformar a *velha mecânica quântica* numa teoria sem contradições internas e que culminaram com o estabelecimento da *mecânica de matrizes*, são muito bem relatados num livro texto de Tomonaga¹ (Procuramos citar referências facilmente acessíveis e, de preferência, de cunho didático). No entanto, o mesmo não se pode dizer sobre o nascimento da *mecânica ondulatória*. Talvez porque no primeiro trabalho² de Schrödinger sobre o assunto, a equação que leva seu nome foi praticamente postulada sem nenhuma justificativa. Assim, os livros textos usuais³, dão muito pouca motivação, sacando, por assim dizer, a equação de Schrödinger, do vácuo.

O presente trabalho pretende fechar esta lacuna de uma maneira didática, facilmente enxertável num curso introdutório de mecânica quântica. É óbvio que não temos nada de novo para contar. Aliás, o presente artigo pode ser considerado uma versão detalhadamente comentada do segundo trabalho' de Schrödinger sobre mecânica ondulatória.

Alguns antecedentes históricos, essenciais para compreender a motivação de Schrödinger são resumidos a seguir. Como é bem sabido, a aplicação da mecânica newtoniana sintetizada pela equação de Hamilton-Jacobi⁵, à estrutura atômica (complementada pela eletrodinâmica clássica), não pôde fazer sentido da situação experimental⁶. No entanto, através de introdução de postulados adicionais (as regras de quantização de Bohr-Sommerfeld) foi possível introduzir uma certa ordem nos dados experimentais: por meio de um alto virtuosismo, um conjunto de regras inconsistentes (a *velha mecânica quântica*) foi aplicado a um grande número de fenômenos com admirável sucesso. Notemos que a teoria de Hamilton-Jacobi se prestava tão bem à implementação deste esquema, que poderíamos pensar que foi inventada para isto. Em consequência, sentia-se que a nova teoria deveria, de alguma maneira, incorporar certos conceitos da teoria de Hamilton-Jacobi a reduzir-se a esta no caso limite em que a constante de Planck $\hbar \approx 1,05 \times 10^{-34}$ erg see pudesse ser desprezada.

Um outro dado histórico importante é o seguinte: em 1828 Hamilton descobriu^{7,8} uma analogia formal entre o movimento de um ponto de massa sob a ação de um potencial $V(\vec{r})$ e a propagação de raios luminosos num meio com índice de refração $n(\vec{r})$ no limite da ótica geométrica. Aliás, foi esta analogia que inspirou Hamilton a desenvolver a sua versão da mecânica. Na época este fato foi considerado uma curiosidade, mas Schrödinger se colocou a seguinte questão: supondo que a analogia seja o reflexo de uma unidade mais fundamental da natureza, somos levados a fazer a esta pergunta: se a Ótica geométrica é o limite da ótica física, quando o comprimento de onda λ da luz tende a zero, qual é a teoria que possui a mecânica Newtoniana como limite? O quadro abaixo ilustra a situação.



Respondendo esta pergunta é que Schrödinger foi levado à descoberta da mecânica quântica em sua forma *ondulatória*. Por razões didáticas expomos sucintamente na Seção 2 a teoria de Hamilton-Jacobi, partindo da formulação de Lagrange da mecânica. Na Seção 3 deduzimos as leis principais da Ótica geométrica, a partir das equações de Maxwell e a Seção 4 contém a exposição das idéias de Schrödinger, a parte principal deste artigo. Incluímos ainda, como extensão natural das idéias apresentadas, a formulação da mecânica quântica feita por Feynman.

Acreditamos que o presente artigo deve ser inteligível para alunos que tenham completado o terceiro ano de bacharelado em Física. As referências dadas foram, na maioria das vezes, escolhidas com o ponto de vista didático em mente.

2. A TEORIA DE HAMILTON-JACOBI

Introduzimos nesta seção alguns conceitos que serão utilizados posteriormente⁵.

Supomos conhecida a formulação Lagrangeana da mecânica clássica, onde especificamos um sistema de coordenadas generalizadas q_1, q_2, \dots, q_n . Seja $T(q_i, \dot{q}_j)$ a energia cinética do sistema em função das coordenadas generalizadas q_i e das velocidades generalizadas $\dot{q}_i = \frac{dq_i}{dt}$; $i = 1, 2, \dots, n$. Suponhamos que as forças possam ser derivadas de um po-

tencial $V(q_i)$, de modo que a energia total do sistema seja conservada. As equações de Newton são equivalentes às equações de Lagrange

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.1)$$

onde $L(q_1, q_2, \dots, q_n; \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n) = T(q_i, \dot{q}_i) - V(q_i)$ é a chamada Lagrangeana do sistema. Para um partícula isto é óbvio, já que $L = \frac{1}{2} m \vec{v}^2 - V(\vec{r})$ e

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \vec{v}} = m \vec{v} = \frac{\partial L}{\partial \vec{r}} = - \frac{\partial V}{\partial \vec{r}}.$$

Como $T(q_i, \dot{q}_i)$ é uma função quadrática de \dot{q}_i , (2.1) constitui um sistema de n equações de 2a. ordem em \mathbf{t} . Alternativamente podemos reduzir (2.1) a um sistema de $2n$ equações de 1a. ordem em \mathbf{t} , introduzindo os momentos conjugados

$$p_i \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.2)$$

e a energia total $H(q_i, p_i)$, expressa em termos das coordenadas e momentos generalizados, é

$$H = T + V = 2T - (T - V) = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i - L \quad (2.3)$$

Aqui usamos

$$2T = \sum_{i=1}^n \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i$$

(T é uma função homogênea de 2a. ordem em \dot{q}_i !) e $\frac{\partial V}{\partial q_i} = 0$ de modo que

$$2T = \sum_{i=1}^n \frac{\partial (T - V)}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \sum_{i=1}^n \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \dot{q}_i = \sum_{i=1}^n p_i \dot{q}_i \quad (2.4)$$

As equações de Hamilton são deduzidas calculando⁹

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \right)_q = \quad (\text{o índice } q \text{ indica que os } q\text{'s são mantidos constantes})$$

$$(2.3) \quad = \dot{q}_i + \sum_j p_j \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} \right)_q - \left(\frac{\partial L}{\partial p_i} \right)_q$$

$$(2.2) \quad = \dot{q}_i + \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right)_q \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} \right)_q - \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right)_q \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial p_i} \right)_q$$

$$= \dot{q}_i \tag{2.5}$$

e analogamente

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} \equiv \left(\frac{\partial H}{\partial q_i} \right)_p \stackrel{(2.3)}{=} \sum_{j=1}^n p_j \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right)_p$$

$$= \sum_j p_j \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p - \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \right)_q - \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right)_q \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p$$

$$(2.1) \quad = \sum_j p_j \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)_q - \sum_j \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right)_q \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p$$

$$(2.2) \quad = \sum_j p_j \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p - \frac{dp_i}{dt} - \sum_j p_j \left(\frac{\partial \dot{q}_j}{\partial q_i} \right)_p =$$

$$= -\dot{p}_i \tag{2.6}$$

Reunindo, obtemos as $2n$ equações de 1.ª ordem em t

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i \tag{2.7a}$$

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i \tag{2.7b}$$

As equações (2.1) e (2.7) podem também ser obtidas como soluções de problemas variacionais. É através destes que historicamente foi desenvolvido o paralelismo entre mecânica e ótica geométrica e estes resultados inspiraram Schrödinger a criar sua mecânica ondulatória.

Calculamos primeiro a variação de $\int \sum_j p_j \dot{q}_j$, onde por uma variação δq_i das coordenadas generalizadas entendemos o seguinte: considere o sistema inicialmente no ponto q_{ia} a partir do qual descreve a trajetória $q_i(t)$, dada pela solução de (2.1) ou (2.7): a trajetória real. Considere agora uma trajetória infinitesimalmente vizinha (trajetória virtual) dada por $\tilde{q}_i(t) = q_i(t) + \delta q_i(t)$. Como os $\delta q_i(t)$ são arbitrários, $\tilde{q}_i(t)$ em geral não vai satisfazer as equações de movimento (2.1) ou (2.7). Notemos que, como dq_i e δq_i são infinitesimais $\delta(dq_i) = d(\delta q_i)$ (Ref.10). Isto posto, segue-se que

$$\begin{aligned}
 \delta \int \sum_j p_j \dot{q}_j & \stackrel{(2.2)}{=} \int \sum_j \delta \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} d q_j \right) \\
 & = \int \sum_j \left\{ \delta \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) d q_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta(d q_j) \right\} \\
 & = \int \sum_j \left\{ \delta \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \dot{q}_j dt + d \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta q_j \right) - d \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \delta q_j \right\} \\
 (2.1) \quad & = \int \sum_j \left\{ \delta \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \dot{q}_j dt + d \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta q_j \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} \delta q_j dt \right\} \quad (2.8)
 \end{aligned}$$

Mas de (2.3) temos que

$$\begin{aligned}
 \delta H & = \sum_j \left\{ \dot{q}_j \delta \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta \dot{q}_j - \frac{\partial L}{\partial q_j} \delta q_j - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta \dot{q}_j \right\} \\
 & = \sum_j \left\{ \dot{q}_j \delta \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_j} \delta q_j \right\}
 \end{aligned}$$

de modo que

$$\begin{aligned}
 \delta \int \sum_j p_j \dot{q}_j & = \int \sum_j \left\{ d \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \delta q_j \right) + \delta H dt \right\} \\
 & = \sum_j (p_{jf} \delta q_{jf} - p_{ia} \delta q_{ia}) + \int \delta H dt \quad (2.9)
 \end{aligned}$$

onde os índices a e f indicam momentos e variações de coordenadas no início e no final da trajetória, respectivamente.

Se as variações δq_i são vinculadas a se anularem nos instantes iniciais e finais e se as trajetórias virtuais e reais possuírem a mesma energia, implicando que $\delta q_{i\alpha} = \delta q_{if} = \delta H = 0$, obtemos o princípio da ação mínima

$$\delta \int_{t_i}^{t_f} \sum_{j=1}^n p_j \dot{q}_j dt = 0 \quad \text{ou} \quad \delta \int_{t_i}^{t_f} (2T - H) dt = 0 \quad (2.10)$$

para variações *coterminalis* e da mesma energia. (A segunda versão segue-se de (2.4)).

Para sistemas que não conservam energia (2.10) pode ser generalizado da seguinte maneira. Consideremos a variação da ação $\int L dt$

$$\begin{aligned} \delta \int L dt &= \delta \int (2T - H) dt && (2.4) \\ &= \delta \int \left\{ \sum_j p_j \dot{q}_j - H \right\} dt && (2.9) \\ &= \sum_j (p_{jf} \delta q_{jf} - p_{ja} \delta q_{ja}) + \int \delta H dt - \delta \int H dt && (2.11) \end{aligned}$$

A variação $\delta \int H dt$ é devida a dois termos:

- (i) $\int \delta H dt$ devido à variação de energia entre a trajetória real e virtual
- (ii) a quantidade $(H_f \delta t_f - H_a \delta t_a)$ oriunda da variação temporal entre trajetórias real e virtual nos pontos terminais. Consequentemente temos

$$\begin{aligned} \delta \int L dt &= \sum_j (p_{jf} \delta q_{jf} - p_{ja} \delta q_{ja}) + \int \delta H dt - \int \delta H dt - \\ &\quad - (H_f \delta t_f - H_a \delta t_a) = \\ &= \sum_j (p_{jf} \delta q_{jf} - p_{ja} \delta q_{ja}) - (H_f \delta t_f - H_a \delta t_a) \quad (2.12) \end{aligned}$$

Se sujeitarmos a trajetória virtual a ser *coterminal* no espaço e tempo, mas não fazendo nenhuma restrição quanto à energia, obtemos

$$\delta \int L dt = 0 \quad (2.13)$$

que é conhecido como *princípio de Hamilton*, que pode ser enunciado da seguinte maneira: *um sistema se move de uma configuração a outra, de tal*

maneira que a variação da integral $\int L dt$ tomada ao longo da trajetória real e da virtual, coterminal no espaço e no tempo com a trajetória real, seja zero. Em outras palavras, $\int L dt$ é estacionária.

As equações de Euler correspondentes ao problema variacional (2.13) são exatamente as equações (2.1), que valem então mesmo que o sistema não seja conservativo. Uma vantagem da formulação (2.13) sobre a (2.1) é a seguinte: (2.13) é independente do particular sistema de coordenadas escolhido. Segue-se que as equações (2.1) valem também, qualquer que seja o sistema de coordenadas generalizadas escolhidas.

Da lei de variação da ação (2.12) podemos obter as derivadas de $S \equiv \int L dt$ em relação às coordenadas iniciais e finais:

$$\frac{\partial S}{\partial q_{ia}} = -p_{ia} \quad (2.14a)$$

$$\frac{\partial S}{\partial q_{if}} = p_{if} \quad (2.14b)$$

Se o sistema for conservativo, temos

$$H(q_i, p_j) = E$$

Substituindo nesta equação as equações (2.14) obtemos duas equações diferenciais, suficientes para determinar S (por integração):

$$H\left(\frac{\partial S}{\partial q_{if}}, q_{if}\right) = E \quad (2.15a)$$

$$H\left(\frac{\partial S}{\partial q_{ia}}, q_{ia}\right) = E \quad (2.15b)$$

(Note que H é quadrático em p_i , de modo que o sinal negativo em (2.14b) é irrelevante).

Não vamos provar aqui que a integração de (2.15) realmente determina S, este é um problema não-trivial. Hamilton observou que a determinação de S equivale à resolução das equações de movimento. As equações (2.15) devem ser utilizadas da seguinte maneira: integramo-las para obter S, que é tratada como função das coordenadas iniciais q_{ia} fixas, dos pontos finais variáveis q_{if} e da energia E. Em virtude de (2.14a) podemos derivar S em relação a $(n-1)$ das coordenadas iniciais fixas e igualar o resultado a constantes (os momentos iniciais $-p_{ia}$), ob-

tendo assim $(n-1)$ equações nas variáveis $q_{i,f}$. Estas equações contêm $(2n-1)$ constantes $(q_{i,\alpha}, p_{i,\alpha}; i = 1, 2, \dots, n-1$ e $E)$ e definem a trajetória do sistema. Note que, como a energia total E é dada, não podemos especificar arbitrariamente todos os $q_{i,\alpha}$ e $p_{i,\alpha}$, $i = 1, 2, \dots, n-1, n$, por isso derivamos somente em relação a $(n-1)$ das $q_{i,\alpha}$. Finalmente as relações (2.14b) são automaticamente satisfeitas por causa de (2.15b) e permitem encontrar os momentos em qualquer ponto da trajetória.

Jacobi desenvolveu a teoria de Hamilton e mostrou, em particular, que as constantes ocorrendo em S não precisam ser necessariamente as coordenadas iniciais e que das equações (2.15) uma só é suficiente para determinar S :

$$H\left(\frac{\partial S}{\partial q_i}, q_j\right) = E \quad (2.16)$$

Quando o sistema não for conservativo, a energia total não é constante e, ao invés dela, o tempo t entra em jogo. Partindo da equação (2.12) vamos introduzir a função principal de Hamilton $W \equiv \int L dt$, onde W é considerada como função dos pontos finais variáveis $q_{i,f}$ e do tempo t especificando o limite superior da integral. Ao invés de (2.14) temos agora de (2.12)

$$\frac{\partial W}{\partial q_{i,\alpha}} = -p_{i,\alpha}, \quad \frac{\partial W}{\partial q_{i,f}} = p_{i,f}, \quad \frac{\partial W}{\partial t} = -E(t) \quad (2.17)$$

e o análogo da equação (2.16) fica

$$H\left(\frac{\partial W}{\partial q_i}, q_j, t\right) + \frac{\partial W}{\partial t} = 0 \quad (2.18)$$

Esta última chama-se equação de *Hamilton-Jacobi*. Jacobi provou que qualquer integral completa dessa equação, isto é, uma integral contendo tantas constantes arbitrárias quantas variáveis independentes $((n+1)$ neste caso: $t, q_i; i = 1, 2, \dots, n)$ pode ser usada. Uma constante é simplesmente aditiva e a solução completa de (2.18) será da forma

$$W = f(q_1, q_2, \dots, q_n; t; \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n) + A \quad (2.19)$$

onde A e α_i ; $i = 1, 2, \dots, n$ são constantes. Para usar esta integral completa, provamos que as derivadas de W em relação às constantes α_i também são constantes, i.e.

$$\frac{\partial W}{\partial \alpha_i} = \beta_i, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.20)$$

que é o teorema de Jacobi. De fato,

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_i} \right) = \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_i} \right) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial^2 W}{\partial \alpha_i \partial q_j} \dot{q}_j \quad (2.21)$$

Por outro lado, derivamos (2.18) em relação a a_i obtemos

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \left(\frac{\partial W}{\partial t} \right) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial \alpha_i} = 0 \quad (2.22)$$

já que somente $\frac{\partial W}{\partial q_i} = p_i$ depende de a_i , Lembrando agora a equação de Hamilton (2.7b)

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}$$

vemos que o lado direito de (2.21) é igual ao esquerdo de (2.22), ou seja

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial W}{\partial \alpha_i} \right) = \frac{d\beta_i}{dt} = 0 \quad (2.23)$$

e os β_i são realmente constantes ao longo da trajetória real.

Os momentos são dados por

$$p_i = \frac{\partial W}{\partial q_i}, \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (2.24)$$

e podemos, através de (2.24), num certo instante t_0 eliminar as n constantes a_i em favor de $q_{v\alpha} = q_i(t_0)$. Eliminado β_i de (2.20)

$$\frac{\partial W(q_{i\alpha}; t_0, \alpha_i)}{\partial \alpha_j} = \beta_j \quad (2.25)$$

obtemos as equações de movimento em função de $q_{i\alpha}$, $P_{i\alpha}$ substituindo os valores de a_i e β_i em (2.20).

Para dar um pouco de vida a este esquema, calculamos os níveis de energia do átomo de hidrogênio, segundo o procedimento da velha

.mecânica quântica. Usamos a formulação relativística, mas sem spin. Neste caso a energia total E medida a partir da energia de repouso mc^2 é

$$E = mc^2 (1 - v^2/c^2)^{-1/2} - mc^2 - \frac{e^2}{r} \quad (2.26)$$

Em coordenadas polares planas r, θ , a velocidade v do elétron é dada escrevendo-se a energia cinética em termos dos momentos p_r e p_θ :

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{m^2 v^2}{1 - v^2/c^2} \right) = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\theta^2}{r^2} \right)$$

A equação de Hamilton-Jacobi fica

$$mc^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2} \left(\frac{\partial S}{\partial \theta} \right)^2 = \frac{1}{c^2} \left(E + mc^2 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \quad (2.27)$$

Separando as variáveis

$$S(r, \theta) = S_1(r) + S_2(\theta)$$

obtemos

$$\frac{dS_1}{dr} = \alpha_1 \quad (2.28)$$

$$mc^2 + \left(\frac{dS_2}{d\theta} \right)^2 + \frac{\alpha_1^2}{r^2} = \frac{1}{c^2} \left(E + mc^2 + \frac{e^2}{r} \right)^2 \quad (2.29)$$

onde α_1 é uma constante de separação.

A solução de (2.28) é

$$S_1 = \alpha_1 \theta + \alpha_2 \quad (2.30)$$

e (2.29) dá

$$S_2 = \int dr \left\{ -\frac{1}{r^2} \left(\alpha_1^2 - \frac{e^4}{c^2} \right) + \frac{2e^2}{rc^2} (E + mc^2) + \left(\frac{E^2}{c^2} + 2mE \right) \right\}^{1/2} \quad (2.31)$$

As condições de Bohr-Sommerfeld são introduzidas pondo

$$p_\theta d\theta = \int_0^{2\pi} \frac{dS_1}{d\theta} d\theta = n_1 h \quad (2.32)$$

$$\oint p_r dr = \int \frac{dS_2}{dr} dr = n_2 \hbar \quad (2.33)$$

A equação (2.32) é utilizada para eliminar a_1 em favor de n_1 . Introduzindo (2.30) em (2.32) dá

$$\alpha_1 = \frac{n_1 \hbar}{2\pi} = n_1 \hbar \quad (2.34)$$

Para calcular (2.31) devemos obter os valores r_0 e r_1 entre os quais r varia, quando o elétron descreve sua Órbita. A integral se estende de $r_0 \rightarrow r_1 \rightarrow r_0$. Nos extremos r_0 e r_1 , p_r se anula. Anulando o integrando de (2.31), para obter as raízes r_0 e r_1 , obtemos para a integral (2.31) o valor

$$2\pi \left\{ - \left(\alpha_1^2 - \frac{e^4}{c^2} \right)^{1/2} + \frac{e^2 (E + mc^2)}{c^2 (-E^2/c^2 - 2mE)^{1/2}} \right\}$$

que, igualado a $n_2 \hbar$, determina E em função de n_1 e n_2 :

$$E = mc^2 \left\{ \left[1 + \frac{\alpha^2}{(n_2 + \sqrt{n_1^2 - a})^2} \right]^{-1/2} - 1 \right\} \quad (2.35)$$

onde usamos (2.34) e introduzimos a constante de estrutura fina de Sommerfeld $a = e^2/\hbar c$.

Expandindo (2.35) em potências de $a \approx 1/c$ obtemos os níveis de Bohr. Como dissemos no início, este cálculo demonstra, por sua simplicidade (Não precisamos calcular trajetórias! Tente fazê-lo!), que a teoria de Hamilton-Jacobi realmente era um instrumento muito adequado à implementação das regras (2.32) e (2.33).

3. AS LEIS DA ÓTICA GEOMÉTRICA ¹²

A propagação de ondas eletromagnéticas num meio descrito pelo índice de refração $n(\vec{r})$ (além da posição $n(\vec{r})$ pode também depender da frequência, mas não explicitamos esta dependência) é determinada pela equação de onda

$$\Delta \tilde{f} - \frac{n^2}{c^2} \frac{\partial^2 \tilde{f}}{\partial t^2} = 0 \quad (3.1)$$

onde A é o laplaceano

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

e \tilde{f} representa qualquer componente do campo elétrico ou magnético. Supondo que \tilde{f} varie harmonicamente com o tempo $\tilde{f} = f(x, y, z) e^{-i\omega t}$ obtemos de (3.1)

$$\Delta f + k^2 f = 0, \quad k = \frac{\omega n}{c} = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (3.2)$$

onde A é o comprimento de onda. A Ótica geométrica é o limite quando podemos desprezar o caráter ondulatório da luz e falar somente de raios luminosos, i.e., quando $A \rightarrow 0$ ou seja, quando podemos desprezar o comprimento de onda em relação às dimensões características do sistema ótico. $A \rightarrow 0$ quer dizer $k \rightarrow \infty$ e neste caso a equação (2.2) degenera em $k^2 f = 0$. Apesar disso podemos extrair informações da equação (3.2), supondo que a forma da solução seja a seguinte

$$f(x, y, z) = A(x, y, z) e^{ik_0 \psi(x, y, z)}, \quad k_0 = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi}{\lambda_0} \quad (3.3)$$

Enquanto f é uma função variando rapidamente com a posição (porque $k_0 \rightarrow \infty$), podemos admitir que a amplitude A e o eiconal ψ sejam funções de variação lenta com x, y e z . Introduzindo (3.3) em (3.2) obtemos

$$\Delta f + k^2 f = -k_0^2 f \left[\left(\frac{\partial \psi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} \right)^2 - \frac{k^2}{k_0^2} \right] + 2ik_0 f \left[-\frac{1}{2} \Delta \psi + \vec{\nabla}(\log A) \cdot \vec{\nabla} \psi \right] + \dots \quad (3.4)$$

onde os termos indicados por \dots não se tornam infinitos com $k_0 \rightarrow \infty$. (3.4) implica que (3.2) é satisfeita aproximadamente se A e ψ satisfizerem

$$(\vec{\nabla} \psi)^2 = n^2(x, y, z) \quad (3.5a)$$

$$\vec{\nabla}(\log A) \cdot \vec{\nabla} \psi = -\frac{1}{2} \Delta \psi \quad (3.5b)$$

onde n é o índice de refração. Segundo a equação (3.3) as superfícies $\psi = \text{cte}$ são as superfícies de fase constante de f , ou seja, as frentes de onda são dadas pelas superfícies $\psi = \text{cte}$, cujas normais, dadas por $\vec{\nabla} \psi$,

representam as direções dos raios luminosos. Em geral $n(x, y, z)$ não é constante e os raios serão curvos.

Num meio homogêneo $n = \text{cte}$, a solução mais simples de (3.5a) e

$$\psi = n(\alpha x + \beta y + \gamma z) \quad \text{com} \quad \alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1 \quad (3.6)$$

As frentes de onda são planos e os raios são linhas retas paralelas à direção

$$\vec{\nabla}\psi = (n\alpha, n\beta, n\gamma) \quad (3.7)$$

A solução geral de (3.5a) é obtida partindo de uma superfície arbitrária e construindo uma família de superfícies (frentes de ondas) vizinhas, com espaçamento infinitesimal dado por $(|\vec{\nabla}\psi|)^{-1} = n^{-1}$.

Até agora usamos somente a equação de onda (3.1), que, por sua vez, decorre das equações de Maxwell, mas podemos obter mais informação usando estas últimas. Sejam os campos \vec{E} e \vec{H} variando harmonicamente

$$\vec{E}(\vec{r}, t) = \vec{E}_0(\vec{r}) e^{-i\omega t} \quad (3.8a)$$

$$\vec{H}(\vec{r}, t) = \vec{H}_0(\vec{r}, t) e^{-i\omega t} \quad (3.8b)$$

Numa região livre de cargas e correntes ($\rho = 0, \vec{j} = 0$) as equações de Maxwell são (em unidades gaussianas)

$$\vec{\nabla} \times \vec{H}_0 + ik_0 \epsilon \vec{E}_0 = 0 \quad (3.9a)$$

$$\vec{\nabla} \times \vec{E}_0 - ik_0 \mu \vec{H}_0 = 0 \quad (3.9b)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\epsilon \vec{E}_0) = 0 \quad (3.9c)$$

$$\vec{\nabla} \cdot (\mu \vec{H}_0) = 0 \quad (3.9d)$$

Usando o ansatz (3.3) para \vec{E}_0 e \vec{H}_0 :

$$\vec{E}_0 = \vec{e} e^{ik_0 \psi} \quad (3.10a)$$

$$\vec{H}_0 = \vec{h} e^{ik_0 \psi} \quad (3.10b)$$

em (3.9) obtemos

$$\vec{\nabla}\psi \times \vec{h} + \epsilon \vec{e} = \frac{i}{k_0} \vec{\nabla} \times \vec{h} \quad (3.11a)$$

$$\vec{\nabla}\psi \times \vec{e} - \mu \vec{h} = \frac{i}{k_0} \vec{\nabla} \times \vec{e} \quad (3.11b)$$

$$\vec{e} \cdot \vec{\nabla}\psi = \frac{i}{k_0} (\vec{e} \cdot \nabla \log \epsilon + \vec{\nabla} \cdot \vec{e}) \quad (3.11c)$$

$$\vec{h} \cdot \vec{\nabla}\psi = \frac{i}{k_0} (\vec{h} \cdot \nabla \log \mu + \vec{\nabla} \cdot \vec{h}) \quad (3.11d)$$

No limite $k_0 \rightarrow \infty$ obtemos de (3.11)

$$\vec{\nabla}\psi \times \vec{h} + \epsilon \vec{e} = 0 \quad (3.12a)$$

$$\vec{\nabla}\psi \times \vec{e} - \mu \vec{h} = 0 \quad (3.12b)$$

$$\vec{e} \cdot \vec{\nabla}\psi = 0 \quad (3.13a)$$

$$\vec{h} \cdot \vec{\nabla}\psi = 0 \quad (3.13b)$$

Somente as equações (3.12) são interessantes, já que (3.13a) e (3.13b) podem ser obtidas daquelas por multiplicação escalar com $\vec{\nabla}\psi$. O sistema (3.12) para as seis incógnitas \vec{e} e \vec{h} admite solução não-trivial somente se o determinante se anular. Substituindo o valor de \vec{h} de (3.12b) em (3.12a) obtemos

$$\frac{1}{\mu} [(\vec{e} \cdot \vec{\nabla}\psi) \vec{\nabla}\psi - \vec{e} (\vec{\nabla}\psi)^2] + \epsilon \vec{e} = 0 \quad (3.14)$$

Usando (3.13a) resulta

$$(\vec{\nabla}\psi)^2 = n^2(x, y, z) = \mu \epsilon$$

que é a equação (3.5a).

Podemos ainda calcular as médias temporais das densidades de energia elétrica $\langle u_e \rangle$ e magnética $\langle u_m \rangle$

$$\langle u_e \rangle = \frac{\epsilon}{16\pi} \vec{e} \cdot \vec{e}^*, \quad \langle u_m \rangle = \frac{\mu}{16\pi} \vec{h} \cdot \vec{h}^* \quad (3.15)$$

onde \vec{e}^* e \vec{h}^* são os complexos conjugados de \vec{e} e \vec{h} . Usando \vec{e} e \vec{h} tiradas de (3.12a) e (3.12b) respectivamente, resulta:

$$\langle u_e \rangle = \langle u_m \rangle = \frac{1}{16\pi} (\vec{e} \times \vec{h}) \cdot \vec{\nabla}\psi \quad (3.16)$$

A média temporal do vetor de Poynting $\langle \vec{S} \rangle$, é usando (3.10) e (3.12b)

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{c}{8\pi} \text{Re} (\vec{e} \times \vec{h}^*) = \frac{c}{8\pi\mu} \{ (\vec{e} \cdot \vec{e}^*) \vec{\nabla}\psi - (\vec{e} \cdot \vec{\nabla}\psi) \vec{e}^* \} \quad (3.17)$$

ou com (3.13a) e (3.15)

$$\langle \vec{S} \rangle = \frac{2c}{n^2} \langle u_e \rangle \vec{\nabla}\psi = \frac{c}{n^2} (\langle u_e \rangle + \langle u_m \rangle) \vec{\nabla}\psi \quad (3.18)$$

De (3.5a) segue-se que $\vec{\nabla}\psi/n$ é um vetor unitário

$$\vec{s} \equiv \frac{\vec{\nabla}\psi}{n} = \frac{\vec{\nabla}\psi}{|\vec{\nabla}\psi|} \quad (3.19)$$

Se usarmos a velocidade v da luz no meio $v = c/n$ resulta para (3.18)

$$\langle \vec{S} \rangle = v \langle u \rangle \vec{s} \quad (3.20)$$

onde $\langle u \rangle = \langle u_e \rangle + \langle u_m \rangle$ é a densidade de energia média total. A equação (3.20) diz que a média do vetor de Poynting tem a direção da normal às frentes de onda e é igual ao produto da densidade média de energia e da velocidade v . Vemos que a energia é transportada ao longo dos raios com a velocidade v .

Vamos ainda escrever a equação dos raios. Seja $\vec{r}(s)$ o vetor posição de um ponto P num raio considerado com função do comprimento de arco s do arco, então $\vec{s} = d\vec{r}/ds$ é um vetor unitário na direção do raio que, por sua vez, é dado por $\vec{\nabla}\psi/n$ ou seja

$$n \frac{d\vec{r}}{ds} = \vec{\nabla}\psi \quad (3.21)$$

que é a equação procurada. Vemos de (3.12) que os campos elétrico e magnético \vec{e} e \vec{h} são perpendiculares ao raio em todos os pontos.

A equação fundamental para os raios (3.21) descreve o comportamento destes através do eiconal S . Podemos, no entanto, deduzir uma equação diferencial que governa a propagação dos raios, usando somente o

índice de refração $n(x, y, z)$. De fato, derivando (3.21) em relação a s obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{d}{ds} \left(n \frac{d\vec{r}}{ds} \right) &= \frac{d}{ds} (\vec{\nabla}\psi) \equiv \frac{d}{ds} \left(\frac{d\psi}{d\vec{r}} \right) = \\ &= \frac{d\vec{r}}{ds} \cdot \frac{d}{d\vec{r}} \left(\frac{d\psi}{d\vec{r}} \right) \equiv \left(\frac{d\vec{r}}{ds} \cdot \vec{\nabla} \right) (\vec{\nabla}\psi) \quad (2.21) = \frac{1}{n} (\vec{\nabla}\psi \cdot \vec{\nabla}) (\vec{\nabla}\psi) = \\ &= \frac{1}{2n} \vec{\nabla} [(\vec{\nabla}\psi)^2] = \frac{1}{2n} \vec{\nabla}(n^2) \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{d\vec{r}}{ds} \right) = \vec{\nabla}n \quad (3.22)$$

que é a forma vetorial da equação diferencial para os raios. Em particular, se o meio for homogêneo, n é constante e (3.22) dá

$$\frac{d^2\vec{r}}{ds^2} = 0 \quad (3.23)$$

ou seja, $\vec{r} = \vec{a}s + \vec{b}$ e os raios são retilíneos.

A ótica geométrica desenvolvida até aqui se restringiu a estudar as consequências da equação (3.5a) e abrange a área tradicionalmente chamada de ótica geométrica, i.e., quando o comprimento de onda for suficientemente pequeno, o transporte de energia pode ser representado por meio de um modelo hidrodinâmico, especificado pela função escalar ψ . Poderíamos, no entanto, obter certas propriedades geométricas das amplitudes \vec{e} e \vec{h} a partir das equações (3.12). Como, no entanto, propriedades de polarização não são importantes para compreender o nascimento da mecânica ondulatória, elas não serão consideradas aqui.

Para ressaltar a analogia entre ótica geométrica e mecânica, vamos complementar a formulação diferencial, usada até aqui, por uma descrição integral, isto é, por meio de princípios variacionais. Mostremos que o princípio de Fermat é equivalente à equação (3.22). Este princípio, também conhecido sob o nome de princípio do caminho ótico (dado por $\int n ds$) mínimo, pode ser enunciado da seguinte maneira: a trajetória real entre dois pontos P_1 e P_2 , seguida por um raio luminoso, é tal que

$$\int_{P_1}^{P_2} n ds$$

é estacionário, ou seja,

$$\delta \int_{P_1}^{P_2} n ds = 0 \quad (3.24)$$

Como

$$ds = \left(\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 + 1 \right)^{1/2} dz ,$$

a equação acima pode ser escrita

$$\delta \int_{z_1}^{z_2} n(x, y, z) \sqrt{\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 + 1} dz = 0 \quad (3.25)$$

Para mostrar que (3.25) implica (3.22), lembremos que as equações de Euler, que são condições necessárias para que

$$\delta \int F(x, y, z) dz = 0$$

são

$$\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{d}{dz} \frac{\partial F}{\partial \left(\frac{dx}{dz} \right)} = 0, \quad \frac{\partial F}{\partial y} - \frac{d}{dz} \frac{\partial F}{\partial \left(\frac{dy}{dz} \right)} = 0 \quad (3.26)$$

Aplicando (3.26) ao caso (3.25) obtemos

$$\frac{\partial n}{\partial x} \left[\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} - \frac{d}{dz} \left[\frac{n \frac{dx}{dz}}{\left[\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 + 1 \right]^{1/2}} \right] = 0 \quad (3.27a)$$

$$\frac{\partial n}{\partial y} \left[\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 + 1 \right]^{1/2} - \frac{d}{dz} \left[\frac{n \frac{dy}{dz}}{\left[\left(\frac{dx}{dz} \right)^2 + \left(\frac{dy}{dz} \right)^2 + 1 \right]^{1/2}} \right] = 0 \quad (3.27b)$$

ou seja,

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dx}{ds} \right) = \frac{\partial n}{\partial x} \quad (3.28a)$$

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dy}{ds} \right) = \frac{\partial n}{\partial y} \quad (3.28b)$$

enquanto que a equação

$$\frac{d}{ds} \left(n \frac{dz}{ds} \right) = \frac{\partial n}{\partial z} \quad (3.28c)$$

segue-se da identidade

$$\left(\frac{dx}{ds} \right)^2 + \left(\frac{dy}{ds} \right)^2 + \left(\frac{dz}{ds} \right)^2 = 1 .$$

As equações (3.28) são idênticas à equação (3.22) . Concluindo, podemos dizer que o conteúdo tradicional da Ótica geométrica é equivalente ao princípio de Fermat. Este ainda pode ser formulado de uma maneira elegante, introduzindo um espaço não-euclidiano com elemento de linha dado por

$$dl = nds = n(dx^2 + dy^2 + dz^2)^{1/2} \quad (3.29)$$

(3.24) é equivalente a dizer que *os raios luminosos se propagam ao longo de geodésicas no espaço acima*. Veremos que Schrödinger lançou mão de um espaço euclidiano semelhante.

4. O NASCIMENTO DA MECÂNICA ONDULATÓRIA

A analogia *Ótica geométrica-mecânica de uma partícula* pode ser revelada comparando de um lado o princípio de Fermat (3.24)

$$\delta \int nds = 0 \quad (4.1)$$

com o princípio de Hamilton para o caso em que a energia é conservada (2.10) (a luz é monocromática):

$$\begin{aligned} \delta \int T dt &= \delta \int \frac{1}{2} m \dot{v}^2 dt = \delta \int \frac{1}{2} m |\dot{\vec{v}}|^2 \frac{ds}{|\dot{\vec{v}}|} = \delta \int \frac{m}{2} |\dot{\vec{v}}| ds = \\ &= \delta \int \frac{m}{2} \sqrt{E - V(x, y, z)} ds = 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

De (4.1) e (4.2) concluímos que *ma partícula sob ação de um potencial $V(x, y, z)$, move-se no espaço segundo a mesma trajetória que um raio de luz (monocromática) num meio de índice de refração $n(x, y, z)$ proporcional a $\sqrt{E - V(x, y, z)}$* . Afim de desenvolver um pouco mais esta analogia, comparamos a equação de Hamilton-Jacobi (2.16) para uma partícula

$$\frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V(x, y, z) = E$$

ou

$$(\vec{\nabla}S)^2 = 2m(E-V) \quad (4.3)$$

com a equação (3.5a)

$$(\vec{\nabla}\psi)^2 = n^2 \quad (4.4)$$

Consequentemente, identificamos o eiconal ψ com a ação S :

$$\psi \longrightarrow S \quad (4.5a)$$

$$n^2 \longrightarrow 2m(E-V) \quad (4.5b)$$

de modo que *as frentes de onda correspondem a superfícies de ação S constantes*. Na teoria de Hamilton-Jacobi o momento \vec{p} é definido por

$$\vec{p} = \vec{\nabla}S \quad (4.6)$$

e comparando esta equação com a equação dos raios (3.21) resulta a correspondência

$$n\vec{s} = n \frac{d\vec{r}}{ds} \longrightarrow \vec{p} \quad (4.7)$$

Enquanto na mecânica dizemos que a partícula se propaga perpendicularmente às superfícies de ação constante (equação (4.6)) em Ótica geométrica os raios são ortogonais às frentes de onda. Notemos ainda que as flechas na equação (4.5) não podem ser substituídas por igualdades, já que ψ tem dimensão $1/k_0 = cT/2\pi$ enquanto S tem dimensão de ação.

Ressaltemos, no entanto, uma diferença fundamental entre as duas formulações. Enquanto a relação $v = c/n$ mostra que, *na ótica, a velocidade de fase é inversamente proporcional ao índice de refração*, concluímos de (4.7) que *a velocidade da partícula é diretamente proporcional a n* . Em particular, no vácuo ($n=1$), a velocidade de fase das frentes de onda é igual a c , enquanto que $v=c$ corresponde a uma força nula e a trajetória da partícula é uma reta com velocidade arbitrária. (Dependendo das condições iniciais pode, inclusive, ser nula. Neste caso a reta se degenera num ponto).

Até aqui nossa analogia Ótico-mecânica envolveu somente uma partícula. Ela foi desenvolvida de uma maneira mais reveladora por Schrodinger⁴, lançando mão do espaço não-euclideo ao qual aludimos no final do capítulo 3.

Consideremos o problema geral da mecânica de sistemas conservativos, descrita pela equação de Hamilton-Jacobi (2.18)

$$\frac{\partial W}{\partial t} + T(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_j}) + V(q_i) = 0 \quad (4.8)$$

onde W a função principal de Hamilton, é a integral $\int(T-V)dt$ ao longo da trajetória (no espaço de configuração!) do sistema considerado como função da posição final e do tempo. Como a energia total E é constante podemos introduzir a ação $S(q_i)$ pondo

$$W = -Et + S(q_i) \quad (4.9)$$

Levando (4.9) na equação (4.8), resulta

$$2T(q_i, \frac{\partial W}{\partial q_i}) = 2(E-V) \quad (4.10)$$

Já que $\partial W/\partial q_i = \partial S/\partial q_i$ podemos conservar W em (4.10).

Consideremos agora o espaço de configuração como não-euclidiano¹³, o que permitirá estender nossa analogia a sistemas mecânicos; a correspondência operará no espaço de configuração do sistema e também faremos ótica geométrica neste espaço.

Seguindo Schrödinger⁴ introduzamos o seguinte elemento de linha não-euclidiano

$$ds^2 = 2\bar{T}(q^i, \dot{q}^j) dt^2 \quad (4.11)$$

Como teremos que distinguir cuidadosamente as grandezas covariantes de contravariantes, escrevemos o vetor contravariante dq^i com índice superior em conformidade com a notação usual. Indicamos ainda por \bar{T} a energia cinética escrita em função das coordenadas e velocidades generalizadas. Já que T é quadrático em \dot{q} (4.11) é uma forma quadrática em dq^i . Uma representação suficientemente geral para \bar{T} é

$$2\bar{T}(q^i, \dot{q}^j) = \sum_{j=1}^n h_j^2(q^i) (\dot{q}^j)^2 \quad (4.12)$$

de modo que podemos escrever (4.11) sob a forma

$$ds^2 = g_{ij} dq^i dq^j \quad (4.13)$$

com

$$g_{ij} = \delta_{ij} h_j^2 \quad (4.14)$$

\dot{q}^j é um vetor contravariante, enquanto $p_k = \partial W / \partial \dot{q}^k$ é sua representação covariante. A relação entre os dois é

$$p_k = g_{ki} \dot{q}^i = \delta_{ki} h_k^2 \dot{q}^i = h_k^2 \dot{q}^k \quad (4.15)$$

onde usamos (4.14). Podemos usar também (2.2), ou seja

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^i} = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}^i} = h_i^2 \dot{q}^i$$

A energia cinética escrita em termos de p_k é

$$\sum_{j=1}^n h_j^2 \dot{q}^j{}^2 = \sum_{j=1}^n h_j^2 h_j^{-4} p_j^2 = \sum_{j=1}^n h_j^{-2} p_j^2 \equiv 2T(q^i, p_k) \quad (4.16)$$

O gradiente de uma função escalar W é o vetor covariante de componentes

$$\nabla_k W = \left(\frac{1}{h_1} \frac{\partial W}{\partial q^1}, \dots, \frac{1}{h_n} \frac{\partial W}{\partial q^n} \right) \quad (4.17)$$

(Lembre que $dW = \nabla_k W ds^k$ e que $ds^k = (h_1 dq^1, \dots, h_n dq^n)$.) O quadrado de (4.17) é

$$(\vec{\nabla} W)^2 \equiv \nabla_k W \nabla_i W g^{ki} \quad (4.18)$$

onde g^{ki} é definido por

$$g^{ki} g_{ij} = \delta_j^k \quad (4.19)$$

Resulta

$$(\vec{\nabla} W)^2 = \sum_{j=1}^n h_j^{-2} p_j^2 = 2T(q^i, p_k) \quad (4.20)$$

Com (4.20) podemos escrever a equação de Hamilton-Jacobi da seguinte forma

$$(\vec{\nabla} W)^2 = 2(E - V) \quad (4.21)$$

Qual é a velocidade de propagação das superfícies $W = cte$?

De (4.9) temos

$$-Edt + dS = 0$$

ou

$$\frac{dq^i}{dt} = E \frac{\partial q^i}{\partial W}$$

De (4.21) segue-se que a velocidade v de propagação das superfícies $W = cte$

$$v = \frac{E}{\sqrt{2(E-V)}} \quad (4.22)$$

Devido à equação $p_k = \partial W / \partial q^k$ as trajetórias do sistema são ortogonais às superfícies $W = cte$.

Como no caso de uma partícula podemos ver através do princípio de Fermat, que raios luminosos no espaço de configuração se propagam ao longo das mesmas trajetórias, desde que o índice de refração $n(\vec{q})$ seja proporcional a m . De fato, o princípio de Hamilton implica o princípio de Fermat

$$\frac{1}{E} \delta \int_{t_1}^{t_2} 2T dt = \delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{2T}{E} dt = \delta \int \frac{\sqrt{2T}}{E} ds = \delta \int \frac{\sqrt{2(E-V)}}{E} ds = \delta \int \frac{ds}{v} \quad (4.23)$$

onde usamos $ds = \sqrt{2T} dt$. (4.23) é equivalente ao princípio de Fermat, já que $1/v = n/c$. Novamente fica evidente a discrepância entre a velocidade de fase v (4.22) e a velocidade u do ponto representativo do sistema mecânico no espaço q , obtido de (4.11)

$$u = \frac{ds}{dt} = \sqrt{2T} = \sqrt{2(E-V)} \quad (4.24)$$

ou seja, $u = 1/v$. Fica, pois, claro que o paralelismo entre Ótica e mecânica não é muito estreito. Não aparece nenhum dos conceitos importantes da ótica, como comprimento de onda, amplitude, frequência e a forma da onda: são noções que não possuem analogia na mecânica. W representa a fase das ondas, enquanto o significado das outras noções permanece obscuro.

A essas alturas Schrödinger observa o seguinte. Se todo este paralelismo serve somente para ajudar a nossa intuição, a falta de uma analogia mais estreita não nos inquietaria. A mecânica clássica no espaço q teria como análogo uma ótica física bastante primitiva. Esta última fracassa quando o comprimento de onda da luz não for desprezível em relação a todas as dimensões da trajetória. Podemos, no entanto, abraçar outro ponto de vista, incentivados pelos resultados surpreendentes que o desenvolvimento de uma mecânica ondulatória proporciona: talvez o fracasso da ótica geométrica, em situações em que o comprimento de onda da luz não pode ser desprezado, tenha como analogia o fracasso da mecânica clássica no tratamento de fenômenos atômicos, onde os elétrons percorrem trajetórias com dimensões muito pequenas e curvaturas grandes. Neste caso será preciso procurar uma mecânica ondulatória e o caminho mais natural para isto é o desenvolvimento da imagem hamiltoniana da mecânica clássica. Façamos então a hipótese que o desenvolvimento correto da analogia precedente nos conduza a considerar as ondas da mecânica ondulatória como puramente senoidais.

Esta hipótese é a mais simples, mas é arbitrária. A fase do seno será, naturalmente, indentificada com W . A arbitrariedade consiste em dizer que a fase do seno é uma função linear de W . Como o argumento do seno deve ser adimensional, enquanto W tem dimensão de ação, introduzimos uma constante universal, i.e., independente não só da energia como também do sistema considerado. Podemos escrever esta constante na forma $2\pi/\hbar$. O fator dependente do tempo será então da forma

$$\text{sen}\left(\frac{2\pi}{\hbar} W + \text{const}\right) \stackrel{(4.9)}{=} \text{sen}\left(-\frac{2\pi}{\hbar} Et + \frac{2\pi}{\hbar} S(q^i) + \text{const}\right) \quad (4.25)$$

de onde tiramos a frequência das ondas

$$\nu = \frac{E}{\hbar} \quad (4.26)$$

de uma maneira perfeitamente natural. De poder da frequência, podemos determinar o comprimento de onda usando (4.22)

$$\lambda = \frac{v}{\nu} = \frac{\hbar}{\sqrt{2(E-V)}} \quad (4.27)$$

A relação entre a velocidade de fase e a frequência

$$v = \frac{h \nu}{\sqrt{2(h\nu - V)}} \quad (4.28)$$

dá a lei de dispersão destas ondas. Daí, seguindo M. de Broglie podemos calcular a velocidade de grupo v_g

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{d\nu}{d(\lambda^{-1})}$$

De (4.27) temos

$$d(\lambda^{-1})/d\nu = \frac{d}{d\nu} [\sqrt{2(h\nu - V)}/h] = \frac{1}{\sqrt{2(E-V)}}$$

ou seja,

$$v_g = \sqrt{2(E - V)} \quad (4.29)$$

que é, por comparação com a equação (4.24), exatamente a velocidade do ponto representativo do sistema no espaço q . No caso de uma partícula, temos ainda

$$u = \frac{ds}{dt} = \sqrt{m} \frac{dq}{dt} = \sqrt{2(E-V)} = p/\sqrt{m}$$

Comparando com (4.27) resulta (lembre que $ds = \sqrt{m} dq$. Em (4.30) voltamos a medir λ em centímetros:)

$$\lambda = \frac{h}{p} \quad (4.30)$$

que é a relação entre *comprimento de onda* e o momento obtido por L. de Broglie. Neste ponto Schrödinger⁴ discute a construção de um pacote de ondas no espaço q por superposição de ondas planas monocromáticas. Esta discussão pode ser resumida da seguinte maneira. A menos da constante \hbar^{-1} , \bar{W} representa a fase da função de onda. Suponhamos que temos à nossa disposição não apenas um Único sistema de ondas, mas um conjunto contínuo, definido pela variação de certos parâmetros α_i . Neste caso, as condições $\partial \bar{W} / \partial \alpha_i = cte$ significam que os sistemas de ondas vizinhos estejam em fase. As equações $\partial \bar{W} / \partial \alpha_i = cte$ determinam, então, o lugar geométrico de concordância de fase, que será um ponto para um número suficientemente grande de equações. Lembrando as equações (2.20), (2.24), (2.25) e identificando as constantes α_i com as do mesmo nome da equação (2.19), chegamos à conclusão

são que o *lugar geométrico onde um certo conjunto de sistemas de onda dependentes de n parâmetros está em fase, se move segundo as mesmas leis que o ponto representado no espaço q do sistema clássico correspondente.*

Prosseguindo a elaboração da teoria ondulatória, Schrödinger é levado a atribuir um significado físico à propagação daquelas ondas com um concomitante abandono de conceitos mecânicos. É natural, então, substituir a equação de Hamilton-Jacobi por uma equação de ondas no espaço q .

Já conhecemos a *velocidade de fase* das ondas, dada pela equação (4.22). A equação de propagação *mais simples* que se pode escrever será

$$\Delta\phi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (4.31)$$

onde Δ é o Laplaceano e ϕ uma certa *função de onda*. Para um sistema com mais de uma partícula ϕ será função de pelo menos 6 variáveis, e.g. $\vec{r}(1)$ e $\vec{r}(2)$ para duas partículas. Este fato causou grande dor de cabeça a Schrödinger (e outros) devido à dificuldade de interpretar um fenômeno ondulatório num espaço de 6 ou mais dimensões. Usando (4.22) na equação acima, obtemos:

$$\Delta\phi - \frac{2(E - V)}{E^2} \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} = 0 \quad (4.32)$$

Mas esta não pode ser a equação correta, pelo menos por dois motivos:

i) como as ondas são monocromáticas (i.e., dependem do tempo na forma $e^{2\pi i \nu t}$) não podemos permitir o aparecimento simultâneo da constante E e de derivadas temporais;

ii) se considerarmos dois sistemas isolados com energias E_1 e E_2 , a energia do sistema composto será $E = E_1 + E_2$. Se ϕ_1 e ϕ_2 são as funções de ondas dos sistemas "1" e "2", elas devem satisfazer a equação (4.32) com energia E_1 e E_2 respectivamente. Mas então $\phi = \phi_1 \phi_2$ não satisfará a equação (4.32) com $E = E_1 + E_2$ devido à maneira não linear com que E entra na equação¹⁵

Usamos então a equação (4.25) para eliminar as derivadas temporais de (4.32), obtendo

$$\frac{\hbar^2}{2} \Delta \phi + (E-V) \phi = 0 \quad (4.33)$$

que é a famosa *equação de Schrödinger para processos estacionários*. Note que o Laplaceano deve ser calculado com a métrica não-euclidiana (4.13). Para um partícula obtemos

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} (\vec{\nabla})^2 + V \right\} \phi = E\phi \quad (4.34)$$

Parece um passo trivial estender esta equação para processos não-estacionários, com dependência temporal arbitrária. Já que, no caso estacionário, a dependência temporal é do tipo $e^{\pm iEt/\hbar}$ temos:

$$E\phi = \pm i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} \quad (4.35)$$

Eliminado $E\phi$ da equação (4.33) obtemos (o sinal oposto dá a equação complexo conjugada)

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V \right\} \phi(q^i, t) = i\hbar \frac{\partial \phi(q^i, t)}{\partial t} \quad (4.36)$$

que é a *equação de Schrödinger para fenômenos com dependência temporal arbitrária*. No entanto, Schrödinger levou muito tempo para descobrir esta generalização simples. O problema é que a equação (4.36) é a *primeira equação da Física com coeficientes imaginários*. Em consequência ϕ é necessariamente uma função complexa e não pode descrever um fenômeno ondulatório real *acompanhando*, por exemplo, um eletron no espaço real. ϕ também satisfaz a equação real

$$\left\{ \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V + i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V - i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \right\} \phi = 0 \quad (4.37)$$

que é a equação da *placa elástica*, e durante alguns meses Schrödinger pensou que (4.37) fosse a equação correta.

Esperamos que o paciente leitor tenha tirado algum proveito chegando até aqui. Antes de terminar gostaríamos de expor uma outra maneira de *fazer ótica física no espaço q* devida a Feynman¹⁶.

Para isso, recordamos a equação de Hamilton-Jacobi (4.21) e seu análogo Ótico, que é a equação (3.5a). O método para obter uma solução geral destas equações, descrito logo após a equação (2.7), nada mais é do

que o *princípio de Huyghens* em sua formulação primitiva. Lembremos que a formulação rigorosa é de Kirchoff¹⁷ e somente por meio de hipóteses aproximativas sobre as condições de contorno chegamos ao princípio de Huyghens. Este último permite a determinação dos campos eletromagnéticos em qualquer ponto do espaço, a partir do conhecimento dos campos numa superfície ξ . Como o conhecimento de derivadas primeiras não é necessário nesta construção, a propagação é do tipo *difusão*, enquanto a formulação de Kirchoff é equivalente a uma equação de onda, envolvendo derivadas segundas no tempo. Notando que a equação de Schrödinger é de primeira ordem em $\partial/\partial t$, vamos *construir uma Ótica no espaço q utilizando o princípio de Huyghens primitivo*, que diz: *considere todos os pontos de uma frente de onda inicial $\phi(q_{i_1})$ como centros emissores de onda secundárias. A nova frente de onda é a envoltória das ondas secundárias.* Já sabemos que a fase das ondas é dada por

$$\frac{i}{\hbar} \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt .$$

Somando sobre todos os pontos da frente inicial com a fase apropriada, obtemos

$$\phi(q_{i_2}) \approx \int e^{i/\hbar \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt} \phi(q_{i_1}) dq_{i_1} \quad (4.38)$$

onde a integração

$$\int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}) dt$$

é feita ao longo da trajetória real. A generalização quântica de (4.38) devida a Feynman, consiste em dizer que devemos considerar em (4.38) não somente a trajetória real que satisfaz as equações de movimento clássicas, mas *devemos somar sobre todas as trajetórias, ligando (q_{i_1}, t_1) com (q_{i_2}, t_2) ou seja*

$$\phi(q_{i_2}, t_2) = \frac{1}{N} \sum_{\text{trajet.}} \int e^{i/\hbar \int_{t_1}^{t_2} L dt} \phi(q_{i_1}, t_1) dq_{i_1} \quad (4.39)$$

onde N é um fator de normalização. Note que, no limite clássico em que $\hbar \rightarrow 0$, o expoente oscilará violentamente, as contribuições à integral em dq_{i_1} cancelando-se, a menos que o expoente seja estacionário, isto é, que

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} L dt = 0,$$

que é a equação (2.13). Uma das vantagens da formulação de Feynman é a simplicidade com que se obtém o limite clássico. A definição da soma (integral) sobre as trajetórias é um problema matemático até hoje em aberto. A equivalência (a menos de *tecnicidades matemáticas*) entre a formulação usual e a de Feynman é demonstrada na Ref.(16).

É um prazer agradecer as animadas discussões sobre o assunto com os meus colegas R.C.T. da Costa, L.G. de Freitas e R.L.Lobo e Silva F?.

REFERÊNCIAS E NOTAS DE RODAPÉ

1. S. Tomonaga, *Quantum mechanics*, Vol. 1, North Holland Publ. Company, Amsterdím 1968, pg. 204. Veja também M. Jammer, *The conceptual development of quantum mechanics*, McGraw Hill Book Comp., 1966. Esta obra é bastante fiel do ponto de vista histórico, mas não foi escrita com finalidades didáticas.
2. E. Schrödinger, *Annalen der Physik*, 79, 361/376 (1926); recebido para publicação em 27 de janeiro de 1926.
3. Veja, por exemplo: L. Schiff, *Quantum mechanics* McGraw Hill Book Comp.; A. Messiah, *Mecanique Quantique*, Dunod, Paris, L.D.Landau & E.M.Lifschitz *Quantum Mechanics*, Pergamon Press.
4. E. Schrödinger, *Annalen der Physik*, 79, 489-527 (1926); recebido em 23 de fevereiro de 1926. Em 1933 apareceu uma tradução francesa dos trabalhos de Schrödinger (*Memoires sur la mecanique ondulatoire*, Paris, Librairie F. Alcan, 1933), com comentários do autor.
5. Além dos livros textos usuais (e.g. H.Goldstein *Classical Mechanics*, Addison-Wesley Publ. Comp. (1959); L.D. Landau e E.M.Lifschitz, *Mechanics*, Pergamon Press; E.J. Saletan & A.H. Cromer, *Theoretical Mechanics*, J. Wiley Incs., (1971), recomendamos o excelente livrinho de W. Yourgrau & S. Mandelstam *Variational principles in dynamics and quantum theory*, Sir I. Pitman & Sons Ltd, 3a. edição, 1968.
6. Veja, por exemplo, Max Born, *Atomic Physics*, Blackie & Son Ltd.London.

7. W.R. Hamilton, *Theory of Systems of Rays*, Trans. Royal Irish Academy, 15, 69 (1828). Uma referência mais acessível seria Ref. 8.

8. M. Born & E. Wolf, *Principles of Optics*, Pergamon Press 1959.

9. O número de uma equação em cima de uma igualdade quer dizer que a equação foi usada para estabelecer a igualdade. Assim

$$(2.1)$$

$$A = B$$

quer dizer que a equação (2.1) foi usada para transformar A em B.

10. Isto também pode ser visto da seguinte maneira: parametrizemos as variações $\delta q_i(t)$ para um parâmetro (ou vários parâmetros) α , tal que,

$$q_i(t, \alpha) = \begin{cases} q_i(t) & \text{para } \alpha = 0 : \text{ a trajetória real} \\ \tilde{q}_i(t) & \text{para } \alpha \text{ qualquer: a trajetória virtual} \end{cases}$$

$$\text{Então } \delta q_i(t, \alpha) = \frac{\partial q_i(t, \alpha)}{\partial \alpha} d\alpha \quad \text{e} \quad dq_i(t, \alpha) = \frac{\partial q_i(t, \alpha)}{\partial t} dt$$

$$\delta(dq_i) = \delta\left(\frac{\partial q_i}{\partial t} dt\right) = \frac{\partial^2 q_i}{\partial t \partial \alpha} dt d\alpha = \frac{\partial^2 q_i}{\partial \alpha \partial t} d\alpha dt = d(\partial q_i)$$

$$\text{contanto que } \frac{\partial^2 q_i}{\partial \alpha \partial t} = \frac{\partial^2 q_i}{\partial t \partial \alpha}$$

Diferenciabilidade até segunda ordem será sempre admitida como válida.

$$11. \int L dt = \int_{t_1}^{t_2} L[q_i(t), \dot{q}_j(t)] dt$$

12. Veja, por exemplo, Ref. (8).

13. Esta formulação remonta a H. Hertz e F. Klein.

14. Os trabalhos de M. de Broglie, que inspiraram Schrödinger, podem ser encontrados em *Selected papers on wave mechanics*, por Louis de Broglie and Leon Brillouin, Blackie & Son Ltd., 1929.

15. Esta observação é devida a Einstein (que ficou sabendo dos trabalhos de Schrödinger através de Planck) que, inicialmente, pensou que Schrödinger tivesse usado a equação (4.32). Para ilustrar sua objeção, Einstein escreveu uma equação que não padecia deste defeito — era a equação (4.33). Veja *Briefe zur Wellenmechanik - Schrödinger, Planck, Einstein, Lorentz*, edita-

do por K. Przibram, (Springer, Vienna, 1964), pg.21. Versão inglesa: "Letters on Wave Mechanics", traduzido por M.J.Klein, Vision Press Ltd. 1967.

16. Veja o livro de Yourgrau e Mandelstam (Ref. (5)) e R.P. Feynman and A. R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw Hill Book Comp. (1965).

17. Veja e.g. Ref. (8), pg. 374.