

INSTITUTO DE FILOSOFIA E CIENCIAS HUMANAS

DEPARTAMENTO DE FILOSOFIA

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

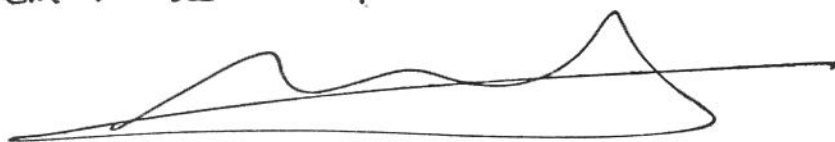
TESE DE MESTRADO

A RELAÇÃO ENTRE A MECÂNICA QUÂNTICA E A MECÂNICA CLÁSSICA

Aluno : José Emílio Maiorino

Orientador : Prof. Steven Richard Douglas French

*Esta é a versão final da tese defendida em
1 de dezembro de 1988.*

A handwritten signature in black ink, consisting of a series of loops and a long horizontal stroke at the end.

Prof. Steven French

AGRADECIMENTOS

Seria impossível fazer aqui uma lista das pessoas envolvidas direta e indiretamente na composição e finalização deste trabalho; algumas devem contudo ser mencionadas por sua participação mais próxima e ativa.

Em primeiro lugar, minha família (inclusive a Tata), cujo apoio e compreensão nunca faltaram desde o início de minha graduação, estendendo-se durante todo o período do mestrado.

Agradeço também a meus amigos e companheiros de república Fernando, Francisco e Nádia, com quem convivi nestes quatro anos, e a quem devo tanta ajuda, amizade e carinho. Também devo mencionar meus amigos Márcio, Glacir e Rose, pelas inumeráveis discussões ético-filosóficas, mais almoços, jantares, caronas e dinheiro emprestado.

Também quero agradecer a ajuda recebida dos funcionários do CLE e do IFCH, em particular da Secretaria de Pós-Graduação e do Departamento de Filosofia, e o CNPq e a CAPES pelo apoio financeiro.

Finalmente, a pessoa que acompanhou cada passo deste trabalho, e cuja experiência, amizade, confiança e paciência (muita) foram essenciais para levá-lo a bom termo. Trata-se naturalmente de meu orientador, Steven, a quem devo muito mais que uma orientação de tese.

A todas estas pessoas a minha sincera gratidão. E visto que uma tese geralmente tem uma dedicatória, então é a elas que escolho dedicar a minha: sem elas nada disso teria sido possível.

Campinas, 15 de novembro de 1988

INTRODUÇÃO

Este trabalho é dedicado a uma análise das formas de relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. Nos dois primeiros capítulos apresentamos quatro relações estabelecidas no período de formulação das teorias quânticas antiga e moderna. No capítulo 3 estudamos uma série de relações, de tipos diferentes, estabelecidas pelos pesquisadores desta área desde os anos trinta até hoje. Finalmente, no capítulo 4 analisamos algumas concepções antigas e modernas sobre o conceito filosófico de redução interteórica, para em seguida examinar deste novo ponto de vista os casos de relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica apresentados nos capítulos anteriores.

Todos estes resultados pressupõem o conhecimento do 'problema da medida' da mecânica quântica, que é de fato o ponto de partida para as conclusões a respeito da redução da mecânica quântica à mecânica clássica. Nosso resultado principal é que, apesar da existência de uma série de relações entre as duas teorias, nenhuma delas estabelece uma relação global entre ambas no que diz respeito à recuperação das predições clássicas pela mecânica quântica não-relativística, exatamente devido aos problemas interpretacionais desta teoria e, em particular, ao problema da medida.

Um pequeno glossário de termos matemáticos encontra-se no Apêndice 1; esses termos serão utilizados ao longo de toda a tese, mas sobretudo no cap. 3. As citações em *itálico* são sempre dos próprios autores, exceto quando for dito o contrário. Na bibliografia e no texto os volumes dos *Collected Works* de Niels Bohr são referido como CW1, CW2, etc. Qualquer erro encontrado é de inteira responsabilidade deste autor.

Campinas, 15 de novembro de 1988

10

*** INDICE ***

Agradecimentos	1
Introdução	11
Capítulo 1 : A Mecânica Clássica e a Velha Teoria Quântica	
1.1 - O Princípio Adiabático	1
1.2 - O Princípio de Correspondência	12
Capítulo 2 : A Mecânica Clássica e a Nova Teoria Quântica	
2.1 - A Filosofia da Complementaridade	25
2.2 - Dirac e a Mecânica de Matrizes	40
Capítulo 3 : Relações entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Clássica	
3.1 - Introdução	57
3.2 - O Limite Clássico para h finito	65
3.3 - O Limite $h \rightarrow 0$: Casos Particulares	77
3.4 - As Regras de Quantização	86
3.5 - O Limite $h=0$: Caso geral	101
Capítulo 4 : Redução entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Clássica ?	
4.1 - Introdução	119
4.2 - A Visão Recebida	124
4.3 - A Nova Visão da Redução	135
4.4 - Análise dos Resultados Obtidos	147
Apêndice I : Glossário	159
Apêndice II : A Prova de Bruer	162
Referências	165

Falta por as páginas iniciais de cada capítulo

1 - A Mecânica Clássica e a Velha Teoria Quântica

1.1 - O PRINCÍPIO ADIABÁTICO

Para a compreensão do trabalho de Paul Ehrenfest, bem como do processo que o levou à formulação do Princípio Adiabático, devemos ter em mente a situação da física à época de sua formação. O final do século XIX e o início do XX viram o surgimento de duas novas teorias físicas, a teoria eletromagnética e a física estatística, desenvolvidas por Maxwell e Boltzmann. Destas teorias, e de sua união, surgiram os trabalhos que dariam origem posteriormente tanto à relatividade restrita (na formulação de Einstein), quanto à mecânica quântica. Neste último caso o problema da radiação de corpo negro serviu como ponto de partida de uma revisão da física clássica que constitui, sem dúvida alguma, a mais importante revolução da história da ciência.

A solução desse problema proposta por Max Planck no ano de 1900¹ baseava-se na hipótese da quantização da energia da

¹Planck(1900).

radiação eletromagnética emitida por um corpo negro². Esta hipótese, contudo — embora levasse a um resultado teórico em concordância com os resultados experimentais conhecidos — não dispunha de qualquer outra base para sua aceitação, sendo de fato contrária à teoria eletromagnética clássica.

Ehrenfest iniciou seus estudos da teoria de Planck, que o levariam à formulação do princípio adiabático, já em 1906, senão antes³. Em um trabalho de 1923 ele revela que um dos aspectos que mais o intrigavam neste problema era o fato de que a lei do deslocamento de Wien, obtida a partir do eletromagnetismo clássico, permanecia válida a despeito do caráter não-clássico dos fenômenos tratados⁴. Foi assim que em dezembro de 1912 Ehrenfest obteve um resultado que havia buscado durante muito tempo. Esse resultado, de fato um caso especial de um teorema já demonstrado por Boltzmann, refere-se à existência, para qualquer sistema periódico, de um invariante adiabático.

O conceito de mudança adiabática originou-se nos trabalhos de Boltzmann(1866,1871) e Clausius(1870), que pretendiam reduzir a segunda lei da termodinâmica à mecânica clássica. Os trabalhos posteriores de Helmholtz(1884) e Hertz(1894) levaram à definição de movimento adiabático como o movimento de um sistema influenciado por forças externas de tal maneira que essas forças não afetam diretamente as coordenadas do sistema enquanto certos parâmetros sofrem uma variação lenta. A existência desse tipo de comportamento foi notada já em 1902 por Rayleigh em sistemas

²Para uma análise detalhada do trabalho de Planck veja Jammer(1966), seções 1.2 e 1.3, e Klein(1970), cap. 10.

³Cf. Jammer(1966), p. 98, n. 45.

⁴Cf. Jammer(1966), p. 98, n. 46.

oscilatórios senoidais, como uma corda vibrante cujo comprimento é diminuído lentamente, e a radiação eletromagnética no interior de uma cavidade que se contrai⁵. Finalmente, P. Hertz demonstrou em 1910 que, para um sistema com f graus de liberdade, cujo movimento depende de um conjunto de parâmetros a , o volume $2f$ -dimensional definido pela superfície isoenergética $E(q,p,a)=\text{constante}$, onde q e p representam as coordenadas e os momentos generalizados, respectivamente, é invariante durante uma transformação adiabática reversível.

O invariante adiabático de que trata o teorema de Ehrenfest é a razão entre a energia cinética média e a frequência de um sistema periódico. É útil neste ponto citar as palavras do próprio Ehrenfest:

"...Given a conservative system of n degrees of freedom; the Lagrangian of the system may contain, in addition to the n coordinates q and velocities $\dot{q}$, any sort of parameters $a_1, a_2, \dots, a_r$. (This means, for example, the coordinates of certain fixed centers of force, or quantities on which the moments of inertia of certain rotating masses can depend.)

The motion of the system is to be periodic for all values of the parameters $a_1, a_2, \dots, a_r$ and for arbitrary initial values of the q 's and $\dot{q}$'s. (The period θ may depend in any way on these initial values $q_0, \dot{q}_0$ and on the parameters $a_1, a_2, \dots, a_r$.)

By an 'adiabatic influencing' of the system we will understand the following process: The system is carrying out one of its periodic motions, with period θ , for fixed values of the parameters $a_1, a_2, \dots, a_r$. We vary the parameters infinitely slowly

⁵Cf. Jammer(1966), p. 97.

until they have assumed the values $a'_1, a'_2, \dots, a'_r$ and then we hold them fixed again. The system will now carry another periodic motion of period θ' .

Denote the 'frequency' ($1/\theta$) by ν and ($1/\theta'$) by ν' . We also denote by $\bar{K}$ the average kinetic energy of the first motion and by $\bar{K}'$ that of the second. Then my theorem reads:

$$\bar{K}'/\nu' = \bar{K}/\nu . \quad (I)$$

The average kinetic energy of our system increases in the same proportion as the frequency under an adiabatic influencing.

Remarks:

$$1. \quad \bar{K}/\nu = \theta \bar{K} = \frac{\theta \int_0^\theta K dt}{\theta} = \int_0^\theta K dt .$$

So the root of equation (I) is

$$\delta' \int_0^\theta K dt = 0$$

where δ' means an 'adiabatic' variation. You see, therefore, that theorem I stands in close relationship to the Principle of Least Action (half more general, half more special - special case of the Boltzmann-Clausius-Szily principle).

2. In special cases (I) can be replaced by

$$\epsilon'/\nu' = \epsilon/\nu ,$$

namely, whenever the average potential energy is in a fixed ratio to the average kinetic energy. Examples: (a) Harmonic oscillation. Here the average potential energy = average kinetic energy = $1/2$ total energy. Therefore ϵ/ν is constant for the cavity. (b) Force-free motion of a molecule between elastic walls, since here

potential energy = 0, therefore $\bar{K} = \epsilon$.⁶

Devemos notar, todavia, que este teorema deriva exclusivamente da mecânica clássica, e não tem em si qualquer relação com a teoria dos quanta — exceto pelo fato de que a lei de radiação de Planck envolve a quantização de um invariante adiabático, a energia total de um oscilador harmônico, que é um dos casos especiais citados acima por Ehrenfest.

Foi a validade da lei de wien, no entanto, que deu ensejo a que ele formulasse uma hipótese que mais tarde, seguindo uma sugestão de Einstein⁷, seria conhecida como Princípio Adiabático. Se nos referirmos ao movimento inicial do sistema como não-deformado, chamando o movimento após a mudança adiabática dos parâmetros de deformado, o princípio adiabático estabelece que, para um sistema deformado com um certo conjunto α' de parâmetros, só são permitidos (possíveis) aqueles movimentos que podem ser levados até, ou derivados de, um movimento não-deformado de parâmetros α através de um processo adiabático reversível.

A primeira exposição desse princípio apareceu em um artigo escrito por Ehrenfest em 1913. Neste trabalho, após mostrar a invariância para qualquer sistema periódico da razão entre a energia cinética média e a frequência, Ehrenfest colocou de maneira clara o problema central de sua pesquisa: como aplicar *heurísticamente* o resultado obtido a um sistema vibrando não-senoidalmente⁸. Prevendo ainda uma possível objeção à

⁶P. Ehrenfest, carta a A. F. Joffe, 20/2/1913; cit. Klein(1970), pp. 262-262.

⁷Einstein(1914).

⁸Cf. Klein(1970), p. 270.

combinação de um resultado da mecânica clássica com a noção anti-clássica de quantum de energia, ele escreveu:

*"Wien's law holds out the hope to us that results which may be derived from classical mechanics and electrodynamics by the consideration of adiabatic processes will continue to be valid in the future mechanics of energy quanta."*⁹

Vemos assim que para ele o princípio adiabático deveria servir como um guia na pesquisa das condições de quantização a serem aplicadas a sistemas diferentes daqueles tratados até aquela época. Este trabalho, todavia, não teve a repercussão esperada por ele.

Alguns meses após a publicação deste artigo, Bohr publicou o primeiro de uma série de três artigos *"On the Constitution of Atoms and Molecules"*¹⁰. As reações a este trabalho foram variadas, e entre elas vale citar a de Ehrenfest, que achou absurdo o tratamento dado por Bohr ao modelo do átomo de Rutherford, e a do próprio Rutherford, que achou que a mistura das idéias de Planck com a mecânica clássica tornava difícil a formação de uma visão clara sobre quais seriam os seus fundamentos¹¹. Em verdade, Ehrenfest não fez qualquer esforço para entender corretamente a teoria de Bohr, e foi necessário esperar até o fim da primeira guerra para que uma conversa com o próprio Bohr o transformasse em um de seus mais ardentes defensores. Nesse interim, porém, dedicou-se a seus próprios métodos para o tratamento dos problemas quânticos, demonstrando, entre outras

⁹Ehrenfest(1914a), p. 592.

¹⁰Bohr(1913).

¹¹Cf. Klein(1970), pp. 277-278.

coisas, que a função de distribuição de probabilidades de um sistema molecular ideal no espaço de fase deve ser um invariante adiabático para que o teorema provado por Boltzmann sobre a relação entre a mecânica clássica e a segunda lei da termodinâmica permaneça válido¹². Embora isto fosse verdade para o caso da radiação de corpo negro, por exemplo, não era ainda claro que o mesmo ocorreria para todas as situações interessantes do ponto de vista físico.

Foi nessa época, entre 1915 e 1916, que Sommerfeld publicou seus trabalhos sobre a estrutura fina do hidrogênio¹³. Nesses trabalhos, após estender o tratamento dado por Bohr ao átomo de hidrogênio para o caso de órbitas elípticas, impondo-lhes condições de quantização adequadas¹⁴, Sommerfeld tratou o problema usando a teoria da relatividade, conseguindo assim uma derivação

¹² Ehrenfest(1914b): cf. Klein(1970), pp. 279-282.

¹³ Sommerfeld(1915a,b)(1916).

¹⁴ As condições de quantização de Sommerfeld estabelecem que os estados estacionários de um sistema periódico com f graus de liberdade são tais que a integral de fase para cada coordenada é um múltiplo inteiro do quantum de ação (Sommerfeld(1916), p. 9). Condições de quantização equivalentes foram encontradas por Wilson(1915) e Ishiwara(1915). O sucesso na aplicação desses resultados na determinação das linhas espectrais do hidrogênio levada a cabo por Sommerfeld, entretanto, ocultou o trabalho dos outros dois cientistas (cf. Jammer(1966), pp. 91-92).

teórica do valor da constante de estrutura fina e das linhas espectrais correspondentes.

Os resultados obtidos por Sommerfeld fizeram grande sucesso entre os membros da comunidade científica, incluindo-se o próprio Ehrenfest, que lhe escreveu uma carta, em maio de 1916, na qual chamava sua atenção para a conexão entre seus resultados e a hipótese adiabática. A resposta um tanto fria de Sommerfeld, porém, convenceu-o finalmente da necessidade de expressar de maneira clara suas idéias, tomando agora o devido cuidado com sua divulgação.

Assim, Ehrenfest publicou em 1916 um trabalho com uma formulação precisa do princípio adiabático¹⁵. Além disso, mostrou a invariância da razão entre a energia cinética média do oscilador harmônico, e da área do espaço de fase do oscilador anarmônico tal como fora quantizada por Debye¹⁶. Retomando em seguida os resultados de Sommerfeld, demonstrou também que suas condições de quantização eram de fato válidas de acordo com seu princípio, no caso de uma força central, onde se transformavam em condições impostas sobre invariantes adiabáticos, embora não fosse capaz de estender essa demonstração ao tratamento relativístico.

Estava assim aberto o caminho para uma aplicação mais ampla e racional de condições de quantização a novos sistemas físicos. Neste campo o princípio adiabático formulado por Ehrenfest desempenhou sobretudo um papel *regulador*, apontando o

¹⁵Ehrenfest(1916a,b) e (1917). Os três trabalhos contém diferenças mínimas, e mostram a preocupação de Ehrenfest com a divulgação de suas idéias (cf. Klein(1970), pp. 286-287).

¹⁶Planck et al(1914).

caminho para a escolha de condições de quantização adequadas.

Restava porém o problema da escolha das coordenadas a serem utilizadas na descrição dos sistemas quânticos: sistemas descritos com coordenadas diferentes levam a condições de quantização diferentes. Seguindo os trabalhos de Staude(1887) e Stäckel(1891) sobre sistemas condicionalmente periódicos, Schwarzschild(1916) e Epstein(1916a,b) generalizaram as condições de quantização de Sommerfeld. O primeiro supôs que essas condições deveriam ser aplicadas em sistemas descritos com o auxílio de variáveis angulares e de ação¹⁷, enquanto o segundo propôs sua aplicação em sistemas nos quais as equações de Hamilton-Jacobi pudessem ser integradas pelo método de separação de variáveis; uma demonstração da equivalência entre essas condições e as de Planck foi afinal feita por Kneser(1921)¹⁸. Finalmente, a aplicação dessas teorias no tratamento do efeito Stark forneceu resultados em excelente concordância com os dados experimentais disponíveis na época, possibilitando a Epstein o seguinte comentário:

"We believe that the reported results prove the correctness of Bohr's atomic model with such striking evidence that even our conservative colleagues cannot deny its cogency. It seems that the possibilities of quantum theory as applied to this model are almost miraculous and far from being exhausted."¹⁹

¹⁷ Para uma definição dessas variáveis, veja Landau(1978), p. 235.

¹⁸ Cf. Jammer(1966), pp. 102-104.

¹⁹ Epstein(1916c), p. 150; cit. Jammer(1966), p. 103. Devemos acrescentar que este resultado só foi possível porque a interação entre o spin do elétron e o campo aplicado é negligenciável neste caso (cf. Jammer(1966), pp. 108-109).

A conexão final entre esses trabalhos e o princípio adiabático foi estabelecida por J. M. Burgers,²⁰ um aluno de Ehrenfest, que demonstrou que as integrais de ação usadas por Schwarzschild e Epstein eram de fato invariantes adiabáticos²⁰. Finalmente, devemos acrescentar que o princípio adiabático atingiu seu pleno desenvolvimento a partir de 1918, com os trabalhos de Niels Bohr²¹.

Podemos agora situar de maneira mais precisa o princípio adiabático no panorama da ciência da época. Como vimos pelas reações de Rutherford e Ehrenfest aos primeiros trabalhos de Bohr, assim como pelos trabalhos do próprio Ehrenfest, a velha teoria quântica, à exceção do pressupostos de quantização necessários à explicação dos resultados experimentais, possuía um caráter eminentemente clássico: aos sistemas quânticos eram aplicadas tanto a mecânica quanto a eletrodinâmica clássicas, assim como a teoria da relatividade restrita. O único aspecto não-clássico, a necessidade de regras de quantização, referia-se de fato apenas aos fenômenos microscópicos, e era atenuado pelo uso tanto do princípio adiabático quanto do princípio de correspondência formulado na mesma época por Bohr (veja a próxima seção). Acreditamos assim que não fosse o desenvolvimento ulterior dos fatos, que levaram à formulação da teoria quântica moderna, esta teoria ter-se-ia desenvolvido no sentido de englobar os novos fenômenos descobertos, conservando contudo a mesma estrutura conceitual e matemática da mecânica clássica, na qual a quantização não passaria de um caso limite.

²⁰burgers(1917).

²¹Cf. Klein(1970), p. 292.

1.2 - O PRINCÍPIO DE CORRESPONDÊNCIA

A idéia da existência de uma conexão entre a mecânica quântica e a mecânica clássica está presente na base da formulação do princípio de correspondência, e constitui um aspecto importante do pensamento de Niels Bohr. Este tipo de idéia é bastante comum e natural em uma época de transição como foi o início deste século, que viu surgir tanto a velha teoria quântica quanto a relatividade geral, e os primeiros passos na busca de uma unificação dos campos. É neste último contexto, por exemplo, que Pauli afirma em uma carta a Eddington de 20 de setembro de 1923, ao tratar dos problemas relativos ao conceito do campo de uma onda eletromagnética:

"Some physicists have fallen upon the idea...of completely abandoning the concept of the field of a light wave and

only describing the motion of the electron. This we wholly reject; for on the one hand this idea scarcely helps us over the difficulty, and on the other hand it makes a connection with the classical theory, which has proved itself so brilliant for large scale phenomena, quite impossible. "¹

Um dos aspectos dessa conexão foi apontado já em 1906 por Planck. Segundo ele, "The classical theory can simply be characterized by the fact that the quantum of action becomes infinitesimally small. "²

Uma das primeiras versões do que seria chamado mais tarde de princípio de correspondência apareceu na trilogia "On the Constitution of Atoms and Molecules", de 1913. Nesta série de artigos Bohr apresenta uma exposição geral de sua teoria atômica, baseada na noção de estados estacionários nos quais o elétron orbitando em redor do núcleo não perderia energia pela emissão de radiação, como seria esperado de acordo com a eletrodinâmica clássica; por outro lado, as transições entre dois estados com energias E' e E'' seriam acompanhadas pela emissão de radiação eletromagnética de frequência ν dada pela lei de Planck

$$E' - E'' = h\nu, \quad (1)$$

onde h é a constante de Planck. Bohr renunciou desde o início a qualquer explicação racional do processo de transição entre dois estados; este fato, como veremos, serviu para enfatizar a diferença entre a teoria quântica e a física clássica, e foi de grande importância na sua formação e consolidação e,

¹W. Pauli, carta a Eddington, 20/9/1923; cit. Hendry(1984), p. 21.

²Planck(1906), p. 143; cit. Jammer(1966), p. 109.

posteriormente, de sua versão moderna³.

No primeiro artigo dessa trilogia Bohr calcula os níveis de energia dos estados estacionários do átomo de hidrogênio formado pelo transporte de um elétron a partir de um ponto no infinito até as proximidades do núcleo, acompanhado pela emissão de radiação monocromática homogênea de frequência ν relacionada com a energia de ionização W do átomo e a frequência de revolução ω do elétron ao redor do núcleo por⁴

$$W = r h \nu = r h \omega / 2 , \quad (2)$$

onde r é um inteiro positivo. A justificação destas suposições é feita em duas partes. Numa primeira fase Bohr calcula as possíveis frequências da radiação emitida durante transições entre os diversos estados do sistema, mostrando que a concordância entre seus resultados e a série de Balmer exige que

$$W = c r h \omega , \quad (3)$$

onde c é uma constante. Em seguida, tomando as frequências de revolução do elétron em dois níveis com números quânticos N e $N-1$, Bohr conclui:

"If N is great the ratio between the frequency before and after the emission will be very nearly equal to 1; and according to the ordinary electrodynamics we should therefore expect that the ratio between the frequency of radiation and the frequency of revolution also is very nearly equal to 1. This condition will only be satisfied if $c=1/2$."⁵

O mesmo tipo de argumento é reproduzido a seguir em "On the

³Bohr(1913), p. 7; CW2 p. 167.

⁴Bohr(1913), pp. 4-5; CW2 pp. 164-165.

⁵Bohr(1913), p. 13; CW2 p. 173.

de Ehrenfest sobre o princípio adiabático¹², por outro lado, tiveram grande influência sobre a teoria de Bohr, provendo-a de uma base teórica mais sólida.

Na primeira página de "On the Quantum Theory of Line Spectra" Bohr apresenta os fundamentos de sua teoria, fazendo agora um uso extensivo das idéias de Einstein sobre probabilidades e do princípio adiabático de Ehrenfest. Ao invés das órbitas simples de seus primeiros trabalhos ele expande os possíveis movimentos dos elétrons nos estados estacionários em séries de Fourier, associando aos coeficientes dessa expansão a probabilidade de transição entre dois estados tais que a frequência da radiação emitida nesta transição, calculada de acordo com a equação 1, seja igual à frequência correspondente da série¹³; essas probabilidades, finalmente, são associadas à intensidade das linhas espectrais correspondentes.

¹⁰ Sobre este ponto veja-se Jammer(1966), p. 113. Apesar da utilização de resultados estatísticos Einstein não se compromete de maneira alguma com a acausalidade, ao contrário do que Bohr imaginava. Este engano, porém, foi de grande importância para o desenvolvimento de sua própria visão, como se verá adiante.

¹¹ Sommerfeld(1915a,b),(1916a,b,c),(1917); cit. Bohr(1918), p. 3 (CW3 p. 69).

¹² Ehrenfest(1913),(1914a,b),(1916a),(1917).

¹³ Bohr(1918), p. 15; CW3 p. 81.

Estes resultados marcam um profundo afastamento das primeiras concepções de Bohr sobre a relação mecânica quântica-mecânica clássica. Com efeito, como notou Hendry¹⁴, não se trata agora da conexão entre duas teorias em um limite no qual ambas devem apresentar os mesmos resultados, mas sim da aplicação de uma teoria (neste caso, a mecânica e a eletrodinâmica clássicas) juntamente com postulados em contradição com seus fundamentos. Este fato é claro para o próprio Bohr, e é explicitado por ele, por exemplo, na seguinte passagem:

"As far as the frequencies are concerned we see therefore that in the limit where n is large there exists a close relation between the ordinary theory of radiation and the theory of spectra... It may be noticed, however, that, while on the first theory radiations of the different frequencies $\tau\omega$ corresponding to different values of τ are emitted or absorbed at the same time, these frequencies will on the present theory ... be connected with entirely different processes of emission or absorption, corresponding to the transition of the system from a given state to different neighbouring stationary states."¹⁵

Estava porém aberto o caminho para uma ampla aplicação da física clássica no tratamento dos problemas do átomo. Nestas aplicações o princípio de correspondência teve um papel fundamental, tornando a velha teoria quântica uma teoria tão coerente e completa quanto seria possível, dadas as suas

¹⁴Hendry(1984), cap. 3, n. 10.

¹⁵Bohr(1918), p. 15; CW3, p. 81.

limitações¹⁶. O termo 'correspondência' apareceu pela primeira vez em 1920, em "On the Series Spectra of th Elements"¹⁷; a expressão 'princípio de correspondência' foi usada pela primeira vez no apêndice à terceira parte de "On the Quantum Theory of Line Spectra", publicado em 1922.

Embora Bohr considerasse o princípio de correspondência uma lei típica da teoria quântica, que não poderia de maneira alguma diminuir o contraste entre esta teoria e a eletrodinâmica clássica¹⁸, é importante considerarmos a maneira como este princípio era aplicado. Desde suas formulações mais primitivas até sua forma final a idéia subjacente a ele era de que a teoria quântica deveria apresentar resultados compatíveis com as teorias clássicas nos casos em que estas fossem utilizáveis. Assim, sua linha de raciocínio passa da exigência de que a frequência da radiação emitida numa transição entre dois níveis de energia de altos números quânticos aproxime-se assintoticamente da frequência de revolução do elétron, no cálculo das linhas

¹⁶ Apesar dos esforços de Bohr e outros, a velha teoria quântica não foi capaz de explicar, por exemplo, o espectro do hélio e o efeito Zeeman anômalo. O princípio de correspondência, porém, serviu como um guia importante na busca de soluções para os problemas tratados na época, entre eles a explicação qualitativa do espectro de elementos com grande número de elétrons e as propriedades da tabela periódica. Veja-se a este respeito Heilbron(1977), pp. 87-94.

¹⁷ Bohr(1920a).

¹⁸ Veja-se por exemplo Bohr(1924), pp. 12,22; CW3, pp. 469,479 (notas).

espectrais do hidrogênio¹⁹, a considerações do mesmo tipo referentes agora também à mecânica estatística²⁰, e à própria mecânica clássica, no uso do princípio adiabático²¹. Apesar de ter sempre em mente as diferenças fundamentais entre as teorias clássicas e a teoria quântica²², Bohr em momento algum perdeu de vista a necessidade de uma conexão não apenas formal entre elas.

A esse respeito é notável o uso da expressão 'generalização racional' ao longo de toda sua obra. Assim, em 1920, Bohr se refere à correspondência entre a teoria quântica e a eletrodinâmica clássica da seguinte forma;

"This correspondence is of such a nature that the present theory of spectra is in a certain sense to be regarded as a rational generalization of the ordinary theory of radiation."²³

Essa 'generalização racional', contudo, não era completa. Em 1923 Bohr voltou novamente a esse tema no final de seu artigo "On the Application of the Quantum Theory to Atomic Structure", ao falar sobre o princípio de correspondência e o princípio adiabático:

"As frequently emphasized, these principles, although they are formulated by help of classical conceptions, are to be regarded purely as laws of the quantum theory, which give us, notwithstanding the formal nature of the quantum theory, a hope in the future of a consistent theory, which at the same time reproduces the characteristic features of the quantum theory,

¹⁹ Bohr(1914), p. 13; CW2, p. 295.

²⁰ Bohr(1918), p. 13, CW3 p. 79; (1924), pp. 18-19, 22, CW3, pp. 475-576, 479.

²¹ Bohr(1924), p. 13, CW3, p. 470; (1918), p. 13, CW3, p. 79.

²² Nota 18 acima.

²³ Bohr(1920a), pp. 23-24, CW3. pp. 245-246.

important for its applicability, and nevertheless, can be regarded as a rational generalization of classical electrodynamics. ²⁴

A mesma expressão, finalmente, será usada com frequência mais tarde, em conexão agora com o princípio de complementaridade e a moderna teoria quântica, indicando de certa forma uma identificação no pensamento de Bohr entre a redução e a generalização racional como forma de progresso da ciência ²⁵. A importância dos argumentos reducionistas pode ser notada, de maneira ainda mais clara, nesta outra passagem:

"Notwithstanding the fundamental break with the classical electrodynamic theory introduced by the postulates of the quantum theory, it has yet been possible...to connect the occurrence of radiative processes with the motion in the atom in a way which offers an explanation for the fact that the laws of the classical theory are suitable for the description of the phenomena in a limiting region." ²⁶

As três últimas passagens citadas parecem indicar

²⁴ Bohr(1924), p. 42; CW3, p. 499. Esta expressão aparece novamente em seu prefácio à edição em forma de livro de seus primeiros trabalhos sobre a teoria atômica (Bohr(1920b); CW3, p. 331). A importância da conexão entre as teorias é mostrada na p. 329 deste texto, onde se lê: "...the endeavour to retain...the connection between the quantum theory and the usual radiation in the limiting region...", e um pouco adiante: "Although, in the case of the Zeeman effect, the search for an asymptotic connection with the ordinary radiation theory led me astray...".

²⁵ Veja-se adiante a seq. 2.1 .

²⁶ Bohr(1924), p. 22; CW3, p. 479.

que a relação entre a velha teoria quântica e as teorias clássicas compunha-se de três aspectos distintos:

I - Os princípios da nova teoria, apesar de formulados com o auxílio de conceitos clássicos, pertencem exclusivamente a ela, e não podem de maneira alguma diminuir o contraste entre esta e as teorias clássicas.

II - A aplicação desses princípios resulta em uma restrição da validade das teorias clássicas, de tal forma que esta restrição leve a um aumento de sua gama de aplicações²⁷.

III - A nova teoria obtida deve explicar, de alguma forma o sucesso da teoria anterior nas situações já conhecidas²⁸.

²⁷ Note-se que não há qualquer avanço ou mudança fundamental ao se aplicar a mecânica newtoniana a um modelo planetário do átomo; a modificação consiste de fato na restrição das possíveis órbitas, calculadas corretamente pela teoria clássica, àquelas correspondentes a estados estacionários, i.e., restringe-se a validade da eletrodinâmica clássica, possibilitando sua aplicação dentro do domínio quântico.

²⁸ A investigação das previsões da teoria quântica no limite de altos números quânticos mostra a equivalência entre os resultados obtidos com o auxílio da eletrodinâmica clássica e aqueles previstos pela nova teoria. Explica-se dessa forma a validade da teoria clássica fora do conjunto de fenômenos que originou a teoria quântica, sem implicar com isso uma equivalência entre elas, da diferença entre os processos envolvidos. A aplicação desse procedimento a cada problema particular elimina a necessidade de uma função de redução entre as duas teorias, pois ela é demonstrada em cada caso particular.

Os dois primeiros itens correspondem à generalização: embora modificando a teoria antiga, aumentamos, de certa forma, sua gama de aplicações. A racionalidade do processo é dada pelo último item: não se obtém apenas uma nova teoria, aplicável em uma faixa limitada de fenômenos, e sim uma teoria que coincide com a teoria anterior nos casos em que a validade desta última havia sido comprovada. Devemos notar, porém, que as restrições impostas à eletrodinâmica clássica não se referem aos conceitos utilizados, nem às relações entre eles; a ontologia da velha teoria quântica é a mesma da física clássica, somada agora às noções de estado estacionário e probabilidade de transição: o mundo ainda é formado por partículas com massas, posições e velocidades bem definidas, onde são válidas as mesmas leis de força e conservação. São as teorias que têm seu status modificado pelas restrições a sua aplicabilidade; as entidades de que fala a teoria continuam as mesmas. Veremos mais tarde que esta situação é bem diferente daquela na qual se desenvolveu o princípio de complementaridade, onde, todavia, Bohr continuou a utilizar o termo

'generalização racional'²⁹.

Podemos concluir a partir do que foi exposto acima que o princípio de correspondência, enquanto conexão formal entre a teoria quântica e as teorias clássicas, não pode ser considerado como uma demonstração da inclusão das últimas na primeira. Ele serviu apenas como ponto de partida dessas teorias na direção de uma nova formulação, bem como de sua aplicação prática, agindo o tempo todo como o verdadeiro guia no desenvolvimento das novas teorias, e das próprias concepções de Niels Bohr a respeito da ciência e de seu processo de evolução.

²⁹ O novo sentido dado por Bohr a essa expressão está ligado ao seu abandono da possibilidade de visualização dos fenômenos tratados pela teoria. No âmbito da velha teoria quântica, apesar da renúncia à explicação da transição entre dois estados quânticos, tínhamos ainda um modelo visualizável e, portanto, com fortes características clássicas. Exceção única a esta regra, os quanta de radiação, entretanto, foram longamente combatidos por Bohr, que tentou salvar a eletrodinâmica clássica até quando isso foi possível, chegando inclusive a pensar na possibilidade de uma quebra na lei de conservação de energia para o mundo microscópico.

2 - A Mecânica Clássica e a Nova Teoria quântica

2.1 - A FILOSOFIA DA COMPLEMENTARIDADE

As dificuldades encontradas ao se tentar analisar o significado do princípio de complementaridade são sem dúvida bem maiores que aquelas relativas ao princípio de correspondência¹. Com efeito, a complementaridade é bem mais que um simples princípio heurístico como o princípio de correspondência; ela inclui toda uma interpretação da teoria quântica moderna, e é de fato um nome cujo objetivo é resumir toda uma visão da ciência e da situação do cientista em sua relação com o mundo objetivo, como podemos verificar pelas passagens seguintes:

"The viewpoint of complementarity...is...the expression of a rational synthesis of the wealth of experience..."²

¹Devemos notar que, ao longo de toda sua obra, Bohr jamais empregou os termos 'princípio' ou 'teoria' da complementaridade. Cf. Folse(1985), p. 18.

²Bohr(1958), p. 19.

"In offering a frame wide enough to allow for a harmonious synthesis of the peculiar regularities of atomic phenomena, the conception of complementarity may be regarded as a rational generalization of the very ideal of causality."³

"I shall therefore be glad to use this opportunity to explain in somewhat greater detail a general viewpoint, conveniently termed complementarity..."⁴

O termo 'complementaridade' designa portanto um 'ponto de vista geral', uma 'estrutura' dentro da qual serão interpretados os resultados e o formalismo da mecânica quântica. Devemos todavia distinguir entre uma estrutura conceitual e um simples conjunto de conceitos; a função da primeira é justamente determinar as relações entre os elementos do segundo, assim como sua aplicação:

"...we have ... received only recently an incisive admonition that the analysis of new experience is liable to disclose again and again the unrecognized presuppositions for an unambiguous use of our most simple concepts, such as space-time description and causal connection."⁵

Por outro lado, essa estrutura conceitual é construída a partir da visão particular de Bohr sobre o objetivo da ciência: descrever e ordenar de maneira objetiva os fenômenos, entendendo-se aqui por objetividade a possibilidade de comunicação não ambígua:

³Bohr(1947), p. 138; cit. Folse(1985), p. 14, n. 15.

⁴Bohr(1935), p. 696; veja-se também Bohr(1937), pp. 293-294.

⁵Bohr(1937), p. 290.

"As the goal of science is to augment and order our experience, every analysis of the condition of human knowledge must rest on considerations of the character and scope of our means of communication. The basis is here, of course, the language developed for our orientation in the surroundings and for the organization of human communities."⁶

"Every scientist ... is constantly confronted with the problem of objective description of experience, by which we mean *unambiguous communication*..."⁷

O objetivo de Bohr ao estabelecer a complementaridade é, portanto, a elaboração de uma nova estrutura conceitual para o uso adequado dos conceitos clássicos e a descrição não-ambígua dos fenômenos. A análise leva-o então a exigir que os conceitos usados na descrição sejam os mesmos conceitos empregados na física clássica:

"...however far the phenomena transcend the scope of classical physical explanation, the account of all evidence must be expressed in classical terms."⁸

Para entender a razão destas conclusões devemos inicialmente analisar a maneira como são utilizados certos conceitos na física clássica. No âmbito das teorias clássicas dispomos de dois conceitos básicos, partícula e onda. O termo partícula é usado para designar os corpos materiais em geral, aos quais são associadas certas propriedades como massa e carga, e que descrevem no espaço uma trajetória contínua que determina,

⁶Bohr(1956); cit. Folse(1985), n. 18, p. 16.

⁷Bohr(1958), p. 39 (it. N.B.)

⁸Bohr(1958), p. 67.

para cada instante de tempo, uma posição e um momento atribuídos ao corpo. O conceito de onda, por outro lado, é utilizado na eletrodinâmica para descrever uma perturbação ondulatória que se desloca ao longo do campo eletromagnético. Uma descrição completa dessas entidades consiste então, no primeiro caso, na determinação de sua trajetória espaço-temporal e, no caso das ondas eletromagnéticas, da variação com o tempo do campo eletromagnético em todo o espaço. Uma medida clássica, por sua vez, consiste em um processo de interação, governado pelas leis da física clássica, entre entidades também clássicas, e durante o qual estas entidades têm seus estados modificados continuamente e de maneira determinística. Este determinismo, finalmente, possibilita que se fale, no âmbito clássico, dos possíveis estados de um sistema, mesmo quando este não é observado, isto é, é possível em princípio atribuir-lhe a qualquer instante valores precisos de todas as variáveis que o definem, pois o efeito de qualquer interação durante a medida pode ser determinado, de maneira a se conhecer o próprio estado do sistema caso não houvesse a interação, i.e., a medida.

Segundo Bohr, o ponto de partida para a elaboração de sua interpretação do formalismo quântico, e que leva ao rompimento com a visão clássica da ciência, está presente já na velha teoria quântica, na forma do postulado quântico. Este postulado atribui aos sistemas atômicos a estabilidade necessária à explicação de suas propriedades físicas, ao mesmo tempo em que permite o uso, na descrição dos estados estacionários, das teorias clássicas. Este fato, que por si só representaria uma violação

dessas teorias⁹, é ainda acompanhado pela suposição de que as mudanças de estado ocorrem de uma maneira descontínua para a qual não é possível em princípio uma descrição teórica. Temos assim os elementos básicos para a formulação da filosofia da complementaridade: uso de conceitos clássicos na determinação de fenômenos quânticos, descontinuidade das mudanças de estado, indescritibilidade dessas transições¹⁰.

Por outro lado, somente estes resultados não justificariam o estabelecimento de toda uma nova estrutura para o uso adequado dos conceitos clássicos. A razão para essa mudança deve ser buscada na natureza, na necessidade de descrever teoricamente o comportamento da radiação em sua interação com a matéria, e na descoberta de fenômenos aparentemente contraditórios que deveriam, em princípio, ser atribuídos às mesmas entidades. Assim, embora a teoria eletromagnética forneça uma boa descrição dos fenômenos de interferência característicos da radiação eletromagnética, é impossível explicar, no âmbito de uma teoria como esta, o caráter descontínuo da radiação, presente, por exemplo, no efeito fotoelétrico. Ao mesmo tempo, o caráter corpuscular das partículas atômicas é incompatível com os fenômenos de interferência observados, por exemplo, com elétrons e nêutrons. O ponto importante aqui é que, de acordo com a situação experimental necessária à observação de tais fenômenos, faz-se necessário aplicar aos mesmos sistemas conceitos contraditórios como os de partícula e onda, isto é, cada situação física determina uma descrição distinta do sistema microscópico

⁹Cf. n. 15, seq. 1.2.

¹⁰Ver a esse respeito Bohr(1934), pp. 31,53.

observado. Finalmente, todas as situações citadas acima constituem de fato processos de medida nos quais qualquer tentativa de subdivisão do fenômeno com o objetivo de analisar os detalhes da interação entre o sistema estudado e o aparelho de medida modifica os resultados de uma maneira incompatível com a obtenção do primeiro fenômeno. Bohr foi levado dessa forma a analisar o processo de medida da mecânica quântica, assim como o emprego dos conceitos clássicos na descrição de tais processos.

O primeiro guia de Bohr na busca da nova estrutura conceitual exigida pela teoria quântica foi, como já vimos, o postulado quântico. Sabemos também que todo processo de medida (i.e., observação) consiste em uma interação entre um sistema quântico e um aparelho de medida macroscópico. O postulado quântico, segundo Bohr, implica que uma interação entre um sistema microscópico e o aparelho de medida causa, no sistema observado, uma mudança descontínua em seu estado¹¹, a qual não pode em princípio ser controlada:

"...an experimental arrangement aiming at ascertaining where an atomic particle, whose position at a given time has been controlled, will be located at a given moment implies a transfer, uncontrollable in principle, of momentum and energy to the fixed scales and regulated clocks necessary for the definition of the reference frame."¹²

O uso do postulado quântico leva-o portanto ao emprego de uma 'interpretação de perturbação', isto é, uma medida modifica de maneira incontrolável o estado do sistema, como se este existisse

¹¹ Bohr(1934), p. 53.

¹² Bohr(1963), p. 11.

de fato em um estado clássico antes e depois da interação. Todavia, o próprio Bohr rejeitou mais tarde este tipo de interpretação, em consequência sobretudo de seu debate com Einstein sobre a interpretação da mecânica quântica. O divisor de águas neste caso pode ser localizado em sua resposta ao artigo de Einstein, Podolsky e Rosen¹³ em que estes tentam demonstrar a incompletude da descrição quântica da realidade física. A partir dessa época Bohr retira a ênfase dada anteriormente à descrição da interação descontínua entre sistema e aparelho, colocando-a agora na indivisibilidade, individualidade ou totalidade do fenômeno quântico, decorrente da existência do quantum de ação de Planck:

"The impossibility of a closer analysis of the reaction between the particle and the measuring instrument...is rather an essential property of any arrangement suited to the study of the phenomena of the type concerned, where we have to do with a *feature of individuality* completely foreign to classical physics."¹⁴

"...Planck's discovery of the elementary quantum of action ... revealed a feature of *wholeness* inherent in atomic processes..."¹⁵

Podemos agora entender, a partir deste novo ponto de vista, a interpretação de Bohr para o formalismo quântico, e sua solução do problema da medida. Já vimos que para ele a objetividade da ciência está ligada à possibilidade de comunicação

¹³Einstein, Podolsky e Rosen(1935).

¹⁴Bohr(1935), p. 697 (it. N.B.).

¹⁵Bohr(1963), p. 2 (it. N.B.).

dos resultados experimentais, a qual por sua vez implica o uso dos conceitos da física clássica. A solução encontrada para este dilema consiste na redefinição do objeto de estudo: os resultados obtidos sob condições experimentais mutuamente exclusivas designam agora objetos fenomenais distintos, descritos de maneiras complementares (i.e., mutuamente exclusivas), e que devem apesar disso ser encarados como manifestações diferentes do mesmo objeto físico. A descrição a ser empregada em cada caso é inteiramente determinada pelo arranjo experimental em questão, o qual permite a escolha de apenas um dos modos de descrição característicos da física clássica, considerados por Bohr como complementares:

"...in the phenomena concerned we are not dealing with an incomplete description characterized by the arbitrary picking out of different elements of physical reality at the cost of sacrificing other elements, but with a rational discrimination between essentially different experimental arrangements and procedures which are suited either for an unambiguous use of the idea of space location, or for a legitimate application of the conservation theorem of momentum."¹⁶

Estes modo de descrição clássicos são a descrição espaço-temporal (conceitos de partícula e onda) e o modo causal (conservação de momento e energia). A união destes dois tipos de descrição, característica da física clássica, é agora proibida pela indivisibilidade do fenómeno quântico, e elas devem ser portanto consideradas como abstrações necessárias à descrição dos resultados experimentais, o que implica também o abandono da possibilidade de visualização de um sistema quântico tal como

¹⁶ Bohr (1935), p. 699.

seria possível no caso clássico:

"...in these fields the logical correlations can only be won by a far-reaching renunciation of the usual demands of visualization. It would in particular not be out of place in this connection to warn against a misunderstanding likely to arise when one tries to express the content of Heisenberg's uncertainty relations...by such a statement as: 'the position and momentum of a particle cannot simultaneously be measured with arbitrary accuracy'. According to such a formulation it would appear as though we had to do with some arbitrary renunciation of the measurement of either the one or the other of the well-defined attributes of the object, which would not preclude the possibility of a future theory taking both attributes into account on the lines of classical physics. From the above considerations it should be clear that the whole situation in atomic physics deprives of all meaning such inherent attributes as the idealization of classical physics would ascribe to the object."¹⁷

Tentamos nas linhas acima expor de maneira simples alguns aspectos da filosofia de Niels Bohr, e de sua interpretação do formalismo quântico. Embora coerente e aparentemente completa se considerada em seus aspectos gerais, esta interpretação não está, todavia, livre de problemas. Em primeiro lugar, não é clara a relação entre a complementaridade dos modos de descrição clássicos, considerados compatíveis na física clássica e mutuamente excludentes no terreno quântico, e a complementaridade atribuída por ele aos conceitos de onda e partícula, os quais são mutuamente excludentes já no interior da estrutura conceitual

¹⁷ Bohr (1937), pp. 292-293.

clássica e cuja definição, além disso, exige o emprego de ambos os modos de descrição considerados complementares na nova estrutura conceitual¹⁸. Por outro lado, apesar da ênfase posta na indivisibilidade do fenómeno quântico, Bohr parece não ter sido capaz de se libertar totalmente do uso da linguagem de perturbação na explicação de seus pontos de vista:

"...any phenomenon in which we are concerned with tracing a displacement of some atomic object in space and time necessitates the establishment of several coincidences between the object and the rigidly connected bodies and movable devices which ... define the space-time frame of reference to which the phenomenon in question is referred. Just this situation implies, however, a renunciation of any sharp control of the amount of the momentum or energy exchanged during each coincidence between the object and the separate bodies entering into the experimental arrangement."¹⁹

Finalmente, o mesmo tipo de ambigüidade está presente nas considerações sobre a relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. Sabemos, em primeiro lugar, que a estrutura conceitual da complementaridade é vista por Bohr como uma generalização racional da estrutura clássica:

"In representing a generalization of classical physics suited to allow for the existence of the quantum of action..."²⁰

¹⁸De acordo com Folse(1985), p. 120, o próprio Bohr nunca explicou esta relação de maneira adequada.

¹⁹Bohr(1939), p. 22;cit. Folse(1985), n. 25, p. 158.

²⁰Bohr(1948), p. 316.

Por outro lado essa estrutura pode ser empregada nos casos em que as ações envolvidas são muito maiores que o quantum de ação de Planck:

"...classical theories of physics are idealizations which can be unambiguously applied only in the limit where all actions involved are large compared with the quantum."²¹

De um ponto de vista lógico, portanto, as duas estruturas conceituais podem ser consideradas ligadas pelo quantum de ação de Planck: a existência do quantum leva à necessidade de uma generalização da estrutura conceitual clássica, enquanto que nas situações em que o seu valor pode ser negligenciado esta última é uma aproximação satisfatória da estrutura complementar. Parece então possível afirmar que, de acordo com Bohr, as estruturas conceituais em questão transformam-se uma na outra quando a constante de Planck tende a zero, ou quando seu valor pode ser negligenciado. Este tipo de raciocínio, como já vimos, é característico de Bohr, e constitui em realidade uma elaboração das tendências presentes já na formulação do princípio de correspondência: generalização dos tratamentos teóricos com a restrição de sua validade, de maneira a recuperar os resultados antigos em determinados limites, ressaltando sempre o antagonismo entre as duas concepções.

Existe porém uma diferença fundamental entre a nova teoria quântica e a teoria antiga. No domínio da velha teoria o princípio de correspondência serviu como um guia na elaboração do formalismo e no tratamento teórico de cada novo problema, garantindo desta forma sua própria validade, visto que sua

²¹ Bohr(1958), p. 33; veja-se também Bohr(1934), p. 55.

satisfação era demonstrada em cada caso particular. A situação na teoria quântica moderna, porém, era exatamente o inverso desta: Bohr defrontou-se aqui com um formalismo matemático completo que, apesar de seu sucesso, carecia de uma interpretação adequada. O resultado é que, ao mesmo tempo em que exige a utilização dos conceitos clássicos, e sobretudo a aplicação da estrutura conceitual clássica aos aparelhos macroscópicos de medida, Bohr tem necessidade de afirmar a possibilidade de utilização desta estrutura, como podemos ver na passagem citada acima. Sua crença nesta possibilidade, por outro lado, fica ainda mais clara nesta outra:

"Incidentally, it may be remarked that the construction and the functioning of all apparatus...will depend on properties of materials which are themselves essentially determined by the quantum of action. Still, this circumstance is irrelevant for the study of simple atomic phenomena where, in the specification of the experimental conditions, we may to a very high degree of approximation disregard the molecular constitution of the measuring instruments. If only the instruments are sufficiently heavy compared with the atomic objects under investigation, we can in particular neglect the requirements of relation (3) [$\Delta p \Delta q = h/4$] as regards the control of the localization in space and time of the single pieces of apparatus relative to each other."²²

Parece portanto que, para o criador da doutrina da complementaridade, as relações de indeterminação de Heisenberg empregadas na forma dada acima são garantia suficiente para a

²² Bohr (1948), pp. 315-316.

possibilidade de negligenciar efeitos quânticos na descrição do aparelho macroscópico de medida; que este não é o caso, contudo, é bastante claro em vista da insolubilidade, até agora, do problema da medida na mecânica quântica²³. Embora sua interpretação exclua o tratamento quântico do aparelho de medida, necessário à formulação deste problema, Bohr está entretanto ciente da possível necessidade de uma nova revisão da estrutura conceitual clássica, requerida por um novo aumento de seu domínio de aplicação:

"On closer consideration, the present formulation of quantum mechanics in spite of its great fruitfulness would yet seem to be no more than a first step in the necessary generalization of the classical mode of description, justified only by the possibility of disregarding in its domain of application the atomic structure of the measuring instruments themselves in the interpretation of the results of experiment. For a correlation of still deeper lying laws of nature involving not only the mutual interaction of the so-called elementary constituents of matter can no longer be maintained. So we must be prepared for a more comprehensive generalization of the complementary mode of description which will demand a still more radical renunciation of the usual claims of so-called visualization."²⁴

Esta nova generalização, finalmente, estará sujeita às mesmas restrições impostas sobre a primeira, e teremos mais uma vez uma modificação de nossa visão do mundo, necessária à

²³ Cf. Redhead(1987), pp. 52-55.

²⁴ Bohr(1937), p. 294.

interpretação de novas teorias, mas incapaz por si só de demonstrar a relação entre a teoria antiga e aquela que a sucede. Podemos então concluir que, como no caso do princípio de correspondência, a complementaridade é antes de tudo uma expressão de um ponto de vista filosófico, que serve principalmente como o indicador da racionalidade do processo de substituição de teorias, sem contudo ser capaz de demonstrar a existência de uma relação entre elas.

2.2 - DIRAC E A MECÂNICA DE MATRIZES

No período compreendido entre a primeira formulação do princípio de correspondência, em 1918, e a publicação do trabalho de Heisenberg¹ que deu origem à moderna teoria quântica, a velha teoria quântica acumulou uma série de resultados importantes, sem conseguir entretanto consolidar-se como uma teoria auto-suficiente. Ao lado dos insucessos na explicação de certos fenômenos², a teoria não dispunha de um método geral para a solução de problemas. Cada situação nova devia ser tratada previamente com o auxílio das teorias clássicas, traduzindo-se em seguida o resultado obtido para a linguagem dos quanta. Nesta

¹Heisenberg(1925).

²Por exemplo, o efeito da aplicação simultânea de um campo elétrico e um campo magnético sobre as linhas espectrais do hidrogênio. Este problema só foi resolvido em 1925 por W. Pauli (Pauli(1926)), utilizando a mecânica de matrizes de Heisenberg.

última etapa o princípio de correspondência servia como o principal guia do cientista, que deveria contudo lançar mão de suposições adicionais e de uma boa dose de intuição até a descoberta da 'tradução' correta.

Neste panorama, isto é, em um período de transição em que se abandonavam conceitos e teorias, aceitos de longa data, na tentativa de construir uma ciência nova, capaz de dar conta da crescente quantidade de fatos conhecidos e não explicados, as questões filosóficas relativas aos fundamentos das teorias científicas adquirem uma relevância incomum em tempos normais. Além da influência do pensamento de Kierkegaard e Høffding, recebida através de Niels Bohr, Heisenberg manteve contato também com a filosofia kantiana e os escritos de Wittgenstein³. A influência mais decisiva para os rumos de seu trabalho, entretanto, não veio destes filósofos, mas da teoria da relatividade de Einstein, através do tratamento dado por este ao conceito de tempo em sua teoria⁴. Foi dela que Heisenberg obteve a idéia de utilizar quantidades 'observáveis' — por mais vago que isto possa parecer — na nova formulação da teoria quântica, a mecânica de matrizes.

Heisenberg inicia seu trabalho chamando a atenção para o fato de que as regras utilizadas na teoria quântica para o cálculo de grandezas observáveis, como os níveis de energia do átomo de hidrogênio, lançavam mão de quantidades em princípio não observáveis tais como o momento e a posição do elétron no átomo. Este fato, somado aos problemas já mencionados, serve então de

³Cf. Jammer(1966), p. 198.

⁴Jammer(1966), p. 198.

justificativa para uma tentativa de reformular a teoria quântica de forma a utilizar somente grandezas observáveis. Para obter a nova teoria Heisenberg faz um uso extensivo de analogias entre a mecânica clássica e a teoria dos quanta — e.g., substituindo derivadas por diferenças — submetendo sempre cada resultado ao crivo do princípio de correspondência, em um procedimento que parece apontar também na direção da complementaridade de Bohr.

Considerando o problema da emissão de radiação por uma carga em movimento, Heisenberg nota que os termos de ordem igual ou superior à radiação de quadrupolo podem ser facilmente calculados se expandirmos o movimento da partícula em uma série de Fourier, e que poderíamos portanto esperar o mesmo resultado na teoria quântica. De acordo com ele este fato não tem qualquer relação com a eletrodinâmica, possuindo uma natureza puramente cinemática que o torna particularmente importante. Lembrando que não era possível na velha teoria quântica associar ao elétron um ponto no espaço⁵, Heisenberg deixa de lado o tratamento clássico

⁵Segundo van der Waerden(1967), p. 33, Heisenberg estaria cometendo um erro, visto que no átomo de Bohr os elétrons eram dotados de órbitas clássicas bem definidas. Se considerarmos porém o fato de que as transições entre níveis não eram descritas teoricamente, e a preocupação de Heisenberg com a relação entre o movimento do elétron e a radiação emitida — pois a teoria foi construída, por assim dizer, no âmbito das pesquisas em ótica física (cf. Jammer(1966), cap. 4) — veremos que, embora sem torná-lo explícito, Heisenberg refere-se de fato às transições entre as órbitas e ao (possível) movimento correspondente do elétron.

inicial e passa a tratar o problema da radiação emitida que, segundo ele, pode ser observada e atribuída diretamente à partícula⁶.

A frequência da radiação emitida por um elétron em um átomo é dada na teoria quântica por

$$\nu(n, n-\alpha) = (1/h)(W(n) - W(n-\alpha)) \quad , \quad n, \alpha \text{ inteiros} \quad (1)$$

e na mecânica clássica por

$$\nu(n, \alpha) = \alpha \nu(n) = (1/h) dW/dn \quad , \quad (2)$$

onde $nh = J$, uma das constantes de movimento canônicas, e W a energia do elétron no nível n . Destas equações podemos derivar facilmente as relações de combinação de frequências quântica

$$\nu(n, n-\alpha) + \nu(n-\alpha, n-\alpha-\beta) = \nu(n, n-\alpha-\beta) \quad \text{ou} \quad (3)$$

$$\nu(n-\beta, n-\alpha-\beta) + \nu(n, n-\beta) = \nu(n, n-\alpha-\beta) \quad , \quad (4)$$

e clássica

$$\nu(n, \alpha) + \nu(n, \beta) = \nu(n, \alpha+\beta) \quad . \quad (5)$$

A polarização e a fase são definidas com o auxílio de um vetor tridimensional complexo U contendo seis componentes independentes, e dependendo também de n e α . A radiação será dada classicamente por

$$\text{Re}(U_\alpha(n) \exp(i\omega(n)\alpha t)) \quad , \quad (6)$$

e quanticamente por

$$\text{Re}(U(n, n-\alpha) \exp(i\omega(n, n-\alpha)t)) \quad . \quad (7)$$

Heisenberg supõe agora que uma variável clássica $x(t)$ pode ser representada por um conjunto de quantidades complexas do tipo (6), que podem ser combinadas na forma

⁶ Este é um dos pontos em que seu procedimento aponta na direção da complementaridade, i.e. na consideração dos possíveis resultados como ponto de partida para a definição do fenômeno quântico.

$$x(n,t) = \sum_{\alpha} U_{\alpha}(n) \exp(i\omega(n)\alpha t), \quad -\infty < \alpha < \infty, \quad (8)$$

no caso de um movimento periódico, ou em uma integral semelhante para um movimento não-periódico. Embora ressaltando que os vetores complexos $U(n, n-\alpha)$ não podem ser combinados da mesma forma em vista da igualdade de peso das variáveis n e $n-\alpha$, Heisenberg propõe em seguida a questão: se apesar disso usássemos estas grandezas para expressar a grandeza quântica $x(t)$, qual seria a forma de $(x(t))^2$?

O resultado clássico pode ser escrito facilmente como

$$(x(t))^2 = \sum_{\beta} \left\{ \left(\sum_{\alpha} U_{\alpha}(n) \exp(i\omega(n)\alpha t) \right) U_{\beta-\alpha}(n) \exp(i\omega(n)(\beta-\alpha)t) \right\} \quad (9)$$

de onde obtemos, com o auxílio das regras de combinação de frequências 3, 4 e 5:

$$(x(n,t))^2 = \sum_{\beta} B_{\beta}(n) \exp(i\omega(n)\beta t) \quad (10)$$

$$\text{onde} \quad B_{\beta}(n) = \sum_{\alpha} U_{\alpha} U_{\beta-\alpha}. \quad (11)$$

A substituição direta das variáveis clássicas por seus correspondentes quânticos através das equações 1, 2, 6 e 7 em 9 dá como resultado

$$(x(n,t))^2 = \sum_{\beta} \sum_{\alpha} U(n, n-\alpha) \exp(i\omega(n, n-\alpha)t) U(n, n-\beta-\alpha) \exp(i\omega(n, n-\beta-\alpha)t) \quad (12)$$

de modo que

$$(x(n,t))^2 = \sum_{\beta} \sum_{\alpha} U(n, n-\alpha) U(n, n-\beta-\alpha) \exp(i(\omega(n, n-\alpha) + \omega(n-\alpha, n-\beta))t), \quad (13)$$

um resultado diferente da substituição direta em 10 e 11. Levando agora em consideração as leis de combinação de frequências, e

também o princípio de correspondência⁷, Heisenberg substitui a equação 13 por

$$\begin{aligned} (x(n,t))^2 &= \sum_{\beta} \sum_{\alpha} U(n,n-\alpha) U(n-\alpha,n-\beta) \exp(i(\omega(n,n-\alpha) + \omega(n-\alpha,n-\beta))t) \\ &= \sum_{\beta} \left\{ \sum_{\alpha} U(n,n-\alpha) U(n-\alpha,n-\beta) \right\} \exp(i\omega(n,n-\beta)t) , \end{aligned} \quad (14)$$

ou seja,

$$B(n,n-\beta) = \sum_{\alpha} U(n,n-\alpha) U(n-\alpha,n-\beta) , \quad (15)$$

que é a regra de multiplicação para as grandezas quânticas. Heisenberg generaliza imediatamente este resultado para o cálculo de $(x(n,t))^n$ e de $x(n,t)y(n,t)$, chamando a atenção para o fato de que em geral $x(n,t)y(n,t)$ será diferente de $y(n,t)x(n,t)$. Para o caso particular de um produto $v(t)\dot{v}(t)$ ele sugere que o produto quântico correspondente seja escrito como $(1/2)(v\dot{v} + \dot{v}v)$, de modo que $v\dot{v}$ seja igual ao diferencial de $(1/2)v^2$, antecipando de certa forma o trabalho de Dirac e formulando pela primeira vez uma regra para a quantização de sistemas clássicos baseada em um tipo de simetria formal.

Após este tratamento do aspecto cinemático da teoria quântica Heisenberg volta sua atenção para o que chama de problema dinâmico, i.e., a determinação dos U , v e W a partir das forças em ação no sistema (não esqueçamos que todo o desenvolvimento acima tem por objetivo a 'descrição da radiação'. Partindo da equação de movimento

$$\ddot{x} - f(x) = 0 , \quad (16)$$

ele observa a necessidade de substituir $\ddot{x}$ e $f(x)$ por seus

⁷Embora sem explicitá-lo. Se considerarmos porém α e β com a mesma ordem de grandeza e ambos muito menores que n , veremos que o resultado quântico tende ao clássico quando n vai a infinito:

representantes quânticos, a fim de conservar a teoria isenta de quantidades físicas não-observáveis. Todavia, dada a impossibilidade de definir uma função quântica análoga a estas variáveis, Heisenberg é forçado a expressá-las como uma série de Fourier cujos termos obedecem à regra de multiplicação derivada anteriormente; o problema teórico consistirá então de um conjunto infinito de equações a infinitas variáveis, cuja solução por fórmulas recursivas será possível somente em casos particulares.

Antes porém de tratar tais casos Heisenberg encontra as regras de quantização adequadas ao novo formalismo⁸, utilizando sempre o tipo de procedimento já citado, i.e., analogias formais, substituição de diferenciais por diferenças e teste dos resultados obtidos à luz do princípio de correspondência.

Um movimento periódico pode ser descrito classicamente por

$$x = \sum_{\alpha} a_{\alpha}(n) \exp(i\omega_{\alpha}(t)) \quad , \quad (17)$$

o que nos dá, segundo a regra de quantização 'clássica',

$$J = \oint m\dot{x}^2 dt = 2\pi m \sum_{\alpha} |a_{\alpha}(n)|^2 \omega_{\alpha} = nh \quad . \quad (18)$$

Heisenberg considera esta condição "arbitrária no sentido do princípio de correspondência"⁹, pois os J's ficam determinados como múltiplos de h somente a menos de uma constante aditiva, e substitui-a por

$$\frac{d}{dn}(nh) = \frac{d}{dn} \oint m\dot{x}^2 dt \quad , \quad (19)$$

ou seja

⁸Heisenberg(1925), p. 267.

⁹Heisenberg(1925), p. 268.

$$h = 2\pi m \sum_{\alpha} \frac{d}{dn} (a_{\alpha} \omega_n |a_{\alpha}|^2) \quad (20)$$

Embora a nova condição também determine os a_{α} a menos de uma constante, tal indeterminação será eliminada na condição quântica pela exigência que, no estado fundamental n_0 , $a(n_0, n_0 - \alpha)$ seja nulo para todo $\alpha > 0$. A equação 20 é então substituída por uma expressão análoga na qual a derivada em n é substituída por uma diferença:

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

onde os $a(n, n \pm \alpha)$ representam as amplitudes de probabilidade de transição quânticas. No restante do artigo Heisenberg aplica os resultados acima a alguns problemas simples, rederivando resultados já conhecidos para mostrar a utilidade da nova teoria¹⁰.

O trabalho de Heisenberg chegou ao conhecimento de Dirac através de seu supervisor em Cambridge, R. H. Fowler, durante uma temporada de férias em Bristol. Dirac convenceu-se rapidamente de que Heisenberg havia encontrado a chave para os problemas da teoria quântica, e começou a trabalhar imediatamente com a nova teoria¹¹.

Dirac percebeu desde o início de suas investigações que a não-comutatividade das variáveis quânticas que tanto preocupava Heisenberg era de fato a mais importante característica da nova teoria. O problema que se colocava em seguida é portanto o de encontrar um significado físico para o comutador $uv - vu$ de duas

¹⁰ Ele obtém por exemplo a fórmula de Kramers para a dispersão de radiação eletromagnética, além de deduzir os níveis de energia de um oscilador anarmônico, mostrando novamente que quando n aumenta o resultado quântico aproxima-se assintoticamente do clássico.

¹¹ Cf. Dirac(1977), p. 120.

grandezas quânticas u e v ; a solução é encontrada por Dirac através de uma analogia entre a mecânica clássica e a mecânica quântica de consequências importantes para o problema da relação entre ambas.

O parêntesis de Poisson de duas funções f e g na mecânica clássica é dado por:

$$\{f, g\} = \sum_k \left(\frac{\partial f}{\partial q_k} \frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial g}{\partial p_k} \frac{\partial f}{\partial q_k} \right) \quad (22)$$

Da definição seguem-se facilmente as propriedades

$$\{f, g\} = -\{g, f\} \quad (i)$$

$$\{f, c\} = 0 \quad (c = \text{constante}) \quad (ii)$$

$$\{f_1 + f_2, g\} = \{f_1, g\} + \{f_2, g\} \quad (iii)$$

$$\{f_1 f_2, g\} = f_1 \{f_2, g\} + f_2 \{f_1, g\} \quad (iv)$$

$$\{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \quad (v)$$

Além disso, se q_k é uma coordenada generalizada e p_k seu momento generalizado correspondente, temos que

$$\{f, q_k\} = \frac{\partial f}{\partial q_k} \quad (vi)$$

$$\{f, p_k\} = -\frac{\partial f}{\partial q_k} \quad (vii)$$

Da mesma forma, segue-se da definição do produto de Heisenberg que

$$[u, v] = -[v, u] \quad (viii)$$

$$[u, c] = 0 \quad (c = \text{constante}) \quad (ix)$$

$$[u_1 + u_2, v] = [u_1, v] + [u_2, v] \quad (x)$$

$$[u_1 u_2, v] = u_1 [u_2, v] + [u_1, v] u_2 \quad (xi)$$

$$[u, [v, z]] + [v, [z, u]] + [z, [u, v]] = 0 \quad (xii)$$

Embora Dirac não seja muito claro quanto à ordem de suas idéias, parece-nos natural que as propriedades (i) a (v) e (viii) a (xii) tenham sido as primeiras a chamar sua atenção, além da semelhança entre as formas do parêntesis de Poisson e do

comutador. Do mesmo modo, as propriedades (vi) e (vii) devem ter apontado o caminho para uma relação mais forte entre as duas teorias, que foi afinal o método escolhido por ele para a exposição de seus resultados.

Dirac inicia seu trabalho¹² com uma discussão breve dos resultados de Heisenberg, perguntando-se em seguida qual a forma da operação quântica mais geral correspondente a uma diferenciação d/dv , e que satisfaça as propriedades

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

$$\frac{d}{dv}(xy) = \frac{dx}{dv}y + x\frac{dy}{dv}, \quad (II)$$

onde x , y e v são variáveis quânticas e a ordem dos fatores na equação II — como frisa Dirac — deve ser mantida invariável, devido à não-comutatividade do produto de Heisenberg.

A propriedade I (linearidade) exige que a componente (nm) de dx/dv tenha a forma

$$\frac{dx(nm)}{dv} = \sum_{n'm'} a(nm;n'm')x(n'm'), \quad (23)$$

enquanto a condição II se transforma em

$$\begin{aligned} \sum_{n'm'k} a(nm;n'm')x(n'k)y(km') = \\ \sum_{kn'k'} a(nk;n'k')x(n'k')y(km) + \sum_{kk'm} x(nk)a(km,k'm')y(k'm'). \end{aligned} \quad (24)$$

Como a equação 24 deve ser verdadeira para todas as possíveis amplitudes de x e y , aparecem então condições sobre os coeficientes $a(nm;n'm')$ quando igualamos os dois lados da equação.

O resultado final é

$$\frac{dx(nm)}{dv} = \sum_k (x(nk)a(km) - a(nk)x(km)), \quad (25)$$

isto é,

¹²Dirac(1926a)

$$\frac{dx}{dv} = x_a - ax. \quad (26)$$

Vemos assim que a operação quântica correspondente à diferenciação de uma variável quântica com respeito a outra é igual ao comutador da primeira com uma outra variável ainda não determinada, uma relação semelhante às relações clássicas (vi) e (vii), e que vem reforçar a analogia formal existente entre as duas teorias. Uma outra relação, semelhante àquelas demonstradas por Bohr na velha teoria quântica, é apresentada em seguida por Dirac, e serve de base para suas afirmações sobre o limite clássico da mecânica quântica.

A componente (nm) do comutador de duas variáveis quânticas x e y é

$$\begin{aligned} (xy-yx)(nm) &= \sum_{\alpha+\beta=n-m} [x(n,n-\alpha)y(n-\alpha,\beta) - y(n,n-\alpha)x(n-\alpha,n-\beta)] \\ &= \sum_{\alpha+\beta=n-m} \{ [x(n,n-\alpha) - x(n-\beta,n-\beta-\alpha)] y(n-\alpha,n-\alpha-\beta) - \\ &\quad - [y(n,n-\beta) - y(n-\alpha,n-\alpha-\beta)] x(n-\beta,n-\beta-\alpha) \}. \end{aligned} \quad (27)$$

Dirac escreve em seguida

$$x(n,n-\alpha) = x_{\alpha k}, \quad (28)$$

onde α e k representam dois conjuntos de índices $\{k_1, k_2, \dots\}$ e $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}$ utilizados na expansão de $x(n,n-\alpha)$ em séries de Fourier das variáveis angulares e de ação, com $k_r = n_r \hbar$ ou $(n_r + \alpha_r)$, i.e., $x(n,n-\alpha)$ varia muito lentamente para n grande e $\alpha \ll n$. Utilizando agora a generalização, feita por Heisenberg e Kramers¹³, da regra de correspondência de Born¹⁴

$$\tau \frac{\partial}{\partial n} F(n, \tau) \Leftrightarrow F_{n+\tau, n} - F_{n, n-\tau}, \quad n, \tau \text{ inteiros}, \quad (29)$$

encontramos o correspondente clássico da equação 27:

¹³Kramers(1925), p. 234.

¹⁴Born(1924), p. 191; cf. também Jammer(1966), p. 202.

$$(xy-yx)(nm) = \sum_{\alpha+\beta=n-m} h \left\{ \left[\beta_r \frac{\partial}{\partial k_r} x_{\alpha k} y_{\beta k} - \alpha_r \frac{\partial}{\partial k_r} y_{\alpha k} x_{\beta k} \right] \right\}. \quad (30)$$

Porém

$$2\pi i \beta_r y_{\beta} \exp(i\beta\omega t) = \frac{\partial}{\partial w_r} y_{\beta} \exp(i\beta\omega t) \quad (31)$$

$$\text{e} \quad 2\pi i \alpha_r x_{\alpha} \exp(i\alpha\omega t) = \frac{\partial}{\partial w_r} x_{\alpha} \exp(i\alpha\omega t), \quad (32)$$

onde $w_r = \omega_r t / 2\pi$ são as variáveis angulares. A equação 30 se transforma então em

$$(xy-yx)(nm) = \sum_{\alpha+\beta=n-m} (-i\hbar) \sum \left\{ \frac{\partial}{\partial k_r} (x_{\alpha} \exp(i\alpha\omega t)) \frac{\partial}{\partial w_r} (y_{\beta} \exp(i\beta\omega t)) - \frac{\partial}{\partial k_r} (y_{\beta} \exp(i\beta\omega t)) \frac{\partial}{\partial w_r} (x_{\alpha} \exp(i\alpha\omega t)) \right\}. \quad (33)$$

Finalmente, fazendo os k_r iguais às variáveis de ação J_r , vemos que o comutador de x e y é

$$\begin{aligned} (xy-yx) &= i\hbar \sum_r \left\{ \frac{\partial x}{\partial w_r} \frac{\partial y}{\partial J_r} - \frac{\partial y}{\partial w_r} \frac{\partial x}{\partial J_r} \right\} \\ &= i\hbar \sum_r \left\{ \frac{\partial x}{\partial q_r} \frac{\partial y}{\partial p_r} - \frac{\partial y}{\partial q_r} \frac{\partial x}{\partial p_r} \right\}, \end{aligned} \quad (34)$$

onde q_r e p_r são as variáveis canônicas que descrevem o sistema. Dado que o lado direito da equação 34 representa o parêntesis de Poisson clássico, podemos então escrever

$$[x, y] = i\hbar \{x, y\}, \quad (35)$$

onde temos à esquerda o comutador das variáveis x e y , e à direita seu parêntesis de Poisson clássico. Estes, por outro lado, satisfazem as exigências I e II impostas por Dirac à diferenciação quântica. Portanto, dadas as propriedades do comutador e as relações de comutação fundamentais deduzidas com o auxílio da equação 35,

$$[q_r, q_s] = 0, \quad (36a)$$

$$[p_r, p_s] = 0, \quad (36b)$$

$$[q_r, p_s] = i\hbar \delta_{rs}, \quad (36c)$$

podemos em princípio calcular o valor do comutador para qualquer

função algébrica dos q 's e p 's .

O último passo de Dirac consiste em postular que "a diferença entre os produtos de Heisenberg de duas quantidades quânticas é igual a $i\hbar$ vezes a expressão de seu parêntesis de Poisson."¹⁵ A única informação real contida na equação 35, porém, refere-se aos p 's e q 's, visto que todas as demais funções serão escritas em termos deles; Dirac chama essa equação de "condições quânticas gerais".¹⁶

A principal consequência deste resultado, como o próprio Dirac observa, está em mostrar a consistência da nova mecânica com as equações de movimento clássicas. Essa consistência não decorre tanto do fato de que quando $\hbar$ tende a zero o comutador de duas grandezas quânticas quaisquer também se anula — i.e., passa a valer a propriedade comutativa para o produto de Heisenberg — e sim da igualdade de propriedades entre a operação clássica (parêntesis de Poisson) e seu correspondente quântico (comutador), de tal forma que uma inconsistência em uma das teorias levaria fatalmente a uma inconsistência na outra. Com efeito, as propriedades (i), (iii) e (v), e seus correspondentes quânticos (viii), (x) e (xii), formam com seus respectivos espaços uma álgebra de Lie, i.e., o espaço das funções da mecânica clássica, munido do parêntesis de Poisson como operação de associação entre seus elementos, possui a mesma estrutura que o espaço dos operadores da mecânica quântica associados através do comutador. As afirmações de Dirac sobre a relação entre a mecânica de matrizes e a mecânica clássica não possuem, contudo,

¹⁵Dirac(1926a), p. 314.

¹⁶Dirac(1926a), p. 315.

uma base tão sólida.

Em primeiro lugar devemos ter em mente que as condições quânticas gerais (eq.35) foram obtidas para a região de altos números quânticos, e é portanto apenas nessa região que o produto de Heisenberg torna-se comutativo quando a constante de Planck tende a zero. É somente a aplicação do princípio de correspondência, i.e., a suposição de que o resultado válido para altos números quânticos serve também para valores arbitrários de n , que permite a Dirac fazer essa afirmação. Caso contrário seria necessária a ressalva de que a igualdade 35 só é válida quando n tende a infinito.

Além disso, mesmo esse resultado só é válido para alguns tipos especiais de operadores, em particular p e q ¹⁷. Entretanto, para a grande maioria dos operadores construtíveis a partir de p e q a equação 35 não é válida, de modo que a afirmação de que quando h tende a zero o comutador de duas variáveis quânticas se anula também não é em geral verdadeira. Que estas restrições são inevitáveis, finalmente, parece ser possível concluir-se dos resultados de Max Born e Pascual Jordan¹⁸.

Ao contrário de Dirac, Born reconheceu rapidamente na regra de multiplicação de Heisenberg o produto matricial, o que lhe permitiu um tratamento mais rigoroso dos problemas surgidos com a nova teoria. Após uma exposição breve dos fundamentos do cálculo matricial, Born e Jordan apresentam na segunda parte de seu artigo um processo de diferenciação simbólica de funções matriciais analíticas que, como sabemos, foi o ponto de partida

¹⁷Veja-se a este respeito a seção 3.4.

¹⁸Born e Jordan(1925).

escolhido por Dirac para a apresentação de seus próprios resultados. Esses resultados, porém, perdem em generalidade para os de Born e Jordan pois, no caso de Dirac, o processo de diferenciação só é realizável quando dispomos do hamiltoniano do sistema; Caso contrário só poderemos dizer que o comutador de duas variáveis é igual à derivada de uma delas em relação a uma terceira variável ainda desconhecida.

A consequência desta perda de generalidade, por outro lado, reflete-se no fato de que enquanto Dirac é obrigado a postular a validade na mecânica quântica das equações de movimento canônicas — com a ressalva de que isto só é possível em situações onde o hamiltoniano não depende da ordem em que se multiplicam os fatores — Born e Jordan conseguem derivar essas equações, com o auxílio do princípio de mínima ação, para o caso de um hamiltoniano arbitrário. No que se refere à existência de uma relação mais profunda entre a mecânica quântica e a mecânica clássica este resultado parece muito mais significativo que as afirmações de Dirac, i.e., a possibilidade de tal relação é fortalecida mais pela existência de um princípio comum às duas teorias do que pelas considerações a respeito do limite em que a constante de Planck tende a zero¹⁹.

Um apoio suplementar a esta visão decorre finalmente do fato de que mesmo na abordagem mais precisa de Born e Jordan as condições de quantização devem ser postuladas, na forma das equações de comutação (36a,b,c), pois ambos conseguem mostrar somente que a matriz $pq - qp$ é diagonal, sem obter contudo

¹⁹ Veremos mais tarde (sec. 3.5) como estes resultados (limites e princípios) se unem em uma análise mais moderna dessas teorias.

um valor determinado para seus elementos²⁰. Vemos assim mais uma vez que é a exigência de uma relação entre a mecânica clássica e a mecânica quântica que determina a forma definitiva desta última, pois é exatamente este tipo de raciocínio que leva às condições de quantização usadas por Heisenberg, Dirac, Born e Jordan.

²⁰Cf. Born e Jordan(1925), p. 39.

3 - Relações entre a Mecânica Clássica e a Mecânica Quântica

3.1 - INTRODUÇÃO

Como vimos nos dois capítulos anteriores, a idéia de que deve haver uma relação entre a mecânica clássica e a teoria quântica já estava presente nos primeiros trabalhos de alguns dos criadores desta última teoria, em cuja elaboração teve um papel importante devido a sua força heurística.

Todavia, a forma escolhida para o estabelecimento dessa relação difere, como vimos, para cada um dos autores estudados até agora. Ehrenfest transforma seu teorema, deduzido no âmbito da mecânica clássica, em um postulado, o Princípio Adiabático, utilizado na formulação de leis de quantização para os sistemas estudados na velha teoria quântica, enquanto Bohr considera a região de altos números quânticos para recuperar em tais sistemas um comportamento semelhante àquele previsto pela mecânica clássica. Esta aparente harmonia entre as duas teorias será rompida em 1925 com a publicação dos trabalhos de Heisenberg, com o que pelo menos dois novos caminhos vão se abrir: Bohr, com sua filosofia da Complementaridade, tenta agora estabelecer uma interpretação da nova teoria e de sua relação com a mecânica

clássica em bases puramente filosóficas, enquanto Dirac, considerando novamente a região de altos números quânticos, obtém um resultado mais geral relativo às suas estruturas matemáticas. Veremos adiante que tais procedimentos se reproduzem nas tentativas mais modernas de relacionar as duas teorias.

Desde o surgimento da mecânica quântica a questão da sua relação com a mecânica clássica tem sido causa de debates tanto no âmbito da pesquisa em física quanto na filosofia da ciência. Com efeito, o problema da relação entre duas teorias científicas que se sucedem no tempo possui tanto aspectos puramente teóricos, entregues à investigação por parte dos especialistas nas teorias em questão, quanto filosóficos, tratados pela epistemologia da ciência propriamente dita. Embora a própria possibilidade de uma redução interteórica tenha sido negada por alguns filósofos, como veremos mais tarde, a pesquisa teórica sobre a relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica desenvolveu-se rapidamente desde os primórdios da moderna teoria quântica, originando uma extensa literatura na qual se misturam os mais diferentes tipos de questões e tratamentos teóricos. A relação entre condições teóricas e filosóficas para uma redução serão estudadas mais tarde. Neste capítulo analisaremos alguns dos resultados teóricos mais relevantes para nosso problema, assim como sua colocação no campo da pesquisa nos fundamentos da mecânica quântica. As considerações de ordem filosófica serão deixadas para a terceira parte deste trabalho, onde analisaremos os aspectos epistemológicos da redução inter-teórica, e discutiremos a partir deste ponto de vista os resultados teóricos apresentados neste capítulo. Antes, porém, de passarmos à apresentação desses resultados, analisaremos um exemplo simples de

relação entre duas teorias, a mecânica newtoniana e a relatividade restrita, a fim de tornar mais claro o problema a ser estudado. O caso unidimensional é suficiente para o que queremos.

Sejam dois sistemas de referência inerciais S_1 e S_2 , cujas origens coincidem no instante $t=0$, e que se movem com velocidade relativa v constante (fig. 1a).

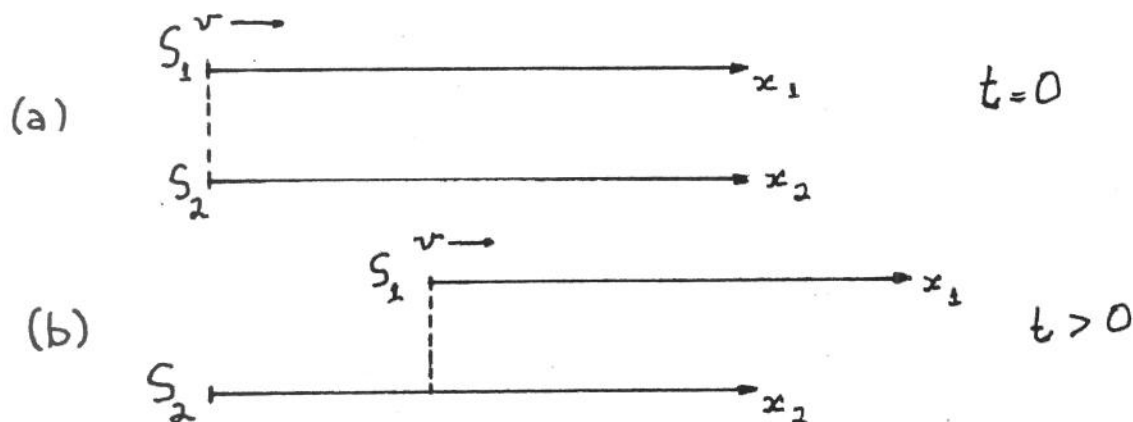


Fig 1

A posição de um corpo cuja coordenada em S_1 é x_1 é dada no sistema S_2 por

$$x_2 = (x_1 + vt) / (1 - v^2/c^2)^{1/2}, \quad (1)$$

onde c = velocidade da luz. As origens dos dois referenciais coincidem no instante $t = 0$. A equação 1 é uma transformação de Lorentz, e contém no denominador a constante c da velocidade da luz, normalmente considerada como caracterizando a teoria da relatividade especial. se considerarmos agora que a velocidade relativa dos referenciais S_1 e S_2 é muito pequena em comparação com a velocidade da luz, $v \ll c$, podemos calcular o limite da equação 1 quando a razão v/c tende a zero, obtendo:

$$\lim_{v/c \rightarrow 0} x_2 = \lim_{v/c \rightarrow 0} [(x_1 + vt) / (1 - (v/c)^2)^{1/2}] = x_1 + vt. \quad (2)$$

Da mesma forma, se fizermos agora a velocidade da luz c tender a infinito, obteremos novamente

$$\lim_{c \rightarrow \infty} x_2 = \lim_{c \rightarrow \infty} [(x_1 + vt) / (1 - (v/c)^2)^{1/2}] = x_1 + vt. \quad (3)$$

Em ambos os casos acima a transformação de Lorentz (eq. 1) torna-se idêntica à transformação de Galileu (eqs. 2 e 3), que faz parte do grupo de invariância da mecânica clássica, mas não do grupo da relatividade restrita.

No exemplo acima mostramos dois procedimentos distintos através dos quais tentamos estabelecer uma relação entre a relatividade especial e a mecânica clássica. Embora o resultado seja o mesmo nos dois casos, não podemos de forma alguma considerá-los equivalentes. Com efeito, o primeiro procedimento parte de uma hipótese física bastante simples, na qual analisamos a forma da equação 1 quando c possui seu valor normal, e a velocidade v é muito pequena em comparação com c . É este o caso da maioria das situações encontradas em laboratórios e na vida quotidiana, e o resultado obtido por este procedimento (eq. 2) justifica de certa forma a aplicação, dentro de certos limites, da mecânica clássica nessas situações como uma aproximação das equações da relatividade especial.

O segundo método utilizado não pode, porém, ser interpretado de maneira tão simples, na medida em que não podemos relacioná-lo com uma situação física real; o resultado mostrado na equação 3 equivale de fato à formulação do seguinte contrafactual envolvendo a velocidade da luz: "Se a velocidade da luz fosse infinita, as transformações de Lorentz seriam idênticas às transformações de Galileu". Embora uma situação deste tipo jamais

possa ser encontrada, os resultados obtidos dessa forma permanecem abertos à investigação, e poderão revelar-se importantes tanto para o cientista quanto para o filósofo da ciência. Finalmente, devemos ressaltar que tanto a equação 2 quanto a equação 3 estabelecem uma relação entre as duas teorias somente na medida em que ambas podem ser caracterizadas por seus grupos de transformações. No caso do limite $c \rightarrow \infty$, por exemplo, temos para a energia relativística de um corpo com massa de repouso m_0 :

$$E = m_0 c^2 / (1 - (v/c)^2)^{1/2} = m_0 c^2 [1 + v^2/2c^2 + O((v/c)^3)]; \quad (4)$$

quando a velocidade da luz c aumenta indefinidamente, a energia E tende a infinito e o resultado clássico não é recuperado. Em outras palavras, as transformações de Lorentz e Galileu não são suficientes para caracterizar totalmente as duas teorias, no sentido de que não basta encontrar uma relação entre os dois grupos de transformações para que a teoria da relatividade se relacione da mesma forma com a mecânica clássica, i.e., para que a relação entre os grupos se estenda às teorias.

No caso específico da relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica trabalharemos com um tipo de procedimento paralelo àquele esboçado acima para a relação relatividade restrita-mecânica newtoniana. Aqui a constante universal determinante da diferença entre as duas teorias é a constante de Planck, h , que aparece nas equações da mecânica quântica e está ausente das equações clássicas¹. O limite correspondente à equação 3 é aquele em que o valor de h tende a zero.

¹ Ao longo do texto usaremos frequentemente a constante $\hbar = h/2\pi$ no lugar da constante de Planck h .

Apesar de seu enorme sucesso no que diz respeito às suas predições, a mecânica quântica suscita até hoje debates e discussões não somente sobre sua interpretação mas também sobre a própria aplicação do formalismo a determinados sistemas. O resultado desta situação é que a literatura existente sobre o limite clássico da mecânica quântica abriga de fato trabalhos relativos a assuntos bastante diferentes, desde problemas de interpretação até métodos de aproximação. É possível contudo delimitar três grandes grupos que reproduzem de maneira geral os exemplos estudados na primeira parte, e que serão analisados separadamente. Assim, a partir dos dois procedimentos básicos apresentados acima, tentaremos delinear nas seções seguintes o estado em que se encontram os estudos da relação entre a teoria quântica não-relativística e a mecânica clássica, do ponto de vista teórico-matemático, deixando pra a terceira parte a discussão dos aspectos filosóficos do problema da redução. Dividiremos portanto os trabalhos analisados segundo suas propostas de responder a uma das questões seguintes:

I - A mecânica quântica é capaz de recuperar os resultados da mecânica clássica nas situações em que esta última teoria pode ser considerada empiricamente adequada ?

II - É possível, a partir das soluções apresentadas pela mecânica clássica para certos problemas, resolver problemas semelhantes no âmbito da mecânica quântica ?

III - Qual é a relação, se existe alguma, entre as duas teorias enquanto construções matemáticas abstratas ?

Cada uma destas questões propõe problemas diferentes, e requer em consequência procedimentos diferentes para sua solução. A primeira delas, no espírito do princípio de

correspondência, representa a idéia mais simples e básica de redução, e corresponde ao tipo de limite clássico exemplificado pela equação 2. A segunda questão surge a partir dos problemas de interpretação da teoria quântica, e do problema da quantização (cf. seções 3.3 e 3.4). Finalmente, a questão III trata a relação mais geral possível entre as duas teorias, considerando-as em sua totalidade; nestes dois últimos casos podemos ou não considerar um valor finito para a constante de Planck. É necessário notar, porém, que uma resposta a uma das três questões não implica por si só uma resposta às outras duas. Na próxima seção, portanto, analisaremos os resultados mais conhecidos para uma resposta à questão I.

3.2 - O LIMITE CLASSICO PARA h FINITO

As primeiras tentativas de relacionar a mecânica quântica e a mecânica clássica surgiram como resposta à questão I da última seção, isto é, tentou-se encontrar, a partir da solução de certos problemas tipicamente quânticos, como os níveis de energia do átomo de hidrogênio, algum tipo de limite no qual a solução quântica fosse semelhante aos resultados previstos de acordo com o cálculo clássico correspondente.

Como já foi visto na primeira parte deste trabalho, este tipo de procedimento remonta à velha teoria quântica, e já estava presente nos primeiros artigos de Bohr sobre a teoria atômica (e.g. Bohr(1913)). Esta idéia está de fato na base de sua formulação do princípio de correspondência, cujo valor heurístico já pode ser apreciado. Desde aquela época o limite de altos números quânticos tem sido encarado por um grande número de cientistas como um exemplo da validade desse princípio, e como uma demonstração de que, nesse limite, as teorias quântica e clássica são equivalentes (e.g. Schiff(1955), p. 65). Que tal não é o caso,

porém, pode ser visto facilmente através de uma análise mais detalhada do problema.

Existem vários exemplos na literatura de considerações sobre o limite de altos números quânticos¹; entre eles escolhemos, por sua simplicidade e adequação a nossos objetivos, o tratamento de Cabrera e Kiwi(1987). Estes autores consideram uma superposição de três auto-estados do oscilador harmônico unidimensional com números quânticos sucessivos $(n-1)$, n e $(n+1)$. O espaço de Hilbert correspondente pode ser descrito em termos da base ortonormalizada

$$\psi_1 = (1/3)^{1/2} (\varphi_{n-1} + \varphi_n + \varphi_{n+1}), \quad (1a)$$

$$\psi_2 = -(1/2\sqrt{3}) [(1+i\sqrt{3})\varphi_{n-1} - 2\varphi_n + (1-i\sqrt{3})\varphi_{n+1}] \quad (1b)$$

$$\text{e } \psi_3 = -(1/2\sqrt{3}) [(1-i\sqrt{3})\varphi_{n-1} - 2\varphi_n + (1+i\sqrt{3})\varphi_{n+1}]; \quad (1c)$$

as funções de onda $\varphi_{n-1}, \varphi_n, \varphi_{n+1}$ representam os auto-estados do hamiltoniano com números quânticos $(n-1)$, n e $(n+1)$ respectivamente. O valor médio do hamiltoniano nos três estados da base é $\langle \rangle$ indica sempre o valor médio ('expectation value')

$$\langle H \rangle = \int \psi_i^* H \psi_i dx = (n + 1/2) \hbar \omega, \quad i=1,2,3, \quad (2)$$

onde ω é a frequência angular característica do oscilador tratado. A função de onda dependente do tempo para um sistema no estado ψ_i em $t=0$ é

$$\psi(t) = (i/\sqrt{3}) [\varphi_{n-1} \exp(-iE_{n-1}t/\hbar) + \varphi_n \exp(-iE_n t/\hbar) + \varphi_{n+1} \exp(-iE_{n+1} t/\hbar)] \quad (3)$$

Neste estado, segundo Cabrera e Kiwi, o valor médio da posição x da partícula realiza um movimento harmônico de frequência angular ω idêntica à frequência do oscilador clássico correspondente:

$$\langle x \rangle(t) = \frac{2}{3} \left[\frac{\hbar}{2m\omega} \right]^{1/2} (\sqrt{n} + \sqrt{n+1}) \cos \omega t. \quad (4)$$

¹Por exemplo, Chen e Rhodes((1984), Schiff(965)

É interessante notar que a frequência de oscilação do centro de massa do sistema, neste caso, não depende do valor do número quântico principal. Por outro lado, no limite em que este número tende a infinito teremos

$$\langle x \rangle(t) = (2/3) A \cos \omega t, \quad (5)$$

onde $A = (2E/m\omega^2)^{1/2}$ é a amplitude de um oscilador clássico, ou seja, o centro de massa do sistema quântico oscila com a mesma frequência do sistema clássico, mas com dois terços de sua amplitude.

O principal problema para o estabelecimento da relação mecânica quântica-mecânica clássica pela consideração do limite de altos números quânticos é a ausência de um critério único para a determinação da qualidade dos resultados obtidos. Em outras palavras, não sabemos em que deve consistir uma identificação entre as duas teorias para poder ser considerada como uma demonstração satisfatória de uma relação entre elas. Acabamos de ver que um sistema tão simples quanto uma superposição de três auto-estados do oscilador harmônico já apresenta discrepâncias em relação a um oscilador clássico, pois embora o centro de massa do sistema oscile com frequência angular ω nos dois casos, a amplitude do oscilador quântico é diferente da amplitude clássica, mesmo no limite de altos números quânticos. A determinação do peso desta discrepância nas considerações desse limite não é óbvia, e parece impossível encontrar um critério adequado para todas as relações deste tipo que podem ser imaginadas.

A necessidade de um tal critério é mais notável ainda no exemplo apresentado por Hill (1966), p.439). No lugar do limite de altos números quânticos Hill considera um

pacote de ondas unidimensional dado no instante $t=0$ pela função de onda

$$\psi(x,0) = (1/b^{1/2} \pi^{1/4}) \exp(-x^2/2b^2) \exp(-ipx/\hbar) ; \quad (6)$$

a densidade de probabilidade associada é dada por

$$\rho(x,0) = |\psi(x,0)|^2 = (1/b\pi^{1/2}) \exp(-x^2/b^2) . \quad (7)$$

Segundo Hill, a densidade de probabilidade em um tempo $t>0$ será dada então por

$$\rho(x,t) = (1/b(t)\pi^{1/2}) \exp\left[-(x-pt/m)^2/(b(t))^2\right] , \quad (8)$$

$$\text{onde} \quad b(t) = b \left[1 + (\hbar t/mb^2)^2\right]^{1/2} ; \quad (9)$$

nas equações 6-9 o parâmetro b é uma medida da concentração do pacote de ondas², a constante p representa seu momento inicial, e m a massa da partícula. com a equação 9 podemos agora determinar o tempo necessário para o pacote dobrar sua largura inicial:

$$T = t[b(t)=2b] = \sqrt{3} mb^2/\hbar ; \quad (10)$$

a tabela I mostra o valor de T para alguns valores de b e m .

m (gramas)	b (cm)	T
1	0,1	$6 \cdot 10^{27}$ anos
$1,6 \cdot 10^{-24}$	0,1	28 segundos
$0,9 \cdot 10^{-27}$	0,1	0,02 segundos
$0,9 \cdot 10^{-27}$	10^{-8}	$2 \cdot 10^{-16}$ segundos

TABELA I - Valores de T para diferentes valores da massa m e da largura inicial b do pacote de ondas (cf. Hill(1966), p.439)

O primeiro grupo de valores refere-se a uma partícula de massa e dimensões macroscópicas; o tempo necessário

²Em $x=b$, $\rho(b,0) = e^{-1}/b\pi^{1/2} \approx \rho(0,0)/2$, i.e. a densidade de probabilidade tem aproximadamente a metade de seu valor no centro do pacote.

para que o pacote de ondas dobre sua largura é tão grande que elimina qualquer possibilidade de observação de um fenômeno deste tipo. A segunda linha da tabela representa um próton em um acelerador de partículas; novamente o tempo de alargamento é bastante grande em comparação com o tempo de percurso do próton no interior do acelerador. As duas últimas entradas tratam de um partícula de massa eletrônica em um experimento comum de laboratório e em uma região de dimensões atômicas, respectivamente. Embora no primeiro caso seja justificável o tratamento clássico dos sistemas simples usados em laboratório, a taxa de alargamento é tão alta no caso atômico que se torna praticamente impossível falar de uma localização da partícula.

Hill considera tais resultados uma justificativa aceitável para o uso da cinemática clássica em experimentos de física moderna. Embora isto seja verdadeiro para os exemplos da segunda e da terceira linhas da tabela I, o resultado obtido para o caso do corpo macroscópico não implica necessariamente uma relação de equivalência entre as duas teorias. Em primeiro lugar, é difícil considerar a simples atribuição de um pacote de ondas a um sistema macroscópico como uma descrição completa do ponto de vista quântico, pois esta atribuição possui por si só um componente arbitrário: poderíamos atribuir a um mesmo sistema um grande número de pacotes de onda diferentes, obtendo resultados semelhantes aos da tabela I, sem que pudéssemos em nenhum caso afirmar de maneira conclusiva qual é de fato o estado do sistema. Suponhamos, por exemplo, que o corpo descrito na linha 1 da tabela seja usado para um experimento relativo ao efeito fotoelétrico: a descrição dos resultados obtidos exige um tratamento das características microscópicas do sistema, no qual se levarão em

consideração sua estrutura atômica e as partículas que o compõem, e onde será atribuída ao sistema uma certa função de onda da qual farão parte estes elementos. Que justificativa existe, neste caso, para substituímos esta função de onda de um sistema composto de muitas entidades por um pacote de ondas, como se tal sistema fosse apenas uma partícula que obedecesse as leis da mecânica quântica ? Embora a teoria usada não implique necessariamente uma ontologia, é difícil entender como se pode tratar um sistema de duas formas que pressupõem ontologias distintas e incompatíveis, ao mesmo tempo em que se afirma que ambas as descrições se referem ao mesmo sistema³.

Por outro lado, o pacote de ondas oferece uma descrição do sistema equivalente à descrição clássica somente no que diz respeito à sua posição e ao seu momento. Poderíamos portanto atribuir este pacote de ondas a um aparelho de medida para um experimento semelhante ao do gato de Schrödinger: o fato do sistema macroscópico estar bem localizado no espaço não o impediria de tornar-se uma superposição de auto-estados de algum outro observável, e não poderíamos mais falar de uma equivalência entre as descrições quântica e clássica, visto que a simples

³Esta conclusão poderia ser negada com a ajuda de uma visão instrumentalista da ciência. Mesmo este ponto de vista, contudo, não pode salvar Hill da crítica seguinte.

noção de superposição é incompatível com esta última teoria⁴.

Um resultado mais geral e rigoroso a respeito de valores médios, no espírito dos exemplo construídos por Hill, foi apresentado por Ehrenfest em 1927. O teorema que leva seu nome, da mesma forma que os exemplos apresentados até agora, é encontrado em muitos livros-texto de mecânica quântica e, como aqueles exemplos, considerado normalmente como uma demonstração da validade da mecânica clássica para certos sistemas quânticos.

Consideremos um sistema quântico arbitrário descrito por coordenadas cartesianas $q_1, \dots, q_r$ e pelos momentos conjugados $p_1, \dots, p_r$. Segundo a teoria quântica, a derivada temporal dos valores médios dos q 's e p 's é dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle q_i \rangle = \langle [q_i, H] \rangle \quad (11a)$$

$$\text{e} \quad i\hbar \frac{d}{dt} \langle p_i \rangle = \langle [p_i, H] \rangle, \quad i=1, \dots, r \quad (11b)$$

onde $\langle \rangle$ indica o valor médio ('expectation value'), H é o operador

⁴Um resultado semelhante ao de Hill baseia-se nas relações de indeterminação de Heisenberg, aplicando-se essas relações diretamente a um corpo de dimensões macroscópicas. A indeterminação da posição e do momento resultantes, da ordem de $\hbar$, é muito menor que a precisão de qualquer medida realizável em laboratório. Falta porém, como no caso de Hill, uma justificativa para a aplicação direta de um resultado teórico quântico a um corpo macroscópico. Se acrescentarmos a este fato toda a problemática relativa à interpretação das relações de Heisenberg, vemos que tais resultados não podem ser considerados conclusivos. Um tratamento como este pode ser encontrado em Cohen-Tannoudji, Diu e Laloë (1977), p.45. Para a discussão das relações de Heisenberg veja-se Price e Chissick (1977).

hamiltoniano do sistema e $[.,.]$ representa o comutador de dois operadores:

$$[a,b] = ab - ba \quad . \quad (12)$$

O valor dos comutadores é facilmente calculado (cf. Messiah(1965), pp. 173 segs.) e as equações 11 se tornam (teorema de Ehrenfest):

$$\frac{d}{dt} \langle q_i \rangle = \langle \frac{\partial H}{\partial p_i} \rangle \quad (13a)$$

$$e \quad \frac{d}{dt} \langle p_i \rangle = - \langle \frac{\partial H}{\partial q_i} \rangle \quad , \quad i=1, \dots, r \quad (13b)$$

Para um sistema descrito de acordo com o formalismo hamiltoniano clássico as equações correspondentes são

$$\frac{d}{dt} q_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (14a)$$

$$e \quad \frac{d}{dt} p_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad . \quad (14b)$$

Devemos analisar agora a diferença entre as equações 13 e o resultado clássico correspondente 14.

As derivadas em relação ao tempo das grandezas clássicas q_i e p_i são funções bem determinadas do hamiltoniano clássico H do sistema: a evolução temporal destas quantidades é dada pelo hamiltoniano e por seus valores no instante inicial. No caso quântico, pelo contrário, a evolução temporal dos valores médios dos q 's e p 's depende do valor médio das derivadas do Hamiltoniano $\langle \partial H / \partial p_i \rangle$ e $-\langle \partial H / \partial q_i \rangle$; seu cálculo exige portanto o conhecimento prévio da função de onda $\psi(t)$ do sistema.

O teorema de Ehrenfest é muitas vezes interpretado como uma demonstração de que os valores médios das variáveis canônicas quânticas q e p obedecem as leis da mecânica clássica, e que se pode dessa forma recuperar as equações de Newton na mecânica quântica (cf. Hill(1966), p. 438). Isto só é verdadeiro, porém, nos casos em que podemos substituir os valores médios das

funções nos segundos membros das equações 13 pelos valores dessas funções nos valores médios de suas variáveis, isto é, se

$$\left\langle \frac{\partial}{\partial p_i} H(q_1, \dots, q_r; p_1, \dots, p_r) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial p_i} H(\langle q_1 \rangle, \dots, \langle q_r \rangle; \langle p_1 \rangle, \dots, \langle p_r \rangle) \quad (15a)$$

$$\text{e } \left\langle \frac{\partial}{\partial q_i} H(q_1, \dots, q_r; p_1, \dots, p_r) \right\rangle = \frac{\partial}{\partial q_i} H(\langle q_1 \rangle, \dots, \langle q_r \rangle; \langle p_1 \rangle, \dots, \langle p_r \rangle) \quad (15b)$$

esta substituição, porém, só é possível nos casos em que o hamiltoniano do sistema é um polinômio de grau menor ou igual a dois nas variáveis q_i e p_i (e.g. partícula livre e oscilador harmônico). Nos casos em que esta condição não é satisfeita tal substituição só será possível se as flutuações dos valores dos p 's e q 's em torno de seus valores médios for pequena o bastante para ser negligenciada.

Suponhamos porém que é sempre possível satisfazer as equações 15, e indaguemos agora se o resultado de Ehrenfest pode servir de base ao estabelecimento de uma relação entre a teoria quântica e a mecânica clássica, mais precisamente, se este teorema é capaz de caracterizar de forma clara a região de validade da mecânica clássica. A força do teorema de Ehrenfest torna-se então, ironicamente, sua fraqueza: devido à validade geral do teorema — deduzido exclusivamente das equações fundamentais da mecânica quântica — as equações 13 são compatíveis com os mais variados sistemas quânticos, mesmo aqueles que exibem um comportamento claramente não-clássico. Assim, o resultado obtido vale, por exemplo, para os pacotes de onda mostrados na tabela I, em cuja linha quatro já notáramos a dificuldade de detecção de qualquer comportamento clássico. Da mesma forma, o valor médio da posição, para o oscilador harmônico do exemplo de Cabrera e Kiwi (1987), oscila com a esperada frequência clássica ω , para qualquer valor do número quântico n , apesar do estado do sistema ser uma

superposição de auto estados do hamiltoniano — conceito totalmente estranho à mecânica de Newton — e malgrado o limite de altos números quânticos apresentar uma amplitude de oscilação diferente da que seria esperada classicamente.

No início desta seção propuséramo-nos responder à questão I, sobre a possibilidade da mecânica quântica recuperar os resultados da mecânica clássica nas situações em que esta última pudesse ser considerada empiricamente adequada.

Como podemos ver a partir dos resultados apresentados, existem várias situações em que um sistema quântico apresenta um comportamento semelhante a um sistema clássico. Este fato, porém, não nos permite tirar uma conclusão definitiva sobre a possibilidade de uma relação mais forte entre as duas teorias, por dois motivos. Em primeiro lugar, o comportamento clássico encontrado em alguns casos (oscilador harmônico, teorema de Ehrenfest) é compatível com situações inteiramente alheias à mecânica clássica (superposições de estados). Por outro lado, não conseguimos encontrar um critério para a determinação das situações em que um sistema arbitrário deva apresentar necessariamente um comportamento clássico, nem para a avaliação dos resultados positivos obtidos em casos particulares, de maneira a delimitar de forma clara a região de validade da física clássica.

Nossa conclusão é que, embora em algumas situações a mecânica quântica e a mecânica clássica apresentem resultados semelhantes, o método em que se considera um valor finito para a constante de Planck ao comparar os resultados das duas teorias é excessivamente limitado, e não permite o estabelecimento de uma relação de redução global entre elas. Para que isto seja

conseguido devemos portanto analisar de maneira mais detalhada seus formalismos, o que será feito nas seções seguintes.

3.3 - O LIMITE $h \rightarrow 0$: CASOS PARTICULARES

Como vimos na última seção, as tentativas de encontrar uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica têm sua eficácia bastante limitada pela ausência de um critério de avaliação da relevância para o problema da redução dos resultados obtidos, nos casos em que se considera um valor finito da constante de Planck, isto é, quando os resultados quânticos são tomados na sua totalidade, sem qualquer tipo de aproximação, e comparados com os resultados clássicos correspondentes. Além desta dificuldade, não foi tampouco possível delimitar uma região de fenômenos no interior da qual a identificação desses resultados pudesse ser assegurada; pelo contrário, para cada alternativa apresentada é possível encontrar contra-exemplos que, embora pertencentes à região de fenômenos dada, apresentam um comportamento em desacordo com as previsões clássicas correspondentes.

Um procedimento alternativo consiste em caracterizar de alguma forma as duas teorias a serem comparadas, estabelecendo

uma relação entre ambas a partir das relações entre os elementos que as caracterizam; os resultados obtidos desta forma dizem respeito portanto às duas teorias na sua totalidade, isto é, enquanto teorias dinâmicas dotadas de uma certa estrutura lógico-matemática abstrata.

Visto, porém, que as teorias em questão são diferentes, a identificação entre ambas exige que pelo menos uma delas seja modificada de alguma forma, para que sua 'estrutura' se transforme na estrutura da outra. No exemplo da relação mecânica clássica-relatividade restrita, apresentado na seção 3.1, tentamos caracterizar as duas teorias através das transformações de Galileu e de Lorentz, respectivamente. A modificação da teoria da relatividade é realizada (eq. 3, seq. 3.1) considerando-se o limite em que a velocidade da luz aumenta indefinidamente: as transformações de Lorentz tornam-se idênticas às de Galileu, estabelecendo-se dessa maneira uma relação formal entre as duas teorias, embora somente na medida em que ambas podem ser caracterizadas por essas transformações.

No caso da mecânica quântica, o desenvolvimento histórico da pesquisa científica aconteceu, por assim dizer, no sentido contrário ao raciocínio exposto acima, isto é, utilizou-se a idéia de redução inter-teórica na própria construção da nova teoria, seja no que diz respeito à solução de problemas surgidos no seu âmbito, seja no que toca à sua interpretação. Os resultados obtidos desta forma dizem respeito, portanto, à questão II da seção 3.1; nosso objetivo agora é analisar algumas das respostas apresentadas a esta questão, e determinar quais são as suas consequências para o problema que nos interessa.

Assim como na dedução do teorema de Ehrenfest

caracterizamos a mecânica clássica com o auxílio das leis de Newton, ao tentar mostrar que os sistemas quânticos obedecem 'em média' as leis da mecânica clássica, podemos tentar caracterizar a mecânica quântica não-relativística através da equação de Schrödinger, e comparar sua forma em algum tipo de limite com a mecânica clássica, mostrando ou não a existência de uma relação entre as duas teorias.

Consideremos inicialmente a equação de Schrödinger dependente do tempo:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(r) = H\psi(r) ; \quad (1)$$

$\psi(r)$ é a função de onda que é solução da equação 1, e H é o hamiltoniano do sistema. A função de onda $\psi(r)$, por sua vez, pode ser escrita como

$$\psi(r) = A(r) \exp[(i/\hbar)S(r)] ; \quad (2)$$

se tomarmos agora o hamiltoniano de uma partícula em um potencial $V(r)$,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + V(r) \quad (3)$$

e o substituirmos na equação 1, obteremos, após separar as partes real e imaginária de $\psi(r)$ (Messiah(1965), p. 187)

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{(\nabla S)^2}{2m} + V(r) = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\nabla^2 A}{A} ; \quad (4a)$$

$$m \frac{\partial A}{\partial t} + (\nabla A \cdot \nabla S) + \frac{A}{2} \nabla^2 S = 0 . \quad (4b)$$

Nas equações acima a função $A(r)$ representa a amplitude de probabilidade, à qual associamos a densidade de probabilidade

$$P(r) = (A(r))^2 . \quad (5)$$

A função de fase S será identificada com a função principal de Hamilton, usada na formulação de Hamilton-Jacobi da mecânica

clássica; ela define aqui, juntamente com a amplitude de probabilidade $A(r)$ a densidade de corrente de probabilidade

$$\vec{J}(r) = A^2 \frac{\nabla S}{m} . \quad (6)$$

Se multiplicarmos agora a equação 4b por $2A(r)/m$ obteremos, após comparação com as equações 5 e 6,

$$\frac{\partial P}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{J} = 0 \quad (7)$$

que é a equação de continuidade para a densidade de probabilidade.

O campo de velocidade associado ao fluido clássico correspondente à equação 7 é

$$\vec{v} = \frac{\vec{J}}{P} = \frac{\vec{\nabla} S}{m} . \quad (8)$$

A aproximação clássica da equação de Schrödinger consiste em anular o termo dependente de $\hbar$ na equação 4a. Considerando as definições dadas nas equações 6 e 8, a equação 4a modificada torna-se então

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{m\vec{v}^2}{2} + V = 0 . \quad (9)$$

Tomando o gradiente de ambos os lados desta equação, obtemos

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla} \right] m\vec{v} + \nabla V = 0 , \quad (10)$$

isto é,

$$m \frac{d\vec{v}}{dt} = -\nabla V . \quad (11)$$

No limite clássico, portanto, a função de onda $\psi(r)$ descreve um fluido de partículas clássicas de massa m , sem interações mútuas, e submetidas ao potencial $V(r)$; a densidade e a densidade de corrente desse fluido em cada ponto do espaço são iguais à densidade de probabilidade P e à densidade de corrente de probabilidade $\vec{J}$ da partícula quântica naquele ponto do espaço (Messiah(1965), p. 188; Hill(1966), p. 443).

A equação obtida através da consideração do limite

clássico da equação de Schrödinger é a base de um método aproximativo utilizado inicialmente por Lord Rayleigh(1912) para a solução de problemas relativos à propagação de ondas, e que foi posteriormente aplicado por Wentzel(1926), Brillouin(1926) e Kramers(1926) em problemas quânticos; das iniciais destes autores derivou-se o nome do método, WKB. De uma maneira geral o método WKB é uma extensão do limite clássico da equação de Schrödinger às regiões nas quais a energia total E é menor que a energia potencial $V(r)$, o que é impossível na mecânica clássica. A função de onda $\psi(r)$ do sistema é então escrita como

$$\psi(r) = \exp[(i/\hbar)W(r)] , \quad (18)$$

onde

$$W(r) = S(r) + (\hbar/i)T(r) , \quad (19)$$

de forma que a amplitude de probabilidade $A(r)$ é

$$A(r) = \exp[T(r)] . \quad (20)$$

Exige-se que $S(r)$ e $T(r)$ sejam funções pares de $\hbar$ para defini-las univocamente. A aproximação WKB consiste então em expandir a solução $W(r)$ em potências de $\hbar$ e negligenciar, na equação Schrödinger, os termos de ordem igual ou superior a $\hbar^2$. Na região clássica, isto é, quando a energia E da partícula é maior que o potencial $V(r)$, a solução WKB da equação de Schrödinger será uma combinação linear de funções oscilatórias; se $E < V(r)$, ou seja, nas regiões classicamente proibidas, a solução é uma combinação linear de exponenciais reais. A teoria da aproximação WKB é bastante complexa, e foi estudada entre outros por Langer(1937), Furry(1947), Cherry(1950) e Erdélyi(1960); uma exposição do método pode ser encontrada em Morse e Feshbach(1953) e Jeffreys(1961).

A aproximação de cálculos quânticos através de uma

equação diferente da equação de Schrödinger não implica por si só uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica: esta relação depende, para o seu estabelecimento, de uma interpretação dos resultados obtidos que mostre a concordância da aproximação WKB com algum tipo de resultado deduzido no âmbito da física clássica.

Com efeito, este raciocínio está na origem de nossa derivação do limite clássico da equação de Schrödinger no caso de um potencial $V(r)$, onde mostramos (eq. 11) que neste limite o sistema quântico é equivalente a um fluido clássico de partículas que não interagem entre si. Outros resultados particulares foram obtidos por van Vleck(1928), que computou a função de onda WKB para um sistema no qual um dos conjuntos de variáveis dinâmicas conjugadas (no sentido clássico) tem seus valores bem determinados, enquanto Brown(1972) estendeu estes resultados para o caso de um pacote de ondas. Todavia, como notaram Home e Sengupta(1983), os sistemas utilizados por aqueles autores não podem ser identificados com nenhum sistema quântico real, pois violam as relações de incerteza de Heisenberg (Home e Sengupta(1983), p. 265); ambos constroem então pacotes de ondas que satisfazem aquelas relações, mostrando a validade da aproximação clássica para os casos de partícula livre, partícula em um potencial homogêneo e um oscilador harmônico no estado fundamental.

A principal limitação do método WKB aparece nas situações em que a energia total do sistema é igual à sua energia potencial, isto é, onde a velocidade do sistema (classicamente) diminui até ficar igual a zero; este é o caso, por exemplo, das órbitas circulares do átomo de hidrogênio no limite de altos

números quânticos (cf. Brown(1972), p. 372).

Para entender as consequências destes fatos para nosso problema, devemos recordar as razões que nos levaram a estudar a aproximação clássica da equação de Schrödinger e o método WKB. Partindo dos exemplos apresentados na introdução (eqs. 2 e 3, seq. 3.1) sobre a relação entre as transformações de Lorentz e de Galileu, que consideramos como caracterizando respectivamente a relatividade especial e a mecânica newtoniana, consideramos um certo limite em que uma delas — a transformação de Lorentz — torna-se igual à outra — a transformação de Galileu. Conseguimos desta forma obter uma relação entre as duas teorias 'via' seus grupos de invariância.

Para obter de maneira análoga uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, consideramos a equação de Schrödinger como sendo capaz de caracterizar a mecânica quântica, e procuramos seu limite clássico, fazendo $\hbar$ igual a zero na equação 4a. O resultado foi uma equação diferencial cujas soluções podem ser interpretadas em termos de um fluido clássico de partículas que não interagem entre si, o que nos coloca no âmbito da física newtoniana.

É necessário porém verificar em que medida o limite clássico da equação de Schrödinger — ou sua extensão, o método WKB — é capaz de caracterizar a mecânica clássica. Dados os resultados acima, vemos que essa equação não é capaz de caracterizá-la de maneira completa, visto não ser aplicável, por exemplo, a um sistema onde a velocidade se aproxima muito de zero.

Por outro lado, devemos ter em mente que a simples caracterização de uma das teorias não é suficiente: é necessário estabelecer uma relação entre elas. O método WKB é aplicável, como

vimos, em ensembles de partículas sem qualquer correspondente quântico. Ele não estabelece portanto uma relação entre as duas teorias, visto que as soluções das equações quântica e clássica não guardam qualquer relação entre si, salvo em situações particulares, que são exatamente aquelas onde se pode aplicar o método a sistemas quânticos. Não é possível, todavia, determinar antecipadamente quais são essas situações, exceto pelo cálculo direto.

Este fato nos coloca novamente na mesma situação do limite de altos números quânticos: só existe uma relação entre as duas teorias porque em determinadas situações certos sistemas quânticos comportam-se como sistemas clássicos. Porém esta é uma das premissas da aplicação do método, e não acrescenta nada à solução de nosso problema. A resposta à questão II, apesar de positiva, não implica o estabelecimento de uma relação geral entre as duas teorias, nem serve para determinar seus domínios de aplicação. Na próxima seção estudaremos outras formas de comparar a mecânica quântica e a mecânica clássica, agora com base em suas estruturas globais, e não em situações físicas particulares.

3.4 - AS REGRAS DE QUANTIZAÇÃO

A moderna teoria quântica não-relativística, apesar de diferente de sua antecessora, a velha teoria quântica, possui com esta uma característica comum, a saber, a necessidade de "regras de quantização" para o tratamento teórico de certos sistemas físicos. De uma maneira simples este 'problema da quantização pode ser resumido na seguinte pergunta: "Dada uma certa grandeza física (um observável) qual é a forma do operador quântico associado a ela ?" Esta questão comporta de fato várias interpretações: posemos perguntar alternativamente pela relação entre observáveis clássicos e quânticos, entre observáveis quânticos e operadores quânticos, e entre operadores clássicos e operadores quânticos. Para nossos objetivos bastará a última das formas apresentadas acima, i.e., investigaremos a relação entre os operadores (ou funções) da mecânica clássica e os operadores da

mecânica quântica¹

No âmbito da velha teoria quântica a quantização era obtida através do tratamento clássico do sistema quântico, lançando-se mão em seguida do princípio adiabático e do princípio de correspondência para a determinação das variáveis a serem quantizadas. Com o surgimento da mecânica de matrizes este procedimento foi substituído por regras, nem sempre válidas, mais adequadas ao novo formalismo. Essas 'regras de quantização' partem em geral de relações válidas no interior da mecânica clássica, tentando estendê-las à teoria quântica; esta seção é dedicada ao estudo desses procedimentos e de suas consequências para nosso problema.

O estabelecimento de uma regra de quantização oferece uma resposta à questão II da introdução: trata-se de fato de resolver, com o auxílio da solução de um problema clássico, um problema quântico. Por outro lado, uma regra deste tipo proporciona uma melhor visão da estrutura matemática das duas teorias, o que nos coloca na direção da terceira questão feita no início do capítulo. Analisaremos aqui somente o caso em que h é diferente de zero, deixando para a próxima seção o estudo do limite clássico.

O primeiro tratamento matemático rigoroso da moderna teoria quântica foi apresentado em 1932 por J. von Neumann, que apresenta em seu livro duas regras para a construção de operadores

¹Ao fazer isso estamos de fato supondo que existe uma correspondência biunívoca entre grandezas observáveis e operadores, tanto na mecânica quântica quanto na mecânica clássica.

quânticos chamadas por Groenewold((1946), p. 413) de 'regras de von Neumann'. Sejam a e b duas grandezas físicas clássicas, e $f(a)$ uma função da grandeza a . Os operadores quânticos correspondentes serão dados por ($\sim$ indica um operador quântico)

$$\text{Se } a \Leftrightarrow \tilde{a}, \text{ então } f(a) \Leftrightarrow f(\tilde{a}). \quad (\text{I})$$

$$\text{Se } a \Leftrightarrow \tilde{a} \text{ e } b \Leftrightarrow \tilde{b}, \text{ então } a+b \Leftrightarrow \tilde{a}+\tilde{b}. \quad (\text{II})$$

O conjunto de funções da mecânica clássica possui a estrutura de um anel comutativo, enquanto os operadores utilizados na mecânica quântica formam um anel não-comutativo². Utilizando as regras I e II pode-se provar que (Groenewold(1946), pp. 448-449)

$$ab \Leftrightarrow \tilde{a}\tilde{b}, \text{ para todo } a \text{ e } b, \quad (1)$$

$$\text{ou} \quad ab \Leftrightarrow \tilde{b}\tilde{a}, \text{ para todo } a \text{ e } b. \quad (2)$$

Este resultado implica que os dois anéis são isomorfos; dado porém que um deles é comutativo e o outro não, segue-se que não se podem manter as regras I e II ao mesmo tempo, i.e., as regras de von Neumann são inconsistentes.

O anel comutativo de funções da mecânica clássica, sobre o qual definimos um produto de Lie de duas funções como sendo igual ao seu parêntesis de Poisson forma, como já vimos (seq. 2.2), uma álgebra de Lie. Por outro lado, o mesmo pode ser dito da mecânica quântica, i.e., o anel não-comutativo dos operadores quânticos, sobre o qual definimos o comutador de dois operadores quânticos como o seu produto de Lie, constitui também uma álgebra de Lie. A diferença entre as duas estruturas assim definidas reside no fato de que, no caso clássico, definimos uma

²Para um pequeno glossário de termos matemáticos, veja-se o apêndice I.

álgebra de Lie sobre o anel comutativo das funções clássicas, enquanto a álgebra quântica é construída sobre o anel de operadores quânticos, cujo produto não é em geral comutativo. Em ambos os casos, porém, o produto de Lie determina a estrutura dinâmica de cada teoria: a evolução temporal de uma grandeza física $f(-\tilde{f}-)$ é proporcional ao seu produto de Lie com o hamiltoniano $H(-\tilde{H}-)$ do sistema físico. Este fato é exprimido através das equações clássica (Landau(1978), p. 207).

$$\frac{df}{dt} = \{H, f\} = \sum_k \left(\frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial f}{\partial q_k} - \frac{\partial H}{\partial q_k} \frac{\partial f}{\partial p_k} \right) \quad (3)$$

e quântica (Messiah(1965), p. 266)

$$\frac{d\tilde{f}}{dt} = (i/\hbar) [\tilde{H}_H, \tilde{f}_H] = (i/\hbar) (\tilde{H}_H \tilde{f}_H - \tilde{f}_H \tilde{H}_H) \quad (4)$$

O sub-índice H nos operadores quânticos da equação 4 indica que estamos usando a representação de Heisenberg da mecânica quântica (Messiah(1965), pp. 265-270); as equações 3 e 4 são válidas se e somente se as grandezas f e $\tilde{f}$ não dependem explicitamente do tempo.

A semelhança entre as estruturas da mecânica quântica e da mecânica clássica sugere a possibilidade de um identificação entre as duas teorias, obtida com o auxílio de um conjunto de regras de quantização que leve em consideração as equações 3 e 4. Estas equações são a origem da 'regra de Dirac':

$$\text{Se } a \Leftrightarrow \tilde{a} \text{ e } b \Leftrightarrow \tilde{b}, \text{ então } \{a, b\} \Leftrightarrow (i/\hbar) [\tilde{a}, \tilde{b}]. \quad (\text{III})$$

Esta regra deve ser complementada, de maneira a eliminar certas soluções triviais, com

$$1 \Leftrightarrow I \quad (I = \text{identidade}) \quad (\text{IV})$$

e Uma terceira regra motivada por considerações físicas. (V)

Embora seja possível satisfazer as regras III e IV em alguns casos, nenhum dos possíveis candidatos ao lugar da regra

V é consistente com as outras duas. Groenewold(1946) mostrou a inconsistência de III, IV e V quando esta última é a regra I de von Neumann. Seu resultado é de fato mais forte, pois basta a relação

$$q^2 \Leftrightarrow \tilde{q}^2 \text{ e } p^2 \Leftrightarrow \tilde{p}^2 \quad (V')$$

para que se chegue a uma contradição (cf. Chernoff(1981), p. 885).

Groenewold tentou também mostrar que as regras III e IV são por si só inconsistentes (Groenewold(1946), p. 449). Para entender seu resultado, e sua generalização devida a Joseph(1970), apresentamos seu teorema tal como é enunciado em Chernoff((1981), p. 888):

"Não existe nenhum procedimento de quantização que satisfaça III e IV, junto com a regra

$\tilde{q}$ e $\tilde{p}$ possuem a representação de Schrödinger x e $(\hbar/i)\partial/\partial x$ (respectivamente) sobre o espaço de Hilbert $H=L^2(R,K)$, o espaço das funções quadrado-integráveis sobre a reta real R , com valores em um espaço auxiliar K de dimensão finita." (V'')

A demonstração de Groenewold deste teorema não exige o uso do enunciado acima, pois sua prova é válida somente para um espaço auxiliar K unidimensional. A regra necessária para este caso particular é

$$p \Leftrightarrow \tilde{p} \text{ e } q \Leftrightarrow \tilde{q} \quad , \quad (V''')$$

que junto com III e IV leva a uma contradição. O resultado de Joseph foi retomado ainda por van Hove(1951), que demonstrou a consistência de III, IV e V" quando o espaço auxiliar K tem dimensão infinita. Dada porém a dificuldade de interpretar fisicamente uma função de onda com valores em um espaço K de dimensão infinita, o resultado foi considerado pelo próprio van Hove apenas uma curiosidade matemática irrelevante para o problema

da quantização, com o que concordamos (cf. Chernoff(1981), p. 892). Além dos trabalhos citados acima, os resultados apresentados até aqui também podem ser encontrados nos artigos de Arens e Babbitt(1965), onde se utiliza diretamente a representação de Schrödinger mencionada em V", e Shewell(1959), que faz uma revisão destas e de outras regras de quantização equivalentes, com as mesmas conclusões; uma demonstração do resultado de van Hove é feita em Abraham e Marsden(1978), pp. 434 e segs.

As regras de quantização apresentadas até agora procuram estabelecer uma relação direta entre a mecânica quântica e a mecânica clássica sem levar em consideração o caráter probabilístico das predições desta última. É válido portanto perguntar qual a relação, se houver alguma, entre a mecânica quântica e a mecânica estatística clássica. Uma tentativa de relacionar as duas teorias foi de fato levada a cabo por E. P. Wigner, e apresentada em seu trabalho sobre a correção quântica de cálculos feitos com a mecânica estatística clássica para sistemas em equilíbrio termodinâmico(Wigner(1932)).

Wigner inicia seu trabalho notando que na mecânica estatística clássica a probabilidade relativa de ocupação de uma região do espaço de fase compreendida entre os valores de coordenadas x e $x+dx$, e momentos p e $p+dp$ é dada no equilíbrio estatístico pela fórmula de Gibbs-Boltzmann³

$$P(x,p)dxdp = \exp(-E/kT)dxdp, \quad (5)$$

onde $P(x,p)$ = densidade de probabilidade,

³Wigner considera desde o início de seu artigo o caso n -dimensional; para nossos fins, porém, bastará o caso unidimensional.

$$E = p^2/2m + V(x) = \text{energia total},$$

$$V(x) = \text{energia potencial},$$

$$k = \text{constante de Boltzmann}$$

$$e \quad T = \text{temperatura absoluta}.$$

No caso quântico, entretanto, não é possível construir uma fórmula deste tipo, devido à impossibilidade de atribuir uma probabilidade simultânea às coordenadas e momentos de um sistema quântico⁴. O principal resultado de Wigner consiste em propor um método para a simplificação dos cálculos de valores médios em sistemas quânticos através de uma fórmula semelhante à equação clássica 5. Dada a função de onda $\psi(x)$ de um sistema quântico, podemos construir a seguinte expressão:

$$P_w(x,p) = (1/i\hbar) \int dy \psi^*(x+y) \psi(x-y) \exp(2ipy/\hbar). \quad (6)$$

A função $P_w(x,p)$ é a 'função de Wigner' associada à função de onda $\psi(x)$; ao contrário desta última, $P_w(x,p)$ é uma função de ambas as variáveis x (posição) e p (momento), como uma densidade de probabilidade no espaço de fase clássico.

A função de Wigner possui várias propriedades que a tornam útil em diversos campos de pesquisa, desde a física da matéria condensada até a detecção de ondas gravitacionais (cf. O'Connell(1983), p. 83). Em primeiro lugar, $P_w(x,p)$ integrada em $p(-x-)$ fornece corretamente a densidade de probabilidade quântica para a posição $x(-o$ momento $p-)$:

$$\int dp P_w(x,p) = |\psi(x)|^2, \quad (7)$$

$$\int dx P_w(x,p) = |\psi(p)|^2; \quad (8)$$

de 7 e do fato de que $\psi(x)$ é normalizada segue-se que

⁴ Este fato decorre da não-comutatividade dos operadores quânticos; cf. seq. 2.1; Park(1968) e Park e Margenau(1968).

$$\int dx \int dp P_W(x,p) = 1, \quad (9)$$

i.e., a probabilidade total de se encontrar a partícula em qualquer região do espaço de fase é igual a 1. Pode-se mostrar também que $P_W(x,p)$ é invariante sob uma transformação de Galileu, (cf. Hillery et al; (1984), p. 127)

$$\begin{aligned} &\text{se } \psi(x) \rightarrow \psi(x+a), \text{ então } P_W(x,p) \rightarrow P_W(x+a,p) \\ &\text{e se } \psi(x) \rightarrow e^{ip'x/\hbar} \psi(x), \text{ então } P_W(x,p) \rightarrow P_W(x,p-p'). \end{aligned}$$

Ao contrário da função de onda $\psi(x)$, a função de Wigner associada a ela é real em todos os pontos do espaço de fase, o que aumenta sua semelhança com uma distribuição de probabilidades clássica. O módulo do produto escalar de duas funções de onda $\psi(x)$ e $\phi(x)$ pode ser calculado como

$$|\int dx \psi^*(x) \phi(x)|^2 = 2\pi\hbar \int dx \int dp P_W^\psi(x,p) P_W^\phi(x,p). \quad (10)$$

Se as funções $\psi(x)$ e $\phi(x)$ forem ortogonais, o lado esquerdo da equação 10 se anula; dado que a função de Wigner é real, segue-se que ela, ao contrário da densidade de probabilidade clássica, não pode ser positiva em todo o espaço de fase. Com efeito, pode-se mostrar (cf. Wigner(1932), p. 751) que não existe nenhuma função que satisfaça as propriedades da função de Wigner e que seja positiva em todo o espaço: não é possível portanto atribuir probabilidades simultâneas à posição e ao momento de uma partícula quântica como no caso clássico, pois uma interpretação deste tipo de $P_W(x,p)$ implicaria a atribuição de probabilidades negativas para certos valores de x e p .⁵

⁵ Husimi(1940) obteve uma função não-negativa deste tipo, mas que não satisfaz a propriedade que veremos adiante de que a equação de movimento para a partícula livre é idêntica à equação clássica (cf. O'Connell(1983), p. 87).

Este fato barra o caminho a uma identificação pura e simples entre as formulações da mecânica quântica e da mecânica clássica, visto não haver lugar na física clássica para tais probabilidades negativas. Todavia, na medida em que tal conceito, apesar de anti-intuitivo, possa ser conservado de forma a manter a consistência da teoria quântica, nada nos impede de investigá-lo e utilizá-lo no seu interior. Esta é de fato a proposta de G. Ludwig (Mückenheim(1986), p. 385): segundo ele devemos considerar tais probabilidades com um conceito teórico auxiliar, i.e., que não envolve uma relação direta com resultados experimentais. Apesar de satisfatória do ponto de vista daqueles que utilizam a teoria, a solução metodológica de Ludwig não é capaz de resolver o problema de interpretar probabilidades negativas, nem de acrescentar elementos novos à sua possível solução. Esta foi tentada por vários autores (Cufaro-Petroni et al(1984); Holland, Kyprianidis e Vigier(1985,1987); Guéret et al(1985); Holland et al(1986)), porém no âmbito da mecânica quântica relativística, onde as probabilidades negativas são associadas ao movimento de anti-partículas, fugindo portanto ao âmbito deste trabalho⁶.

Malgrado os resultados negativos obtidos até agora, vale a pena indagar da evolução temporal da função de Wigner,

⁶Uma revisão das propriedades da função de Wigner é feita em Hillery et al (1984), onde são analisadas também outras funções semelhantes. Estas funções estão contudo associadas a ordenações de operadores distintas da regra de Weyl, que veremos mais adiante, ou não possuem certas propriedades desejáveis da função de Wigner, como aquela citada na nota anterior, razão pela qual não as investigaremos com maior detalhe.

i.e., de suas propriedades dinâmicas. A evolução temporal de uma função de onda $\psi(x)$ é dada pela equação de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi + V(x)\psi ; \quad (11)$$

a mudança correspondente em $P_w(x,p)$ é então dada por (Wigner(1932), p. 751)

$$\frac{\partial}{\partial t} P_w = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} P_w + \sum_n \left(\frac{\hbar}{2i} \right)^{n-1} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n V}{\partial x^n} \frac{\partial^n}{\partial p^n} P_w , \quad (12)$$

onde a somatória no segundo membro estende-se sobre todos os valores ímpares positivos de n . O primeiro termo desta somatória é portanto aquele em que aparece a primeira derivada espacial de $V(x)$; assim, se $V(x)$ não possui derivadas não nulas de ordem igual ou superior a três, a equação 12 se torna

$$\frac{\partial}{\partial t} P_w = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} P_w + \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial}{\partial p} P_w , \quad (13)$$

que é idêntica à equação de movimento clássica (Pathria(1972), p. 35). O mesmo ocorre no caso de uma partícula livre (Hillery et al(1984), p. 127),

$$\frac{\partial}{\partial t} P_w = -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial x} P_w . \quad (14)$$

Estes resultados poderiam levar-nos a crer que é possível, nestes casos, esperar um comportamento clássico em sistemas quânticos particulares como o oscilador harmônico e a partícula livre. Devemos notar, porém, que as equações 13 e 14 não dizem respeito a uma distribuição de probabilidade clássica, e sim à distribuição de Wigner que, como vimos, assume valores negativos

incompatíveis com tal interpretação⁷. A função de Wigner não é portanto capaz, mesmo nestes casos particulares, de recuperar os resultados da mecânica clássica.

A utilidade da função de Wigner seria porém bastante reduzida se só pudéssemos empregá-la no cálculo de valores médios de posição e momento; ela também pode ser usada para calcular valores médios de outros observáveis. Dada porém a diferença entre as estruturas da mecânica clássica e da mecânica quântica, a função associada a um certo observável utilizada em conjunção com a distribuição de Wigner não é a mesma do caso clássico. Para obtê-la é necessário lançar mão de uma regra de quantização devida a Weyl(1927), e que é analisada em Groenewold((1946), pp. 450-453). Seja $a(p,q)$ uma função (um observável) clássica escrita em termos das variáveis canônicas de posição(q) e momento(p); tomando sua transformada de Fourier (cf. Groenewold(1946), p. 446)

$$a(p,q) = \iint dx dy \alpha(x,y) \exp[i(xp+yq)/\hbar] \quad (15)$$

$$\text{com} \quad \alpha(x,y) = \iint dp dq a(p,q) \exp[-i(xp+yq)/\hbar] , \quad (16)$$

podemos escrever a regra de Weyl como

$$\begin{aligned} \iint dx dy \alpha(x,y) \exp[(i/\hbar)(xp+yq) &\Leftrightarrow \\ \Leftrightarrow \iint dx dy \alpha(x,y) \exp[(i/\hbar)(x\tilde{p}+y\tilde{q})] . &\quad (VI) \end{aligned}$$

⁷A função de Wigner do estado fundamental do oscilador harmônico é de fato positiva em todo o espaço de fase. Contudo, dado que os diferentes auto-estados do oscilador são ortogonais, segue-se que as funções de Wigner para os estados com número quântico maior que um assumem, em alguma região do espaço, valores negativos.

Exigindo agora que⁸

$$(1/2\pi\hbar) \iint dp dq a(p,q)b(p,q) = \text{Tr}(\tilde{a}\tilde{b}), \text{Tr}=\text{traço} \quad (17)$$

segue-se a correspondência

$$\tilde{a} = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint dx dy e^{\frac{i}{\hbar}(x\tilde{p}+y\tilde{q})} \frac{1}{2\pi\hbar} \iint dp dq e^{-\frac{i}{\hbar}(xp+yq)} a(p,q), \quad (18)$$

e sua inversa

$$a(p,q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \iint dx dy e^{\frac{i}{\hbar}(xp+yq)} \text{Tr} \left(e^{-\frac{i}{\hbar}(x\tilde{p}+y\tilde{q})} \tilde{a} \right). \quad (19)$$

Aplicando-se a regra de Weyl à matriz densidade de um sistema quântico, o resultado final é de fato equivalente àquele obtido através da aplicação da função de Wigner à função de onda da qual se deriva essa matriz densidade, i.e., a função de Wigner é de fato um caso particular da regra de Weyl. Elas não estabelecem, portanto, uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, mas são de fato um método de reescrever a primeira teoria em uma forma semelhante à segunda. Em particular, o comutador de dois operadores quânticos $\tilde{a}$ e $\tilde{b}$ obedece à correspondência (Groenewold(1946), p. 453)

$$a(p,q) \left[\sin \frac{\hbar}{2} \left(\frac{\delta}{\delta p} \frac{\partial}{\partial q} - \frac{\delta}{\delta q} \frac{\partial}{\partial p} \right) \right] b(p,q) \Leftrightarrow \frac{i}{2} (\tilde{a}\tilde{b} - \tilde{b}\tilde{a}). \quad (20)$$

Nesta equação a expressão do seno deve ser expandida em uma série de Taylor; os operadores em δ agem sobre $a(p,q)$, aqueles em ∂ sobre $b(p,q)$.

Nos casos em que $a(p,q)$ ou $b(p,q)$ é um polinômio em p e q de grau menor ou igual a dois esta correspondência é equivalente à regra de Dirac (III), isto é, vale a correspondência

⁸ Devemos notar que embora o produto de operadores não seja comutativo, o traço do produto não depende da ordem dos operadores. Este fato permite relacionar as duas teorias através de seus produtos internos respectivos (ep. 17): o papel desses produtos internos será visto na próxima seção.

entre comutadores quânticos e parêntesis de Poisson 'clássicos'.

Que os resultados de Weyl não dizem respeito à mecânica clássica é mais facilmente entendido neste exemplo de Shewell((1959), p. 19): seja $\tilde{H}$ o operador correspondente (segundo a regra de Weyl) ao hamiltoniano clássico

$$H = (p^2/2m) + (aq^4/4) ; \quad (21)$$

então o operador correspondente a H^2 será

$$(\tilde{H}^2) = (\tilde{H})^2 + (a\hbar^2\tilde{q}^2/4m) . \quad (22)$$

Este operador não comuta com o hamiltoniano quântico $\tilde{H}$, o que significaria que, embora a energia do sistema quântico seja uma constante de movimento, seu quadrado não é. Segue-se então que, como ambas são constantes, a função associada pela regra de Weyl ao quadrado do hamiltoniano quântico é diferente do quadrado do hamiltoniano clássico que dá origem a este hamiltoniano.

As tentativas que vimos de estudar de estabelecer uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica colocaram em relevo alguns aspectos estruturais destas teorias que não haviam ainda recebido maior atenção. Por um lado os resultados relativos à regra de Dirac, apesar de negativos, mostraram a existência no interior de cada uma delas de uma estrutura comum a ambas, uma álgebra de Lie. Por outro lado, os resultados de Groenewold, Chernoff, van Hove e Arens e Babbitt apontam a existência, ao lado dessas estruturas, de outras estruturas distintas que impedem a identificação direta entre os elementos das duas teorias.

A lição da função de Wigner e da regra de Weyl, por sua vez, é bem clara: ao formalizar uma relação entre duas teorias é necessário conservar a estrutura matemática de cada uma delas. A consequência de não fazê-lo é que a relação construída dessa forma

não é uma relação entre as duas teorias, e sim entre uma delas e algum outro tipo de estrutura matemática — no caso de Wigner e Weyl, uma nova representação da própria mecânica quântica.

Finalmente, convém notar que em nenhum dos exemplos estudados procurou-se uma relação arbitrária entre as duas teorias, e sim uma relação construída com base em considerações sobre sua natureza. Aqui portanto, embora de maneira mais sutil que nas seções anteriores, encontramos novamente o problema de interpretação das teorias na avaliação da redução obtida. Nenhuma redução global foi possível quando a constante de Planck tem um valor finito: o caso em que h tende a zero é o assunto da próxima seção.

3.5 - 0 LIMITE $\hbar = 0$: CASO GERAL

Ao longo das três seções anteriores analisamos várias tentativas de se estabelecer algum tipo de relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, todas elas, até agora, infrutíferas. A razão deste insucesso pode ser encontrada na diferença entre as estruturas lógico-matemáticas das duas teorias: é esta estrutura, na mecânica quântica, que permite a existência de superposições proibidas pela mecânica clássica, e que invalidam as tentativas apresentadas nas seções 3.2 e 3.3, ao mesmo tempo em que impede a identificação, com o auxílio de regras de quantização, entre operadores clássicos e quânticos, tentada na última seção.

É necessário portanto determinar de maneira mais precisa quais são estas estruturas, de maneira a obtermos uma caracterização completa das duas teorias, e podermos assim compará-las e descobrir suas diferenças e semelhanças. A estrutura das teorias dinâmicas como a mecânica quântica e a mecânica clássica foi estudada por vários autores como Sudarshan(1962),

Prosser(1966) e Souriau(1969); utilizaremos aqui o resumo desses resultados apresentado em Bruer((1982),pp.170-172).

Um sistema mecânico pode ser definido como um conjunto de massas pontuais cujo comportamento é descrito por uma certa lei de movimento. Uma teoria de sistemas mecânicos deve então consistir de:

I - As *variáveis dinâmicas*, i.e., um conjunto de propriedades utilizadas na descrição do sistema mecânico;

II - Os *estados*, um conjunto de funções que fornecem as posições das massas pontuais do sistema em um instante de tempo;

III - Uma *lei cinemática*, uma regra através da qual os estados do sistema atribuem valores reais às variáveis dinâmicas utilizadas na sua descrição;

IV - Uma *lei dinâmica*, capaz de determinar a maneira como os estados do sistema mudam com o tempo

Tanto a mecânica quântica quanto a mecânica clássica possuem tais elementos, que são porém distintos em cada uma delas, i.e., ambas as teorias possuem variáveis dinâmicas, estados, leis cinemáticas e leis dinâmicas, mas com propriedades diferentes segundo pertençam a uma ou outra teoria.

As variáveis dinâmicas usadas para a descrição de um sistema mecânico são obtidas a partir de uma álgebra linear associativa, gerada pelos elementos q (posição) e p (momento), definida sobre o corpo dos números complexos. A partir dos geradores p e q podemos construir todas as outras variáveis dinâmicas, somando e multiplicando várias vezes os geradores. Além da soma e do produto, definimos também a operação de conjugação $*$ como:

$$(A + aB)^* = A^* + \bar{a}B^* , \quad (1)$$

$$(AB)^* = B^*A^* , \quad (2)$$

$$(A^*)^* = A , \quad (3)$$

onde $\bar{a}$ é o complexo conjugado de a , e A e B são elementos da álgebra associativa. Os elementos para os quais $A = A^*$ são chamados de auto-adjuntos ("self-conjugate"); somente estes elementos podem representar observáveis físicos, pois o fato de serem auto adjuntos garante que o resultado de uma medida será sempre um número real. As propriedades 1 a 3 definem univocamente a operação de conjugação em função dos geradores q e p da álgebra (Prosser(1966), p.7), para os quais escolhemos

$$q^* = q \quad ; \quad p^* = p . \quad (4)$$

Os elementos de uma teoria dinâmica apresentados até agora são comuns à mecânica quântica e à mecânica clássica. A primeira diferença entre as duas teorias aparece ao considerarmos as realizações (representações) das álgebras associativas quântica ($\mathcal{A}_q$) e clássica ($\mathcal{A}_c$): no caso clássico, $pq = qp$, enquanto que no caso quântico $pq - qp = \hbar/i$. Como pudemos ver na última seção, esta é uma diferença fundamental entre as duas teorias, capaz por si só de impedir uma identificação entre ambas. Para incluí-la em nossa caracterização abstrata, definiremos a álgebra das variáveis dinâmicas como sendo a álgebra quociente da álgebra linear associativa por um ideal bilateral adequado. No caso clássico teremos então $\mathcal{A}_c = \mathcal{A}/(pq - qp)$, e quanticamente, $\mathcal{A}_q = \mathcal{A}/(pq - qp - \hbar/i)$; o resultado dessa operação é que a álgebra associativa $\mathcal{A}$ é repartida em uma série de classes de equivalência, cada uma delas correspondente a uma variável dinâmica distinta, e que serão usadas na descrição dos sistemas mecânicos.

O segundo elemento necessário à formulação de uma teoria mecânica é o conjunto dos estados admissíveis do sistema, i.e., as funções que determinam a configuração espacial do sistema em um certo instante de tempo. Cada membro deste conjunto deve levar os elementos observáveis da álgebra $\mathcal{A}$ em um número real; o espaço de estados do sistema será portanto constituído pelos funcionais lineares sobre a álgebra das variáveis dinâmicas. Um funcional linear f sobre uma álgebra $\mathcal{A}$ é uma aplicação ("mapping") que atribui a cada elemento de $\mathcal{A}$ um número do corpo de $\mathcal{A}$ — neste caso, os números complexos — e que possui a propriedade (Prosser(1966), p. 8)

$$f(aA + bB) = af(A) + bf(B) = c . \quad (5)$$

$$a, b, c \in \mathbb{C} ; A, B \in \mathcal{A}$$

O funcional f é hermitiano se

$$f(A^*) = \overline{f(A)} ; \quad (6)$$

é positivo se

$$f(A^*A) \geq 0 , \quad (7)$$

e é normalizado se

$$f(I) = 1 , I = \text{identidade} ; \quad (8)$$

os estados admissíveis — i.e., possíveis — serão representados pelos funcionais lineares positivos e normalizados sobre a álgebra $\mathcal{A}$ dos observáveis. A lei cinemática III é agora facilmente formulável: dado o estado representado pelo funcional f , o valor médio ("expectation value") do observável A neste estado será dado pela ação do funcional f sobre ele,

$$\langle A \rangle_f = f(A) . \quad (9)$$

Os três elementos definidos até agora servem para a descrição do sistema mecânico em um certo instante de tempo. Para

a descrição de sua evolução temporal é necessário construir sobre a álgebra dos observáveis uma nova estrutura matemática que já mencionamos nas seções 2.2 e 3.4: uma álgebra de Lie. Os elementos da álgebra de Lie $\mathcal{L}$ são as variáveis dinâmicas da álgebra $\mathcal{A}$; com eles podemos definir um produto de Lie $[...]$ com as propriedades (Humphreys(1972),p.1)

$$\text{O produto de Lie } [...] \text{ é bilinear ;} \quad (L1)$$

$$[A,A] = 0, \forall A \in \mathcal{L}; \quad (L2)$$

$$[A,[B,C]] + [B,[C,A]] + [C,[A,B]] = 0, \forall A,B,C \in \mathcal{L}. \quad (L3)$$

A propriedade L3 é a identidade de Jacobi (cf. seq.2.2); de L1, L2 e L3 segue-se facilmente que

$$[A,B] = -[B,A], \forall A,B \in \mathcal{L}. \quad (10)$$

Se além disso os produtos em $\mathcal{A}$ e em $\mathcal{L}$ satisfazem a propriedade

$$[AB,C] = A[B,C] + [A,C]B, \quad (11)$$

dizemos que o produto de Lie em $\mathcal{L}$ é uma derivação na álgebra linear associativa $\mathcal{A}$ (cf. Humphreys(1972),p.4), ou ainda que $\mathcal{A}$ fornece uma realização de $\mathcal{L}$ por derivações.

A evolução temporal de um certo observável F será então dada por seu produto de Lie com um elemento particular $H \in \mathcal{A}$, o hamiltoniano do sistema mecânico :

$$\frac{dF}{dt} = -[F,H]. \quad (12)$$

A lei dinâmica IV, expressa na equação 12, pode ser formulada da seguinte forma: a ação do operador d/dt sobre um elemento F de $\mathcal{A}$ é igual ao negativo de seu produto de Lie com o elemento hamiltoniano H do sistema físico.

Chegados a este ponto é possível analisar alguns resultados já apresentados sob a luz desta nova formulação. Em primeiro lugar, é clara agora a afirmação de Dirac (seq.2,2) sobre

a relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica demonstrada por ele em seu artigo de 1926: ambas as teorias possuem de fato a estrutura de uma álgebra de Lie, cujo produto é dado classicamente pelo parêntesis de Poisson, e quanticamente pelo comutador de operadores. Além disso, o valor desse produto para os geradores q e p dessas álgebras obedece a regra (cf. Prosser(1966), p. 8)¹

$$[q_i, q_j] = 0, \quad (13a)$$

$$[p_i, p_j] = 0, \quad (13b)$$

$$[q_i, p_j] = i\delta_{ij}, \quad (13c)$$

que é idêntica — a menos de uma constante $i\hbar$ — às equações 36 da seção 2.2.

Em segundo lugar, podemos tentar esboçar a partir deste novo ponto de vista uma interpretação mais precisa das afirmações de Bohr sobre as estruturas conceituais quântica e clássica. Sabemos que segundo ele ambas as teorias deveriam forçosamente utilizar os mesmos conceitos, isto é, a descrição de um sistema físico exige sempre o mesmo conjunto de conceitos básicos para sua elaboração. A diferença entre elas decorre então da maneira como estes conceitos são utilizados para essa descrição, ou seja, da estrutura conceitual característica de cada teoria (cf. seq. 2.1). Ora, tanto a mecânica quântica quanto a mecânica clássica podem ser formuladas a partir das álgebras

¹As equações 13 referem-se ao caso $2n$ -dimensional tal como é encontrado em Prosser(1966). Colocamo-las nesta forma apenas para fins de comparação com as equações 36, seção 2.2. No restante do capítulo voltamos ao caso unidimensional.

associativas geradas por p e q : ao nível dos conceitos fundamentais, portanto, parece ser válida a afirmação de Bohr a respeito da igualdade entre os conjuntos de conceitos presentes na base das suas estruturas conceituais. A distinção entre estas estruturas, por sua vez, decorre da diferença entre os ideais bilaterais utilizados na partição da álgebra $\mathcal{A}$ em classes de equivalência. Essa partição associa ao ideal a classe correspondente ao elemento nulo da álgebra quociente; recuperamos assim mais uma das afirmações de Bohr, a saber, que embora os conceitos utilizados sejam os mesmos, a finitude da constante de Planck impede que eles se combinem da mesma maneira. Com efeito, a partição em classes de equivalência implica que

$$(pq - qp)_C = 0 \quad (14a)$$

$$e \quad (pq - qp - \hbar/i)_Q = 0 ; \quad (14b)$$

no limite em que a constante de Planck se aproxima de zero os ideais quântico e clássico são idênticos, portanto $\mathcal{A}_Q$ torna-se igual a $\mathcal{A}_C$ e as duas estruturas conceituais tornam-se idênticas, como pensava Bohr.

Apesar de interessante, o estabelecimento de uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica através do raciocínio acima peca por seu caráter excessivamente abstrato, o qual dificulta a visualização das consequências de tal relação. Sabemos que uma teoria de sistemas mecânicos consiste de uma álgebra linear associativa $\mathcal{A}$ de variáveis dinâmicas, que proporciona uma realização por derivações de uma álgebra de Lie $\mathcal{L}$; os estados do sistema são dados pelos funcionais lineares positivos e normalizados sobre $\mathcal{A}$. Devemos passar portanto à identificação, na mecânica quântica e na mecânica clássica, dos elementos de cada teoria correspondentes a esta estrutura

abstrata, i.e., de suas representações em cada uma delas.

Na mecânica clássica as variáveis dinâmicas fundamentais são a posição q e o momento p . Estas grandezas estão associadas a pontos em um espaço de fase da mecânica clássica: todas as outras variáveis dinâmicas são funções analíticas de q e p . Classicamente, os estados do sistema mecânico são descritos através de densidades de probabilidade $\rho(q,p)$, definidas sobre o espaço de fase, chamadas de densidades de Liouville. A função $\rho(q,p)$ determina a probabilidade de se encontrar uma partícula com valores de posição q e de momento p nos intervalos $(q, q+dq)$ e $(p, p+dp)$. A densidade de Liouville é um funcional linear normalizado,

$$\int \rho(q,p) dq dp = 1, \quad (15)$$

cujas ação sobre uma variável dinâmica $A(q,p) \in \mathcal{A}_C$ é dada por

$$\langle A(q,p) \rangle = \int A(q,p) \rho(q,p) dq dp; \quad (16)$$

$\langle A(q,p) \rangle$ é igual ao valor médio de $A(q,p)$ no estado representado pela função $\rho(q,p)$. A álgebra $\mathcal{A}_C$ fornece uma realização da álgebra de Lie $\mathcal{L}_C$ através de derivações, onde o produto de Lie é dado pelo parêntesis de Poisson clássico

$$\{A, B\} = \frac{\partial A}{\partial q} \frac{\partial B}{\partial p} - \frac{\partial A}{\partial p} \frac{\partial B}{\partial q}, \quad (17)$$

com o auxílio do qual escrevemos a lei dinâmica

$$\frac{d}{dt} \rho(q,p) = - \{ \rho(q,p), H(q,p) \}, \quad (18)$$

onde $H \in \mathcal{A}_C$ é o hamiltoniano clássico; a equação 18 é a equação de Liouville clássica (cf. eq.13, seq.3.4).

As grandezas básicas da mecânica quântica também são a posição e o momento, porém representados agora por dois operadores hermitianos não-comutativos $\tilde{q}$ e $\tilde{p}$. As variáveis dinâmicas restantes são funções analíticas de $\tilde{q}$ e $\tilde{p}$ (cf. Prosser(1966), p.6).

Um estado quântico de mínima incerteza² é normalmente descrito por uma função de onda $\Psi(q)$, que é um elemento de um espaço de Hilbert. Dada esta função é possível construir uma matriz densidade ou operador estatístico

$$\tilde{\rho}(q, q') = \Psi(q) \Psi^*(q') ; \quad (19)$$

a matriz densidade assim construída satisfaz as propriedades exigidas dos funcionais lineares representativos dos estados do sistema mecânico (cf. Fano(1957), p. 77):

- a) $\tilde{\rho}(q, q') = \tilde{\rho}^*(q', q)$ (auto-adjunta)
- b) $\text{Tr } \tilde{\rho} = \int \tilde{\rho}(q, q) = 1$ (normalizada)
- c) $\text{Tr } (\tilde{\rho} \tilde{A}^2) \geq 0$, $\tilde{A}$ hermitiano (positivo-definida).

O correspondente quântico da equação 16, que define a ação do funcional $\tilde{\rho}(q, q')$ sobre os observáveis $\tilde{A}$, é a expressão do traço (Tr) do produto matricial

$$\langle \tilde{A} \rangle = \int \tilde{A}(q, q') \tilde{\rho}(q', q) dq dq' = \text{Tr } \tilde{A} \tilde{\rho} . \quad (20)$$

O produto de Lie necessário para se obter a álgebra de Lie quântica $\mathcal{L}_Q$ a partir de A_Q é

$$[\tilde{A}, \tilde{B}] = \tilde{A}\tilde{B} - \tilde{B}\tilde{A} ; \quad (21)$$

a evolução temporal de $\tilde{\rho}$ é então dada por

²Em um estado quântico de mínima incerteza o operador estatístico (matriz densidade) é um operador de projeção, i.e., representa um estado puro. Nos estados puros as probabilidades associadas ao sistema são consideradas, na interpretação 'ortodoxa', irreduzíveis, em oposição às misturas, onde aparecem também probabilidades atribuídas normalmente à ignorância sobre o estado quântico de sistemas individuais. A este respeito veja-se Redhead (1987), p. 15.

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho} = (i\hbar)^{-1} [\tilde{\rho}, \tilde{H}] = -\frac{i}{\hbar} (\tilde{\rho} \tilde{H} - \tilde{H} \tilde{\rho}), \quad (22)$$

onde $\tilde{H}$ é o hamiltoniano quântico do sistema descrito por $\tilde{\rho}$.

Se a mecânica quântica reduz-se à mecânica clássica quando o valor da constante de Planck tende a zero, é necessário segundo Bruer transformar nesse limite a cinemática e a dinâmica quânticas em seus correspondentes clássicos, i.e., deve-se levar $\mathcal{A}_Q$ em $\mathcal{A}_C$, e $\mathcal{L}_Q$ em $\mathcal{L}_C$ homomorficamente à medida que $\hbar$ tende a zero. Especificamente, a transformação entre $\mathcal{A}_Q$ e $\mathcal{A}_C$ deve levar:

- (i) o produto em $\mathcal{A}_Q$ (não-comutativo) no produto em $\mathcal{A}_C$ (comutativo),
- (ii) $d\tilde{\rho}/dt$ em $d\rho/dt$,
- (iii) o traço $\tilde{A} \times \tilde{B}$ em um produto interno $A(p,q)B(p,q)$ sobre o espaço de fase bidimensional.

De acordo com ulhorn((1956), p. 87), a mecânica clássica pode ser entendida como uma teoria das transformações canônicas no espaço de fase, enquanto a mecânica quântica trata das transformações unitárias no espaço de vetores de estado. Embora estes dois grupos não sejam isomorfos, é possível encontrar subgrupos de cada um deles isomorfos entre si, e estabelecer desta forma uma transformação que conecte os espaços $\mathcal{A}_C$ e $\mathcal{A}_Q$. Ulhorn((1956), pp. 89,92) considera então os geradores infinitesimais do grupo de translações no espaço de fase clássico, o grupo de Galileu, e os mesmos geradores infinitesimais quânticos. Estendendo essa correspondência aos auto-vetores dessas transformações infinitesimais, obtém-se uma transformação conectando o espaço dos operadores quânticos e o espaço de funções de fase clássicas: a regra de Weyl (cf. Ulhorn(1956), p. 94); a transformação correspondente encontrada por ele para a densidade

de probabilidade é, naturalmente, a função de Wigner.

O principal interesse de Ulhorn nesse artigo é a determinação da conexão entre $\mathcal{A}_Q$ e $\mathcal{A}_C$, e do grupo de transformações sob o qual a quantização é invariante, sempre com o objetivo de escrever a mecânica quântica no espaço de fase. Ele ignora por isso todas as críticas possíveis ao uso da função de Wigner com uma interpretação 'clássica', como por exemplo a existência de probabilidades negativas; é útil mencioná-lo porque o resultado obtido por ele é demonstrado novamente por Bruer((1984), pp. 178-185), sem citá-lo, antes de investigar o limite $\hbar \rightarrow 0$.

O ponto de partida do raciocínio de Bruer é que o grupo de Galileu, enquanto grupo abstrato, possui diferentes representações em espaços diferentes. É possível portanto encontrar-se uma transformação conectando essas representações; um operador deste tipo é chamado 'intertwining operator', ou operador de acoplamento, e deve necessariamente comutar com os elementos do grupo. Além disso, visto que tanto a mecânica quântica quanto a mecânica clássica são invariantes sob o grupo de Galileu, a função escolhida para reduzir uma teoria à outra também deve ser invariante sob este grupo. Esta é de fato uma das propriedades utilizadas por O'Connell e Wigner((1981), p. 145) para definir univocamente a função de Wigner. Ela aparece portanto como um candidato natural a operador de acoplamento e, ao mesmo tempo, como função de redução. A demonstração deste fato pode ser encontrada nos trabalhos citados de Bruer e Ulhorn; veremos agora como a função de Wigner satisfaz as condições (i) a (iii) impostas por Bruer sobre uma redução.

Para estabelecer uma redução entre a mecânica

quântica e a mecânica clássica é necessário encontrar alguma relação entre suas estruturas que, como vimos, são diferentes, apesar de possuírem em comum certas características gerais. Essas diferenças estruturais impedem uma correspondência biunívoca entre os elementos das duas teorias que não acarrete uma relação sem sentido entre elas: este é o caso da própria função de Wigner, que leva estados quânticos em estados 'clássicos' com probabilidades negativas. Isto acontece, segundo Bruer, porque essa função estabelece um isomorfismo entre uma representação da mecânica quântica e outra representação equivalente. A solução encontrada por ele é construir um homomorfismo entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, de maneira a anular as diferenças estruturais entre elas transformando uma na outra.

A estratégia de Bruer para conseguir esse homomorfismo consiste em tomar duas densidades de Liouville $\rho(p,q)$ e $\alpha(p,q)$ no plano de fase clássico, aplicando a transformação inversa da função de Wigner para transformá-las em matrizes densidade quânticas. Após multiplicar os operadores resultantes, Bruer aplica a transformação de Wigner ao resultado para obter novamente uma densidade de probabilidade no espaço de fase clássico. O resultado dessa operação é em geral diferente do produto das densidades clássicas correspondentes, como já vimos no exemplo do quadrado de um hamiltoniano apresentado na última seção (equações 21-22).

Contudo, no caso limite em que $\hbar$ tende a zero a função correspondente ao produto dos operadores quânticos é idêntica ao produto das funções clássicas correspondentes aos operadores. A consideração do limite clássico ($\hbar=0$) transforma dessa maneira o isomorfismo realizado pela transformação de Wigner

em um homomorfismo, pois os operadores cujos correspondentes clássicos diferem por termos de ordem igual ou superior a $\hbar$ são levados na mesma função clássica quando $\hbar = 0$.

Podemos resumir estes resultados na seguinte proposição³:

"Sejam $\rho(q,p)$ e $\sigma(q,p)$ duas densidades de probabilidade no espaço de fase clássico; sejam também $\tilde{\rho}(q',q'')=W^{-1}\rho(q,p)$ e $\tilde{\sigma}(q',q'')=W^{-1}\sigma(q,p)$ as densidades quânticas correspondentes segundo a transformação inversa de Wigner W^{-1} . Se $\rho\sigma$ é o produto das densidades clássicas e $\tilde{\rho}\tilde{\sigma}$ o produto dos operadores quânticos correspondentes, então:

$$\tilde{\rho}\tilde{\sigma} = W^{-1}(\rho\sigma) + O(\hbar) \quad (I)$$

$$(-i/\hbar)(\tilde{\rho}\tilde{\sigma} - \tilde{\sigma}\tilde{\rho}) = W^{-1}\{\rho, \sigma\} + O(\hbar^2) \quad (II)$$

$\{...\}$ = parêntesis de Poisson

$$\tilde{\rho}\tilde{\sigma} + \tilde{\sigma}\tilde{\rho} = 2W^{-1}(\rho\sigma) + O(\hbar^2) \quad (III)$$

A equação I expressa o fato de que no limite clássico o produto não-comutativo de operadores no espaço de operadores quânticos é idêntico ao produto comutativo de funções definido no espaço clássico. A segunda equação é a regra de Dirac, estudada na seção anterior: as grandezas conservadas quântica e classicamente são as mesmas, e o produto de Lie da álgebra quântica $\mathcal{L}_Q$ (comutador) transforma-se no produto de Lie clássico de $\mathcal{L}_C$ (parêntesis de Poisson). Finalmente, a igualdade III é também uma consequência de I: no limite clássico $W\tilde{\rho}\tilde{\sigma}$ é igual a $W\tilde{\sigma}\tilde{\rho}$, e ambos serão levados no mesmo produto de funções clássicas.

Bruer consegue com este resultado estabelecer uma

³Bruer(1984), pp. 186-188; veja-se a demonstração no apêndice II.

relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica que satisfaz, segundo ele, as três condições formais (i)-(iii): partindo da mecânica quântica obtemos uma teoria que possui a mesma estrutura da mecânica clássica, i.e., uma teoria cujas variáveis possuem as mesmas propriedades das variáveis clássicas, inclusive no que diz respeito à sua evolução temporal. Apesar disso, é preciso verificar se a teoria obtida desta forma é realmente a mecânica clássica, e não somente um formalismo com a mesma estrutura. Em outras palavras, precisamos verificar se não se trata apenas de uma nova representação de uma álgebra de Lie, diferente da mecânica clássica.

Um empecilho possível a essa identificação já foi examinado anteriormente. Trata-se do fato de que a função de Wigner, apesar de real, não pode em geral assumir valores positivos em todo o espaço de fase. Se isto se repetir com as densidades $\rho(q,p)$ utilizadas por Bruer, será impossível dizer que no limite clássico $\rho(q,p)$ é de fato uma densidade de probabilidade clássica. Ocorre contudo que no limite em que $\hbar$ tende a zero a função de Wigner torna-se positiva em todo o espaço de fase⁴. Este resultado, demonstrado por Leaf((1968), p. 72), é necessário para que se possa interpretar ρ como uma densidade de probabilidade, pois garante que tal interpretação não levará a contradições como no caso da função de Wigner fora do limite clássico.

Uma vez garantida desta forma a consistência da teoria obtida, cabe perguntar se ela é de fato capaz de abranger todos os resultados da mecânica clássica. É impossível, por

⁴Este fato, porém, não é mencionado por Bruer!

exemplo, obter-se uma função de onda quântica cuja transformada de Wigner reproduza um estado clássico que viole as relações de indeterminação de Heisenberg⁵.

Um estado puro clássico é definido por Bruer como um estado onde todas as variáveis dinâmicas de um sistema possuem valores bem definidos. No espaço de fase um estado deste tipo é representado, para um certo instante de tempo, por uma função delta de Dirac: a probabilidade de se encontrar o sistema em uma região do espaço de fase é zero se essa região não contém o ponto que representa o estado do sistema, e é igual a um se ela o incluir.

A solução encontrada por Bruer para obter um estado puro clássico a partir da mecânica quântica consiste em aplicar a transformação de Wigner a um estado quântico adequadamente construído, calculando em seguida seu valor quando $\hbar$ tende a zero. Seja a função de onda normalizada

$$\psi(q) = \left(\frac{2}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \left(\frac{1}{b}\right)^{1/2} e^{ip_c q/\hbar} e^{-[(q-q_c)/b\hbar^{1/2}]^2}. \quad (23)$$

A densidade de probabilidade quântica $\tilde{\rho}(q, q')$ associada a este estado é

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}(q, q') &= \psi(q)\psi^*(q') \\ &= -\left(\frac{2}{\pi\hbar}\right)^{1/2} e^{ip_c(q-q')/\hbar} e^{-[(q-q_c)/b\hbar^{1/2}]^2} e^{-[(q'-q_c)/b\hbar^{1/2}]^2}; \end{aligned} \quad (24)$$

calculando sua transformada de Wigner (Bruer(1984), p. 194) obtemos

⁵ Isto é uma consequência do fato de que a função de Wigner deve reproduzir os resultados da teoria quântica, onde não existem estados físicos reais que violem essas relações.

$$\begin{aligned}
 W\tilde{\rho}(q,q') &= \rho(q,p) = \frac{1}{2\pi b} \left(\frac{2}{\pi\hbar}\right)^{1/2} \int da \, e^{ipa} \tilde{\rho}\left[q - \frac{a\hbar}{2}, q + \frac{a\hbar}{2}\right] \\
 &= \frac{2^{1/2}}{\pi\hbar} e^{-2(q-q_c)^2/\hbar b^2} e^{-b^2(p-p_c)^2/2\hbar} .
 \end{aligned} \tag{25}$$

A equação 25 representa uma distribuição de probabilidade gaussiana com seu valor máximo no ponto (q_c, p_c) do espaço de fase; consideremos agora o seu limite clássico. À medida que o valor de $\hbar$ vai diminuindo, o fator $1/\hbar$ à frente da equação aumenta até infinito. As exponenciais em q e p , contudo, diminuem muito mais depressa, de modo que a densidade de probabilidade $\rho(p,q)$ terá um valor apreciável somente nas vizinhanças do ponto (q_c, p_c) , ou seja quando diminuirmos o valor da constante de Planck o estado puro quântico se transforma em uma função delta $\delta(q-q_c, p-p_c)$ sobre o espaço de fase clássico;. Assim, a função de Wigner reproduz não somente a estrutura algébrica clássica, mas também seus estados puros, no limite em que $\hbar$ tende a zero.

A análise que acabamos de fazer permite responder agora à terceira questão formulada no início deste capítulo, a saber, se há alguma relação entre a mecânica clássica e a mecânica quântica enquanto construções matemáticas abstratas. Os resultados da seção anterior apontavam inicialmente para uma resposta negativa, devido às diferenças estruturais entre as duas teorias. Um estudo mais detalhado revelou porém acima dessas diferenças uma estrutura mais ampla comum a ambas as teorias, e da qual cada uma delas é uma representação distinta. O problema de estabelecer uma relação entre elas transformou-se então na busca de uma relação entre duas representações diferentes de uma álgebra de Lie.

Construímos então com o auxílio da função de Wigner um isomorfismo entre duas representações da mesma álgebra de Lie quântica $\mathcal{L}_Q$. Para obter a partir dela uma representação da álgebra

de Lie clássica $\mathcal{L}_C$ consideramos o caso limite em que a constante de Planck $\hbar$ é igual a zero, e recuperamos o espaço das funções de fase clássicas, assim como a estrutura dinâmica desta teoria.

A relação estabelecida desta forma consiste em um homomorfismo entre as duas teorias, isto é, uma relação muitos-para-um: vários operadores quânticos que diferem entre si por termos múltiplos de $\hbar$ serão levados por esse processo a uma mesma função clássica. Obtivemos portanto uma resposta positiva para a existência de uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica enquanto teorias matemáticas abstratas. No restante deste trabalho estudaremos o conceito de redução interteórica a partir do ponto de vista da filosofia da ciência, voltando depois a analisar os exemplos apresentados até agora sob essa nova ótica, assim como as consequências desses exemplos para a própria visão filosófica.

4 - Redução entre a Mecânica Quântica e a Mecânica Clássica ?

4.1 - INTRODUÇÃO

Ao longo dos três capítulos anteriores, tentamos esboçar um quadro geral sobre a relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, sem entrar em uma discussão mais profunda, do ponto de vista filosófico, do conceito de redução, bem como de seu papel na atividade científica. A razão deste procedimento fica clara ao notarmos a quantidade e a variedade de relações descobertas entre as duas teorias. Elas vão desde propostas filosóficas, como o princípio de Complementaridade, até relações matemáticas abstratas como o resultado de Bruer, passando pela resolução de problemas teóricos como auxílio de métodos de aproximação (método WKB).

Cada um daqueles resultados estabelece algum tipo de ligação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, mostrando a existência de diferenças e semelhanças entre as duas teorias. O estabelecimento de uma relação entre duas teorias não basta, contudo, para afirmarmos a existência de uma redução; tampouco analisamos de maneira mais detida este conceito que, como veremos,

é ainda bastante discutido na literatura. Este capítulo será dedicado portanto a essa análise, após o que retomaremos os resultados já apresentados para avaliá-los dentro deste contexto filosófico.

Uma das motivações para o estudo filosófico das reduções interteóricas é a sua ligação com o conceito de progresso da ciência. Ao longo do tempo teorias científicas já aceitas são substituídas por outras, modificadas, ou mesmo "englobadas" por teorias consideradas mais gerais. Este processo deveria levar, em princípio, a um aumento do 'conhecimento científico', que pode ocorrer por um aumento da evidência experimental tratada com sucesso por uma teoria ou área da ciência, ou por uma mudança nos conceitos utilizados por ela. Um conceito de redução adequadamente construído deveria servir neste contexto para apoiar a idéia de que este aumento de fato ocorre (e.g. Popper(1963), cap. 10).

A redução aparece assim como uma das relações mais importantes entre duas teorias, e em geral pode ser entendida como uma relação entre uma teoria e seu caso especial (cf. Nickles(1973), p. 181). Existem porém várias formas de relacionar uma teoria a seus casos especiais; uma determinação mais precisa do conceito de redução pode então ser obtida pela imposição de condições, formais ou não, sobre essas relações, de maneira a dar conta do papel da redução na pesquisa científica e na avaliação de

seu progresso¹.

Antes de continuar é necessário contudo um esclarecimento sobre o uso das expressões 'redução', 'reduz-se a' e teoria 'reduzida' e 'redutora', as quais apresentam o inconveniente de mudar de significado de acordo com a situação em que são utilizadas. Assim diz-se por exemplo que "a ótica geométrica reduz-se ao eletromagnetismo", e que "a teoria da relatividade restrita reduz-se à mecânica clássica"².

No primeiro exemplo a teoria menos 'geral' ('reduzida') reduz-se a uma teoria mais 'fundamental' ('redutora'), enquanto no segundo caso acontece o inverso. Esta diferença é resultado de certas características das reduções mencionadas, que serão estudadas em seguida. Entrementes, para evitar confusões devidas ao uso de tais expressões, elas serão substituídas por 'teoria primária T₁' e 'teoria secundária T₂'. Qualquer que seja o caso de redução estudado, diremos que a teoria

¹Deve-se distinguir entre condições sobre a redução e relações de redução. Nos três capítulos anteriores vimos vários exemplos de relações formais e não-formais entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. O objetivo da imposição de condições formais ou não-formais sobre tais relações é exatamente determinar quais dentre as relações possíveis entre duas teorias são de fato relações de redução.

²Bruer(1982) identifica esta mudança ao uso feito destas expressões por filósofos e cientistas. Ela tem porém uma origem mais profunda, como mostram os dois exemplos apresentados, que são utilizados nessa forma tanto na filosofia da ciência quanto na pesquisa científica.

primária T_1 é mais 'geral' ou 'fundamental' que a teoria secundária T_2 ³, que é normalmente considerada um 'caso especial' da primeira. Feita esta ressalva, passaremos agora a um estudo mais detalhado do conceito de redução e de sua aplicação às relações entre a mecânica quântica e a mecânica clássica já apresentadas.

³Em um sentido amplo, poderíamos dizer que ' T_1 explica T_2 '. Não pretendemos contudo entrar em uma discussão do conceito de explicação, que é por si só bastante controvertido. Para um estudo recente desta noção veja-se Salmon(1984).

primária T_1 é mais 'geral' ou 'fundamental' que a teoria secundária T_2 ³, que é normalmente considerada um 'caso especial' da primeira. Feita esta ressalva, passaremos agora a um estudo mais detalhado do conceito de redução e de sua aplicação às relações entre a mecânica quântica e a mecânica clássica já apresentadas.

³Em um sentido amplo, poderíamos dizer que ' T_1 explica T_2 '. Não pretendemos contudo entrar em uma discussão do conceito de explicação, que é por si só bastante controvertido. Para um estudo recente desta noção veja-se Salmon(1984).

4.2. - A VISÃO RECEBIDA

Uma das primeiras análises da redução e de sua ligação com o progresso da ciência foi apresentada por Kemeny e Oppenheim(1956). De acordo com estes autores uma relação entre a teoria primária T_1 e a secundária T_2 é redutiva se:

- 1) T_1 explica ou prediz pelo menos os mesmos dados observacionais tratados por T_2 ,
- 2) T_1 tem pelo menos o mesmo poder de sistematização de T_2 , e
- 3) T_2 contém termos teóricos que não aparecem em T_1 .

A idéia de progresso subjacente a esta noção de redução está vinculada à capacidade das teorias envolvidas de explicar ou predizer certos fenômenos. Nos casos de redução os domínios de duas teorias distintas se sobrepõem, e pode-se então falar de um progresso na sistematização de dados observacionais. Além das possíveis críticas contra as concepções positivistas implícitas nesta definição — e.g. a noção de domínio¹ — os critérios de Kemeny e Oppenheim não levam em consideração a

¹Para uma análise bem conhecida desta noção veja-se Shapere(1969).

possibilidade de um progresso conceitual da ciência. Com efeito, a maioria dos exemplos padrões de redução — mecânica clássica — teoria da relatividade, termodinâmica — mecânica estatística — envolve não somente a recuperação de predições mas também relações teóricas e, em alguns casos, redução ontológica. Por outro lado, esta visão tampouco dá conta do papel da redução na pesquisa científica, onde seu uso quase sempre envolve mais que a simples sistematização de dados observacionais.

O mais conhecido expoente da visão tradicional de redução é Ernest Nagel, que apresenta uma análise mais sofisticada deste conceito — que inclui a análise de Kemeny e Oppenheim — no capítulo XI de "The Structure of Science" (Nagel(1961)). A principal motivação de Nagel para levar a cabo seu estudo das relações entre teorias é, como veremos, o caráter unificador de certas reduções². Este aspecto da redução interteórica aparece na história da ciência como uma absorção de uma teoria (secundária) por outra (a teoria primária), que possui em geral, mas não sempre, um domínio mais amplo que o da teoria absorvida. A idéia é que a teoria primária deve ser capaz de explicar a secundária, de tal maneira que esta pode ser considerada como um caso especial da primeira aplicada em seu domínio (cf. seq. 4.1). Nagel entende por explicação a dedução lógica a partir da teoria primária dos teoremas e enunciados da teoria secundária, o que o leva a distinguir dois tipos de redução, homogênea e heterogênea.

Dado que é impossível construir uma dedução lógica cujas conclusões contenham termos que não aparecem em suas

²Está incluída aqui uma certa noção de progresso, que aparece implicitamente em suas condições não-formais sobre a redução (Nagel(1961), pp. 328-333).

premissas, o estabelecimento de uma relação entre duas teorias passa por uma consideração dos termos empregados por elas. Nos casos em que a teoria primária contém em seu vocabulário descritivo todo o vocabulário da teoria secundária a redução é chamada por Nagel de homogênea. Um exemplo simples de redução homogênea bem sucedida, segundo ele, é a explicação com o auxílio da mecânica newtoniana das leis do movimento de queda livre de Galileu.

Existem porém casos de redução entre teorias que não partilham um vocabulário comum, por exemplo a relação entre a mecânica clássica e a termodinâmica, que é utilizada por ele para um estudo das reduções chamadas heterogêneas. A estratégia de Nagel para tratar os casos de redução heterogênea consiste em transformar essas reduções em reduções homogêneas. Para isso ele propõe, após uma análise geral da estrutura das teorias científicas, duas condições formais necessárias ao estabelecimento de uma redução:

1 - Condição de Conectabilidade

Devem introduzir-se suposições que relacionem o termo 'A' — presente na teoria secundária e ausente na primária — com termos teóricos pertencentes à teoria primária. Um exemplo deste procedimento é a identificação entre 'temperatura' e 'energia cinética média' na redução termodinâmica-mecânica clássica.

2 - Condição de Dedutibilidade

Da conjunção da teoria primária com as suposições necessárias para satisfazer a condição de conectabilidade deve ser possível deduzir as leis e teoremas da teoria secundária.

A condição de conectabilidade aplica-se

automaticamente às reduções homogêneas, visto que nesses casos a teoria primária já contém todo o vocabulário descritivo da secundária. Ao ser aplicada às reduções heterogêneas esta condição tem o efeito de transformá-las em reduções homogêneas que, no entender de Nagel, não apresentam problemas especiais. A satisfação da condição de dedutibilidade indica então a existência de redução entre as teorias tratadas.

As suposições utilizadas no preenchimento da condição, por sua vez, podem ser de três tipos (Nagel(1961), p. 325):

(i) Conexões lógicas entre os significados das expressões das duas teorias. Neste caso afirma-se que 'A' está logicamente relacionado com 'B', de modo que o significado de 'A' definido por sua utilização na teoria secundária possa ser traduzido em termo da utilização de 'B' na teoria primária.

(ii) Convenções criadas por um ato deliberado. Estas convenções aparecem como definições coordenadoras, e o significado de 'A' não precisa ser analisado em termos das expressões teóricas da teoria primária. Assim, se 'A' é um termo de observação da teoria secundária a definição coordenadora atribui uma certa significação experimental a certas expressões teóricas da teoria primária.

(iii) Vínculos factuais ou materiais. As suposições ligando as duas teorias estabelecem que a aparição do 'estado de coisas B' na ciência primária é condição suficiente (ou necessária e suficiente) para a aparição do 'estado de coisas A' na ciência secundária. O ponto fundamental é que neste caso é necessário determinar de maneira independente a aparição de cada um dos 'estados de coisas', devendo-se recorrer a juízos empíricos para

apoiar o vínculo factual proposto.

Embora o primeiro tipo de conexão seja facilmente identificável ao se empreender uma redução entre duas teorias, nem sempre é possível distinguir entre os vínculos (ii) e (iii). O exemplo escolhido por Nagel é a identificação entre a energia cinética média e a temperatura na dedução, a partir da mecânica clássica, da lei dos gases ideais de Boyle. Podemos neste caso partir de um cálculo teórico no qual se identificam diretamente a energia cinética média e a temperatura, com o que estabeleceríamos uma conexão do segundo tipo entre as duas teorias. Por outro lado, pode-se também estabelecer uma ligação entre elas através dos outros conceitos, pressão e volume, envolvidos na lei de Boyle, e em seguida verificar que a energia cinética média obtida teoricamente possui as mesmas características da temperatura, com o que estabeleceríamos um vínculo redutivo factual.

Nagel tem plena consciência deste fato, mas não lhe atribui maior importância. O essencial, segundo ele, é vincular de alguma forma os termos teóricos das duas teorias, de maneira a possibilitar a dedução lógica de uma delas a partir da outra, em conjunção com as hipóteses que ligam seus termos. Assim, no caso da lei de Boyle, o importante é vincular a temperatura e a energia cinética média; a análise de Nagel é relevante na medida em que mostra que isto não é possível a partir da simples análise lógica dos conceitos envolvidos.

Por outro lado, a simples satisfação das condições 1 e 2 não é para ele evidência suficiente para a aceitação de uma relação interteórica como sendo uma redução: estas condições não são capazes de distinguir entre relações triviais e 'realizações científicas valiosas' (cf. n.1 desta seção). Devido a este problema

Nagel acrescenta às suas condições formais uma condição não-formal. De acordo com ele, as suposições teóricas da teoria primária não podem ser meras hipóteses ad hoc: elas deverão receber apoio de juízos empíricos que possuam algum grau de força confirmatória. Uma vez satisfeita esta condição, e as duas condições formais, ficará caracterizada uma redução interteórica.

O ponto de vista de Nagel sobre a redução pode ser criticado de várias formas. Por um lado suas condições sobre a redução são em alguns casos fortes demais, não podendo ser consideradas necessárias; em outras situações, pelo contrário, elas não são suficientes para excluir relações interteóricas normalmente consideradas como pseudo-reduções. Veremos a seguir exemplos dessas situações, antes de passar a outras críticas.

Uma das críticas mais conhecidas à noção de redução de Nagel é que em quase todos os casos de redução as teorias envolvidas são logicamente incompatíveis, o que impede a dedução das leis da teoria secundária a partir da teoria primária (cf. Feyerabend(1962)). Um exemplo disso é apresentado por Friedman((1982), p. 24) e diz respeito, ironicamente, à relação termodinâmica-mecânica clássica: enquanto esta última teoria é reversível, a termodinâmica trata também de processos irreversíveis, que não podem portanto ser deduzidos da mecânica clássica.

A forma mais comum de tratar este problema consiste em afirmar que, apesar desta incompatibilidade lógica, a inclusão de certas hipóteses — hipótese ergódica, exclusão de conjuntos de Lebesgue de medida zero — é suficiente para a dedução. Nas palavras de Sklar((1973), p. 209),

"The actual distribution of initial states is such

that the calculations done by the Gibbs method, with the natural probability distribution over the ensemble and the natural reduction to phase-averages, "works". This is a matter of fact, not of law. These "facts" explain the succes of the Gibbs method. In a clear sense they are the only legitimate explanation of its success."

A consequência de aceitar este tipo de tratamento é que a verdade dos teoremas da termodinâmica passa a ser uma questão 'de fato' e não 'de lei', devido às suposições factuais necessárias à sua dedução. A redução da termodinâmica à mecânica não seria então a redução de uma teoria a outra no sentido de Nagel, mas apenas a explicação de um conjunto de generalizações factuais por meio de uma teoria. Uma outra alternativa à visão de Nagel, sugerida em Schaffner(1967), definiu a redução como a dedução lógica de uma 'teoria secundária aproximada corrigida' T_2^* a partir da teoria primária T_1 , onde T_2^* é 'análoga' à teoria secundária T_2 . Qualquer que seja a solução escolhida o exemplo acima mostra que as condições de Nagel são fortes demais, levando à exclusão até mesmo do caso considerado por ele um paradigma de redução bem sucedida.

Por outro lado essas condições são em alguns casos insuficientes; um exemplo simples aparece na relação entre a teoria cinética dos gases e a mecânica clássica. Em sua análise deste caso de redução Nagel((1961), pp. 315-317) divide a teoria cinética em três componentes distintos: um conjunto de hipóteses sobre a estrutura da matéria, suposições de caráter estatístico, e as leis da mecânica clássica. Se esta divisão for considerada correta, então é possível deduzir a partir da teoria cinética dos gases as leis da mecânica clássica, visto que estas leis estão

incluídas na teoria. Este fato mostra que as condições de Nagel não são capazes de distinguir uma redução entre teorias da aplicação de uma teoria a um certo domínio.

Um outro exemplo desta insuficiência é apresentado em Sklar(1967), desta vez em ligação com as sentenças correlatórias necessárias às reduções heterogêneas. Segundo a lei de Wiedemann-Franz a razão entre as condutividades térmica e elétrica em um metal é igual à sua temperatura absoluta T multiplicada por uma constante. Dada esta lei, poderíamos construir um bicondicional ligando os vocabulários das teorias da condutividade elétrica e da condutividade térmica nos metais:

"A condutividade elétrica de um metal é $\sigma \Leftrightarrow$ a sua condutividade térmica é σT (x constante)."

Este bicondicional permite deduzir a partir da teoria da condução elétrica alguns resultados da teoria da condução térmica, de uma forma que satisfaz as condições de Nagel (inclusive a condição não-formal). Esta dedução não pode contudo ser considerada uma redução entre teorias, e as condições utilizadas se mostram novamente insuficientes para excluí-la.

As críticas apresentadas acima contra a visão de Nagel dizem respeito principalmente aos casos de redução heterogênea. Uma crítica contra a possibilidade de reduções homogêneas é feita por Kuhn((1962), caps. 9,11), e decorre do fato de que tais reduções envolvem quase sempre teorias que se sucedem no tempo. Nestes casos, embora a teoria primária conserve os termos teóricos da teoria mais antiga (secundária), estes termos possuem significados diferentes nas duas teorias, o que implica, segundo ele, que ambas dizem respeito a visões de mundo 'incomensuráveis'. Este fato já era do conhecimento do próprio

Nagel, que comenta a recuperação das leis do movimento de queda livre de Galileu a partir da mecânica newtoniana da seguinte forma (Nagel(1961), p. 313):

"... la reducción no da origen, tampoco, a problemas lógicos especiales, aunque de hecho produjo una revolución en la vision del mundo que poseían los hombres."

Este ponto de vista foi também desenvolvido por Feyerabend((1965), p. 180), que adotou a visão de que

"... the meaning of every term we use depends upon the theoretical context in which it occurs. Words...obtain their meaning by being part of a theoretical system."

Portanto, uma mudança de contexto teórico implica uma mudança no sentido das palavras usadas nesse contexto.

Os pontos de vista de Kuhn e Feyerabend fazem parte de suas viões sobre a natureza da ciência, que diferem bastante da visão de Nagel. Elas baseiam-se, como é bem conhecido, em uma crítica à distinção positivista entre termos teóricos e observacionais, e na existência de uma carga teórica ('theory-ladenness') inerente aos procedimentos de observação que impossibilita a comparação de teorias sucessivas. Estes pontos de vista foram alvo de muitas críticas, e não vamos discutí-las com mais detalhes aqui. Para uma revisão deste assunto veja-se Suppe(1977); uma discussão crítica do conceito de 'theory-ladenness', no contexto de um estudo da epistemologia do experimento. é apresentada em Franklin(1986).

As críticas apresentadas acima contra a visão de Nagel podem ser resumidas da seguinte forma. Em primeiro lugar suas condições não são suficientes para a exclusão de certos casos de falsas reduções possíveis, como no exemplo da lei de

Wiedemann-Franz. Por outro lado estas mesmas condições não deixam espaço a mudanças e correções de teorias científicas, além de apresentarem uma tendência a confundir teorias e ramos da ciência. Estes fatos mostram a necessidade de uma revisão dos pontos de vista mais antigos sobre a redução; os resultados mais recentes neste sentido são o assunto da próxima seção.

4.3 - A NOVA VISÃO DA REDUÇÃO

Os trabalhos filosóficos mais recentes sobre o problema da redução apresentam um profundo afastamento da visão tradicional de Nagel. Em vez de apresentar critérios para a redução, autores como Sklar(1967) e Nickles(1972) preferem analisar e classificar as várias maneiras como ela aparece e é utilizada na história da ciência. Este novo tratamento do problema aparece de forma mais clara em Nickles(1973). Neste trabalho o autor retoma e desenvolve uma distinção entre dois tipos de redução, chamados por ele de Redução1 e Redução2, introduzida em seu artigo anterior.

Notamos na introdução deste capítulo que a expressão 'reduz-se a' tem significados diferentes segundo as teorias envolvidas na redução. Assim dizemos em algumas situações que a teoria primária (e.g. a relatividade restrita) 'reduz-se à' teoria secundária (mecânica clássica), enquanto em outros casos é a teoria secundária (e.g. termodinâmica) que 'reduz-se à' teoria primária (mecânica clássica). De acordo com Nickles((1973), p.181)

este fato aponta a existência de duas tradições distintas no estabelecimento de reduções entre teorias, que se reflete na distinção feita por Nagel entre reduções homogêneas e heterogêneas.

Tomemos inicialmente os casos chamados por Nickles de redução¹. Um paradigma deste tipo de redução é a relação entre a termodinâmica e a mecânica clássica; nestes casos a redução é quase sempre dedutiva (no sentido de Nagel), e envolve sobretudo uma consolidação do esquema conceitual da ciência. Esta consolidação aparece como uma economia conceitual — menos suposições teóricas independentes — ou ontológica, ou ambas. A redução¹ pode envolver também a unificação de duas áreas de pesquisa anteriormente separadas, i.e. ela leva a uma combinação de domínios distintos, e requer correlações como aquelas propostas por Nagel para ligar os vocabulários descritivos das duas teorias.

A segunda tradição reducionista encontrada por Nickles é a redução entre teorias que se sucedem no tempo. Nestes casos não se pode falar em dedução lógica no sentido estrito, pois como vimos a teoria primária é quase sempre logicamente incompatível com sua antecessora. O exemplo escolhido por Nickles (1973), p. 182) é a fórmula do momento relativístico (m_0 = massa de repouso)

$$p = m_0 v / (1 - v^2/c^2)^{1/2} . \quad (1)$$

No limite em que v tende a zero esta equação se transforma na fórmula clássica do momento, $p = m_0 v$; a redução² pode então ser entendida como uma transformação da teoria primária na teoria secundária. Já vimos um exemplo semelhante no caso das transformações de Galileu e de Lorentz. Ambos os exemplo apresentam uma característica da redução² que a distingue da

redução₁, a saber, o uso de limites e aproximações. Neste tipo de redução diz-se normalmente que a teoria primária reduz-se à teoria secundária, enquanto que nos casos de redução₁ é a teoria secundária que se reduz à primária.

Nickles chama a redução₁ de domínio-combinante e a redução₂ de domínio-preservante; esta ação diferente sobre os domínios das teorias reflete-se por sua vez nos papéis destes dois tipos de redução na pesquisa científica. A redução₁ proporciona economia teórica (ontológica e/ou postulacional) através da explicação da teoria secundária, que é realizada de uma só forma pela redução.

A redução₂, pelo contrário, não envolve economia postulacional ou ontológica; seu papel na pesquisa científica é sobretudo heurístico e justificatório. Heurístico, porque a idéia de se recuperar a teoria antiga no 'limite clássico' serve como um guia na construção da nova teoria. Justificatório, porque essa recuperação transfere à nova teoria a evidência corroborativa da teoria antiga. Esta justificação, por sua vez, pode ocorrer de várias formas, segundo a situação física ou limite escolhido, i.e. a redução₂ envolve várias relações interteóricas distintas, ao contrário da redução₁. Dada a sua importância, estas duas características da redução₂ merecem um maior esclarecimento.

O ponto de vista tradicional sobre a distinção heurístico/justificatório estabelece uma separação entre estes dois conceitos na qual a heurística é muitas vezes relegada ao domínio da psicologia, não sendo considerada merecedora de uma análise filosófica (e.g. Popper(1959), p.31). Entretanto, uma visão contrária tem sido desenvolvida por filósofos como Post(1971) e o próprio Nickles. Segundo estes autores, embora não

se possa encontrar um mecanismo 'algorítmico' para a descoberta científica, existem certos procedimentos de construção de novas teorias que envolvem algo mais que simples tentativa e erro (Post(1971), p. 218). Sua tese é de que existem certas restrições impostas à construção de teorias novas pela teoria disponível, que aparecem na forma de relações interteóricas (não necessariamente satisfeitas) que guiam o processo de descoberta. Post analisa em seu trabalho uma série de relações possíveis deste tipo, das quais a mais fundamental é o chamado Princípio de Correspondência Geral (cf. Nickles(1988), p.27). Segundo este critério qualquer teoria nova T_1 deve dar conta do sucesso de sua antecessora T_2 'degenerando' naquela teoria nas situações em que T_2 era corroborada. A satisfação deste princípio, por outro lado, é entendida por Nickles como uma justificativa para T_1 , isto é, a evidência favorável à teoria secundária passa a corroborar a teoria primária¹.

Estas características da redução levaram Nickles a substituir, em seu trabalho mais recente (Nickles(1988)), a distinção entre redução 1 e 2 por quatro outras distinções, baseadas na função preenchida pela redução e na forma como é realizada.

A primeira distinção feita por ele, já mencionada em seu trabalho de 1973, diz respeito à relação entre os domínios das teorias envolvidas. Segundo este critério uma redução

¹Nickles(1984,1987) termina por eliminar a distinção heurístico/justificatório; este ponto de vista é contudo bastante controvertido, e não será mais discutido aqui.

interteórica pode ser domínio-combinante, nos casos em que dois domínios estruturados distintos são unificados sob uma única teoria², como na redução da termodinâmica à mecânica. Por outro lado, é possível que a teoria primária apenas conserve o domínio da secundária, o que ocorre sobretudo nos casos de redução entre teorias sucessivas. Nestes casos de redução domínio-preservante o papel principal da redução é heurístico, durante a elaboração da nova teoria, servindo depois disso para justificar a substituição da teoria antiga. Já as reduções domínio-combinantes possuem um carácter eminentemente unificatório, decorrente da própria existência de dois domínios³.

A análise da forma das relações entre as teorias decorrentes da realização da redução permite a construção de uma segunda distinção, entre redução consolidatória (c-redução) e transformatória (t-redução). O exemplo clássico de redução transformatória é aquele em que uma teoria sucessora T_1 'transforma-se' em sua antecessora T_2 em algum tipo de limite (o 'limite clássico'). Segundo Nickles ((1988), p.54. it.or.)

"It is reduction in the broad but basic sense in which performing a certain operation on an item reduces it to another,

²Shapere foi o primeiro a analisar de maneira profunda essa noção de domínio científico, colocando-a em um lugar central do estudo das teorias científicas (Shapere(1972)). A questão da natureza de tais domínios e da forma como são estruturados ou organizados ainda não foi contudo esclarecida.

³Naturalmente qualquer redução deve preservar domínios, em algum sentido. A redução domínio preservante deve portanto ser entendida como 'meramente' domínio preservante.

i.e. *transforms* it into another (or another form of itself — there may be an implicit continuity of underlying 'substance'). "

A t-redução não se limita a operações de tomada de limite, podendo incluir também idealizações e técnicas de aproximação. Este tipo de redução é difícil, no caso de grandes teorias, em sua forma pura; ele é mais comum em reduções locais, i.e. em pequenas áreas de contato entre os domínios das duas teorias.

A distinção entre c-redução e t-redução aparece sobretudo nas relações entre as teorias ligadas por elas. Nos casos de redução consolidatória a teoria secundária é absorvida pela teoria primária, e ambas são logicamente compatíveis. A redução implica então uma economia postulacional e ontológica, e boas razões para aceitar T_1 são também boas razões para aceitar T_2 . Na redução transformatória acontece o inverso: a teoria primária substitui a secundária, pois ambas são logicamente incompatíveis. Ao contrário da c-redução, a evidência em favor de T_1 não serve para corroborar T_2 , nem tampouco existe economia postulacional ou ontológica.

Nickles distingue ainda as reduções homogêneas e heterogêneas, que já haviam sido propostas por Nagel, e dedutivas e não-dedutivas. As reduções dedutivas são aquelas em que a teoria secundária é uma consequência lógica da teoria primária, e é possível principalmente nos casos de redução consolidatória. O conceito de redução não-dedutiva é proposto por ele como uma resposta às críticas contra o uso de limites, aproximações e idealizações. Nestes casos, segundo Nickles, não se pode falar em dedução estrita, mas apenas em um tipo mais amplo de dedução (derivação) no sentido de 'tomar (algumas) consequências lógicas'. A principal vantagem das reduções não-dedutivas, e também das

transformatórias, é que ambas são imunes às críticas de Kuhn e Feyerabend sobre a mudança de significado e a incompatibilidade lógica, que são eliminadas pela transformação da teoria e pela não-dedutividade estrita da relação de redução.

Nickles deixa em aberto a questão da superposição ou equivalência das quatro novas distinções propostas, que exigiria um estudo detalhado de casos históricos. Todavia, quase todas as reduções transformatórias serão também não-dedutivas, o que pode levar à equivalência destas duas classificações. Para que isso não aconteça, e possamos falar de reduções transformatórias dedutivas, podemos reinterpretar essa transformação retirando-a da 'dedução' e colocando-a no nível interpretativo: ao realizar uma redução entre teorias que se sucedem no tempo ignoramos momentaneamente as diferenças conceituais entre elas ao analisar os resultados obtidos. É este de fato o procedimento do cientista quando compara duas teorias, sucessivas ou não. Assim, ao comparar as predições da velha teoria quântica e do eletromagnetismo clássico, na região de altos números quânticos, Bohr deixa de lado o aspecto interpretativo para fixar-se nas predições das duas teorias. Ele está contudo plenamente consciente deste fato, e nota que apesar de sua equivalência empírica as duas teorias pressupõem processos físicos diferentes. A noção de redução transformatória mantém dessa forma suas características e sua importância.

Existe ainda uma característica dos casos de redução não-dedutiva, homogênea e transformatória que já foi mencionada por alto ao falarmos da redução²: a maioria das reduções deste tipo serão reduções parciais, pois dado seu caráter não-dedutivo não existe em geral uma absorção da teoria secundária pela teoria primária, mas somente uma série de relações locais entre ambas. A

classificação de Nickles exige portanto a aceitação deste conceito — que ele não analisa mais profundamente — como um tipo válido de redução.

O estudo feito até agora dos conceitos e formas de redução levou-nos ao abandono de certas exigências em favor de uma visão mais neutra, de análise das possíveis relações entre teorias. Apesar de esclarecedor, um ponto de vista como este pode obrigar-nos a incluir entre as reduções relações interteóricas normalmente não consideradas como tais (e.g., a lei de Wiedemann-Franz na seção anterior). Uma possível solução para este problema é a imposição de condições não-formais sobre a redução, como no caso de Nagel. Um outro exemplo são as condições propostas por Glymour(1970) e utilizadas por Bruer(1982) em sua análise da relação mecânica quântica-mecânica clássica:

(i) A redução deve mostrar como e onde a teoria secundária era bem sucedida, em termos da teoria primária.

(ii) A redução deve unificar a teoria física, no sentido de levar a uma economia ontológica e/ou postulacional (cf. Sklar(1967)).

A condição (i) acima é uma formulação do princípio de correspondência geral, e se aplica sobretudo aos casos de redução heterogênea consolidatória; o mesmo pode ser dito de (ii), que exige de fato algo que é característico dessas reduções. A satisfação destas condições é porém muito difícil no caso das reduções entre teorias sucessivas, que serão quase sempre parciais, e não levam necessariamente a uma economia postulacional ou ontológica. Glymour e Bruer estão de fato tratando da redução no velho esquema de Nagel, que exclui sistematicamente os casos de redução parcial e aproximações. Logo, mesmo que tais exigências

sejam algumas vezes satisfeitas — o que é sempre positivo para a redução — elas não podem ser consideradas necessárias no interior da nova visão de Nickles.

Por outro lado, a possibilidade de utilizar limites e aproximações nas reduções não-dedutivas pode levar a uma trivialização dessas relações. Nickles((1973), pp. 197-201) nota essa possibilidade, e conclui que uma redução válida não pode incluir a consideração de casos limite sem sentido físico, i.e., para ele um caso limite não deve supor a variação de uma constante numérica $(c, \hbar)$ nem situações físicas inatingíveis (e.g. temperaturas infinitas). Não discutiremos aqui a validade deste ponto de vista. Devemos notar, contudo, que para muitos cientistas é correto falar-se em limites de certas constantes como a velocidade da luz e a constante de Planck, na medida em que elas são tão importantes que passam a caracterizar as teorias em que são utilizadas (veja-se o cap. 3). Por outro lado, em teorias formuladas matematicamente tais limites podem levar a uma compreensão mais profunda de suas estruturas lógico-matemáticas, como nos trabalhos de Ulhorn(1956) e Bruer(1982).

Um outro tipo de trivialização possível é o estabelecimento de uma ligação entre duas teorias através de uma lei empírica como a lei de Wiedemann-Franz, o que pode permitir a uma das teorias a predição de certos resultados experimentais tratados pela outra. Para excluir estes casos, queremos propor agora duas condições necessárias à definição de uma relação interteórica como sendo redutiva:

- I As conclusões da derivação utilizada no estabelecimento de uma redução não podem aparecer entre as premissas dessa derivação.
- II Em uma redução entender-se-á por 'teoria primária' somente

as teorias , leis ou hipóteses estritamente necessárias à derivação.

A exigência I acima impede que da conjunção de uma teoria com uma lei de outra, ou uma lei experimental como a lei de Wiedemann-Franz, seja deduzida a mesma lei (ou uma consequência dela), criando um vínculo não-redutivo entre as duas teorias. A segunda condição (II) restringe o uso da expressão 'teoria primária' de forma a evitar que no caso de uma lei empírica ligando resultados experimentais pertencentes a domínios de teorias distintas, a conjunção da lei empírica com uma dessas teorias permita a predição de resultados experimentais relativos ao domínio da outra.

Vejamos como estas condições se aplicam à lei de Wiedemann-Franz. Em primeiro lugar esta lei não pode ser obtida a partir de nenhuma das duas teorias (da condutividade térmica e da condutividade elétrica); ela não pode portanto aparecer como conclusão de uma derivação usando uma delas, exceto se for incluída como uma das premissas, o que impede a relação obtida, segundo a regra I, de ser chamada de redução.

Por outro lado, suponhamos que é possível mostrar teoricamente que em um certo metal a condutividade elétrica é proporcional ao cubo da temperatura absoluta, i.e. $\sigma = aT^3$ ($a = \text{constante}$). Com o auxílio da lei de Wiedemann-Franz ($\rho = b\sigma T$, $\rho = \text{condutividade térmica}$, $b = \text{constante}$) podemos então deduzir que naquele metal $\rho = ab\sigma T^4$. Este resultado não necessita, para sua obtenção, do uso da teoria da condutividade, mas somente da hipótese (ou resultado experimental) de que a condutividade elétrica varia com o cubo da temperatura , e a lei de Wiedemann-Franz. Somente estas duas premissas, segundo a regra II,

aparecerão sob o rótulo de 'teoria primária'; este fato mostra então que a relação entre os dois grupos de fenômenos não é estabelecida por uma ou outra teoria, mas pela própria lei de Wiedemann-Franz. Note-se ainda que este exemplo não seria excluído pela regra I, pois não se trata aqui da dedução da própria lei, que é portanto uma premissa válida.

Embora necessárias, as condições I e II não são suficientes para a definição de redução. Na próxima seção consideraremos alguns casos de sua aplicação, e analisaremos a classificação de Nickles à luz dos resultados apresentados nos capítulos anteriores. Veremos em particular que o resultado de Bruer apresenta problemas para sua distinção transformatório/consolidatório.

4.4 - ANÁLISE DOS RESULTADOS OBTIDOS

Nos capítulos anteriores foram apresentados vários exemplos de relações entre a mecânica quântica e a mecânica clássica, que incluem desde princípios heurísticos até formulações abstratas das duas teorias, passando por várias formas de aproximação. Dada a análise do conceito de redução desenvolvida nas duas seções anteriores é possível adiantar que a maior parte destes resultados envolvem relações de tipo redutivo, porém parcial. Esta seção é dedicada a uma análise de cada um desses casos de redução.

O primeiro exemplo estudado de uma ligação entre a mecânica clássica e a velha teoria quântica foi o princípio adiabático de Ehrenfest. Apesar de relacionar as duas teorias, este princípio tem sua origem em um teorema obtido somente com o uso da mecânica clássica; devemos distinguir cuidadosamente estes dois fatos. Por um lado o teorema demonstrado por Ehrenfest prescinde de qualquer resultado derivado da velha teoria quântica, e notamos aqui a utilidade da regra II proposta na última seção:

este teorema não implica uma relação de redução entre as duas teorias, pois somente uma delas basta para sua dedução, a saber a mecânica clássica, que é apesar disso a teoria secundária. Em outras palavras, não se pode falar em redução da mecânica quântica à mecânica clássica quando só esta última aparece na derivação que estabelece a redução.

Por outro lado, a aplicação deste princípio implica duas premissas, a primeira afirmando a existência de invariantes adiabáticos, e a segunda limitando os possíveis estados de um sistema quântico em função desses invariantes (cf. seq. 1.1). Seria possível então afirmar que este princípio estabelece uma redução por correspondência — ao nível factual — no sentido de que a antiga teoria quântica implica ('é capaz de demonstrar') a existência de invariantes adiabáticos. Isto porém contraria a regra I, que exclui dos casos de redução as deduções nas quais a conclusão aparece como uma das premissas, neste caso a existência de invariantes adiabáticos. Devemos portanto concluir que o princípio adiabático não estabelece nenhum tipo de redução entre a mecânica clássica e a velha teoria quântica.

A mesma conclusão vale no caso do princípio de correspondência de Bohr: enquanto princípio ele não é capaz de estabelecer uma redução entre as duas teorias¹. Os casos de sucesso, i.e. de validade, deste princípio são porém casos de redução, no sentido de recuperação de resultados experimentais. Como vimos na seção 1.2, esta recuperação não ocorre sempre, e a redução é portanto parcial. É também homogênea, pois o vocabulário

¹ Como vimos na seq 1.2, ele de fato postula essa relação.

descritivo da mecânica clássica está incluído no vocabulário da velha teoria quântica, e transformatória, pois exige a reinterpretação dos resultados segundo os processos característicos das teorias clássicas. Assim, embora o princípio de correspondência não estabeleça uma relação de redução entre as duas teorias, a possibilidade de sua aplicação implica uma redução por correspondência parcial ao nível factual entre elas.

Ao passarmos da velha teoria quântica para sua versão moderna encontramos uma situação bem mais complicada. Os possíveis casos de redução continuam sendo homogêneos e transformatórios, mas um problema mais grave surge na indefinição dos domínios das duas teorias. Ao contrário da velha teoria quântica, onde esses domínios eram mais ou menos bem definidos — identificando-se o domínio clássico com os corpos macroscópicos e, em alguns casos, altos números quânticos — a intrusão do princípio de superposição tem feito fracassar todas as tentativas de determiná-los dentro do âmbito da teoria moderna, visto que este princípio possibilita a existência de superposições macroscópicas de estados classicamente incompatíveis.

Um exemplo dessa intrusão aparece na tentativa de Bohr de justificar seu princípio de complementaridade. Já vimos que este princípio, enquanto ponto de vista filosófico geral, não serve para estabelecer uma relação entre a mecânica clássica e a mecânica quântica (cf. seq. 2.1)². O raciocínio de Bohr passa, porém, pela delimitação dos domínios das duas teorias. O domínio

²Novamente pelo uso da regra I. O uso de conceitos clássicos na mecânica quântica, por exemplo, é uma das premissas da visão de Bohr, o que trivializa a dedução deste fato.

clássico é então determinado com o auxílio das relações de indeterminação de Heisenberg, identificando-se com o mundo macroscópico, "onde as ações envolvidas são muito grandes em comparação com o quantum." Como já dissemos várias vezes, este raciocínio não é correto, e não leva em consideração o problema da aplicação da mecânica quântica a um aparelho de medida macroscópico, o que levaria a uma superposição de estados macroscopicamente distinguíveis. Logo, mesmo a justificativa da filosofia da complementaridade não serve para estabelecer uma relação entre as duas teorias.

Os resultados apresentados nas seções restantes podem ser divididos em dois grandes grupos. No primeiro deles estão incluídos os exemplos de pacotes de onda de Hill³, o oscilador harmônico de Cabrera e Kiwi, o limite clássico da equação de Schrödinger e o método WKB. Todos estes exemplos mostram casos em que as previsões da mecânica quântica e da mecânica clássica são aproximadamente iguais; são portanto casos de redução parcial. O paradigma deste tipo de redução é o próprio teorema de Ehrenfest, que inclui entre seus casos de validade tanto a partícula livre quanto o oscilador harmônico. Além dessa correspondência, é interessante notar que estes resultados — se considerarmos provisoriamente o mundo macroscópico como domínio típico da mecânica clássica — mostram de fato a aplicabilidade da mecânica clássica em sistemas quânticos, i.e. microscópicos, e não o contrário, ou seja, a descritibilidade quântica de sistemas

³ Somente aqueles usados para a descrição de partículas elementares; veja-se a crítica a sua atribuição a corpos macroscópicos na seq. 3.2.

clássicos (macroscópicos). O exemplo mais claro deste fato é o próprio uso do método WKB em regiões onde a energia total é menor que a energia potencial, o que é proibido classicamente.

O segundo grupo contém as relações entre a mecânica quântica e a mecânica clássica enquanto estruturas lógico-matemáticas. O primeiro resultado deste tipo foi obtido por Dirac, sendo porém limitado à região de altos números quânticos, e em seguida estendido postulacionalmente ao mundo quântico em geral. O esforço dispendido na proposição e estudo de regras de quantização é uma continuação de seu trabalho, e aponta a existência de certas relações entre grandezas da teoria quântica iguais àsquelas entre as grandezas clássicas correspondentes.

O ponto alto dessas tentativas inicia-se no trabalho de Prosser, Uihorn e outros, que mostraram a existência de uma estrutura comum às duas teorias, e servem de ponto de partida para o argumento de Bruer. Este, por sua vez, constrói uma relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica na qual, tomando-se o limite em que $\hbar$ é igual a zero, a primeira delas transforma-se na segunda. Este resultado tem dois aspectos distintos, com os quais Bruer tenta satisfazer as duas condições não-formais sobre uma redução propostas por Glymour, e que foram analisadas na última seção.

Bruer nota inicialmente que na mecânica clássica não é possível obter as leis de conservação de momento angular e linear a partir da segunda lei de Newton e da suposição de invariância sob a ação do grupo de Galileu, e que mesmo com estas leis não se obtém a conservação de energia. Na mecânica quântica, por outro lado, essas leis se seguem diretamente da lei cinemática e da suposição de invariância sob o grupo de Galileu. De acordo

com essa lei (eq. 22, seq. 3.5) a evolução temporal do valor médio de um observável quântico $\tilde{A}$ que não depende explicitamente do tempo é dada em um estado $\psi(q)$ por

$$\frac{d}{dt} \langle \tilde{A} \rangle = -\frac{i}{\hbar} \int \psi^*(q) (\tilde{A}\tilde{H} - \tilde{H}\tilde{A}) \psi(q) dq, \quad (1)$$

onde $\tilde{H}$ é o hamiltoniano quântico. Se $\tilde{A}$ comuta com o hamiltoniano, seu valor médio não varia com o tempo e a grandeza correspondente é uma constante de movimento, i.e., uma quantidade conservada. Se $\tilde{A}$ é um gerador do grupo de Galileu, e.g. o momento $\tilde{p}$, então a suposição de invariância implica que

$$\tilde{p}\tilde{H}\psi = \tilde{H}\tilde{p}\psi; \quad (2)$$

logo $\tilde{p}$ comuta com $\tilde{H}$, e o momento linear é uma grandeza conservada; o mesmo vale para o momento angular e a energia.

Consideremos agora a relação obtida por Bruer no limite em que $\hbar$ tende a zero (eq. II, seq. 3.5)

$$W \frac{i}{\hbar} (\tilde{A}\tilde{H} - \tilde{H}\tilde{A}) = \{A, H\}, \quad (3)$$

onde A e H são as grandezas clássicas correspondentes a $\tilde{A}$ e $\tilde{H}$, respectivamente;. A equação 3 mostra então que se $\tilde{A}$ comuta com $\tilde{H}$, i.e. se $\tilde{A}$ é uma grandeza conservada, então neste limite o parêntesis de Poisson das variáveis clássicas A e H é nulo, o que quer dizer que A também é uma grandeza conservada. Assim as leis de conservação da mecânica clássica aparecem como consequências das leis de conservação quânticas. Segundo Bruer, este resultado implica uma unificação, pelo critério de Glymour, no sentido de permitir uma economia postulacional, visto que bastam a lei cinemática e a invariância de Galileu para obter as leis de conservação tanto quânticas quanto clássicas.

Como já dissemos na seção anterior, o caráter unificador de certas reduções deve ser considerado mais como uma

justificativa para a escolha de uma nova teoria — sendo portanto desejável — do que uma condição necessária à redução. O resultado extra da prova de Bruer, ligando as leis de conservação quânticas e clássicas, acrescenta algo a esta prova, sem contudo melhorá-la substancialmente: dada a idealização necessária ($\hbar=0$) ela serve para mostrar uma relação entre formulações abstratas das duas teorias, mas não ajuda em sua interpretação, nem na determinação de seus domínios.

Bruer concorda com nosso primeiro ponto, e cita para isso os resultados de Kochen e Specker(1967). Uma das propostas para a solução do problema interpretacional da mecânica quântica supõe a existência de 'variáveis ocultas', que não aparecem no formalismo atual da teoria, e com o auxílio das quais seria possível determinar o valor de todos os observáveis de um sistema quântico simultaneamente (cf. Redhead(1987), seq. 2.1). Estas variáveis teriam então uma álgebra comutativa semelhante à álgebra clássica $\mathcal{A}_C$ dos observáveis da mecânica clássica. A prova de Kochen e Specker consiste em mostrar que é impossível construir um homomorfismo w que leve os observáveis quânticos $\tilde{A}$ em observáveis clássicos 'ocultos' $A(w)$ de tal forma que, para um estado com matriz densidade $\tilde{\rho}$

$$\text{Tr}(\tilde{\rho}\tilde{A}) = \int \rho(w)A(w) dw, \quad (a)$$

$$\text{Se } w(\tilde{A}) = A, \text{ então } w(f(\tilde{A})) = f(A) \text{ e} \quad (b)$$

$$\text{se } w(\tilde{A}) = A \text{ e } w(\tilde{B}) = B, \text{ então } w(\tilde{A} + \tilde{B}) = A + B. \quad (c)$$

A condição (a) expressa o fato de que na nova teoria os valores médios são calculados como na mecânica clássica; (b) exige a conservação, sob a ação de w , da estrutura algébrica dos observáveis quânticos, e (c) exprime a aditividade dos valores médios, necessária à preservação das previsões da mecânica

quântica (cf. Bruer(1982), pp. 204-205).

A razão pela qual o homomorfismo construído por Bruer não viola este resultado é que ele só é possível no limite em que $\hbar$ é igual a zero. Isto implica a desconsideração dos efeitos quânticos devidos à não-comutatividade dos operadores de $\mathcal{A}_Q$, tornando impossível a recuperação dos resultados da teoria⁴.

No que diz respeito à delimitação dos domínios das duas teorias, Bruer considera a função 'clássica' $\rho(q,p)$ construída por ele para a obtenção de uma função delta no limite clássico (eq.25, seq.3.5), observando que seu valor máximo é

$$\rho(q_c, p_c) = \sqrt{2/\pi\hbar} . \quad (4)$$

Segundo ele, isto é verdadeiro para todo estado quântico puro; se supusermos agora que a mecânica clássica é válida em situações distantes de um estado quântico puro, esta condição é facilmente escrita como

$$\text{Max}[\rho(q,p)] \lll 1/\hbar . \quad (5)$$

Esta condição determina o limite de aplicabilidade da mecânica clássica, no qual os efeitos quânticos não poderiam ser observados. De acordo com Bruer((1982), p. 197)

"Classical mechanics fails as a universal theory because Planck's constant is not equal to zero and because precise measurements are possible...However, under observation with low resolution, classical theory would appear to be correct, it would still appear to work for macroscopic systems."

Bruer incorre dessa forma no mesmo erro de Hill e

⁴Note-se contudo que o teorema acima de Kochen e Specker não se aplica a teorias de variáveis ocultas contextuais. A esse respeito veja-se Shimony(1984).

outros, ao identificar o domínio clássico com as situações onde a precisão de uma medida é muito menor que os limites impostos pelas relações de Heisenberg. Ele esquece que, em princípio, a mecânica quântica deveria ser aplicável a qualquer sistema físico, o que implica a possibilidade de existirem casos de superposições de estados macroscopicamente distinguíveis, incompatíveis com a mecânica clássica, e que satisfazem as relações de Heisenberg. Seus resultados, portanto, além das conexões já citadas, não são capazes de resolver o problema da interpretação da teoria quântica, nem da determinação do domínio clássico.

Por outro lado, a dedução das leis de conservação clássicas com o auxílio da transformação de Wigner mostra que é possível existir uma redução ao mesmo tempo transformatória e que proporciona economia postulacional, i.e., consolidatória. A distinção entre t-redução e c-redução não é portanto uma dicotomia, como pensava Nickles. Ele poderia negar a validade do resultado de Bruer, pois este exige a variação de uma constante, $\hbar$, o que não pode ser identificado com uma situação física. Devemos notar, contudo, que esta redução diz respeito às estruturas matemáticas das duas teorias, e não à recuperação de dados experimentais clássicos pela mecânica quântica. Este caráter abstrato, se por um lado apóia a idéia de redução de Bruer, por outro lado impede sua extensão ao nível factual, como pudemos ver na crítica feita acima.

Estas considerações encerram nossa análise da relação entre a mecânica quântica e a mecânica clássica. Algumas das relações estudadas constituem de fato casos de redução parcial em que se pode aplicar a mecânica clássica a certos sistemas físicos obtendo-se resultados iguais às predições feitas pela

mecânica quântica para os mesmos sistemas. Em outros casos a relação supostamente existente não implicava uma redução entre as duas teorias. Em particular, o resultado de Bruer, apesar de relacionar ambas de forma redutiva, não serve para demonstrar a recuperação dos resultados clássicos pela teoria quântica, isto é, não estabelece uma redução ao nível factual.

Este resultado negativo mostra afinal um dos aspectos positivos do raciocínio reducionista na ciência: a inexistência de uma recuperação global dos resultados clássicos pela mecânica quântica reflete-se em seus problemas interpretacionais, mostrando claramente a necessidade de uma nova teoria que unifique de forma completa os domínios quântico e clássico.

APENDICES

I - GLOSSÁRIO

Apresentamos neste apêndice uma definição sucinta de alguns termos técnicos usados neste trabalho, especialmente no capítulo 3. Para maiores detalhes veja-se Hoffman e Kunze(1971), Wybourne(1974) e Humphreys(1980).

GRUPO : Seja um conjunto G , e sejam x, y e z elementos de G . O conjunto G é um grupo se existe uma operação M que associa a cada par de elementos $(x, y) \in G \times G$ um terceiro elemento $xy \in G$ tal que

- $(xy)z = x(yz), \forall x, y, z \in G$ (associatividade)
- $\exists I \in G$ tal que $Ix = xI = x, \forall x \in G$ (elemento identidade)
- Para cada $x \in G$ existe um $x^{-1} \in G$ tal que $xx^{-1} = x^{-1}x = I$ (inverso).

Se além disso, $xy = yx \forall x, y \in G$, então G é um grupo comutativo.

ANEL : Seja um conjunto K munido de duas operações,

$$(x, y) \Rightarrow x + y \text{ (adição)}$$

$$\text{e } (x, y) \Rightarrow xy \text{ (multiplicação), tais que:}$$

- (1) K é um grupo comutativo em relação à adição;
- (2) A multiplicação é associativa, $(xy)z = x(yz)$;
- (3) Valem as leis distributivas da adição e da multiplicação,

$$x(y + z) = xy + xz$$

$$(y + z)x = yx + zx$$

Se $xy = yx, \forall x, y \in K$, então K é um anel comutativo. Se existir um elemento I em K tal que $Ix = xI = x, \forall x \in K$, então K é um anel com elemento unidade. Vimos no capítulo 3 dois exemplos de anéis: o anel comutativo das funções de fase clássicas e o anel não-comutativo dos operadores quânticos.

ÁLGEBRA DE LIE : Uma álgebra de Lie consiste de um espaço vetorial L dotado de uma operação [...], o produto de Lie, que associa a cada par ordenado $(x,y) \in L \times L$ um elemento $[x,y] \in L$, e que possui as seguintes propriedades:

(L1) - O produto de Lie é bilinear, i.e.

$$[ax+by, cz+dt] = a[b[x,z] + c[x,t]] + b[a[y,z] + d[y,t]] ,$$

$$x,y,z,t \in L, \quad a,b \text{ escalares}$$

(L2) - $[x,x] = 0, \quad \forall x \in L,$

(L3) - $[x,[y,z]] + [y,[z,x]] + [z,[x,y]] = 0.$

Das propriedades L1-L3 é possível mostrar que $[x,y] = -[y,x]$. A propriedade L3 é a identidade de Jacobi, mencionada na seção 2.2 e no capítulo 3.

ISOMORFISMO : Um isomorfismo entre duas álgebras de Lie L e L' é uma transformação linear $f:L \rightarrow L'$ com as propriedades

(a) $f([x,y]) = [f(x), f(y)], \quad \forall x,y \in L,$

(b) $f(x) = 0$ se e somente se $x = 0,$

(c) $f(L) = L',$ a imagem de L sob a transformação f cobre toda a álgebra $L'.$

A transformação f associa portanto somente um elemento de L' a cada elemento de L , e cobre todo o espaço vetorial de $L'.$ Quando f satisfaz somente a propriedade (a), f é um homomorfismo, i.e., uma relação muitos-para-um. A primeira e a segunda propriedades definem um monomorfismo, a primeira e a terceira um epimorfismo.

IDEAL : Seja um subespaço vetorial I de uma álgebra de Lie $L.$ I é um ideal de L se $[x,y] \in I, \quad \forall x \in I, \quad \forall y \in L ;$ este fato se escreve também como $[I,L] \in I.$

Dado um ideal I podemos construir uma álgebra

quociente L/I , associando a cada elemento $x \in L/I$ uma classe de equivalência Q de L

$$Q(x) = x + I \quad ;$$

a equação acima indica que ao elemento $x \in L/I$ estão associados todos os elementos $x + z$, $\forall z \in I$. Além disso,

$$\begin{aligned} [x+I, y+I] &= [x, y] + [x, I] + [I, y] + [I, I] \\ &= [x, y] + I. \end{aligned}$$

Os elementos de L correspondentes ao elemento nulo de L/I serão então

$$Q(0) = 0 + I = I$$

isto é, o ideal I é levado por Q no elemento 0 de L/I .

II - A PROVA DE BRUER

Apresentamos aqui a demonstração das três proposições de Bruer(1982) mostradas na última parte do cap. 3.

Sejam $\tilde{\rho}$ e $\tilde{\sigma}$ duas matrizes densidade quânticas, e ρ e σ duas densidades de probabilidade no plano de fase clássico. A transformada de Fourier de $\rho[(q'+q'')/2, p]$ com respeito ao seu segundo argumento será escrita como $\hat{\rho}$; $\hat{\rho}_k$ indica a primeira derivada de $\hat{\rho}$ com respeito ao seu k-ésimo termo, e W indica a transformação de Wigner. Os teoremas mostrados por Bruer((1982), pp.185-189) são:

$$(I) \quad \tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') = W^{-1}\rho\sigma(q, p) + O(\hbar)$$

Prova: Pela definição da transformação de Wigner

$$\begin{aligned} W^{-1}\rho(q, p) &= \tilde{\rho}(q', q'') = \int dp e^{(i/\hbar)p(q'-q'')} \rho[(q'+q'')/2, p] \\ &= \hat{\rho}[(q'+q'')/2, (q'-q'')/\hbar] \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} W^{-1}\sigma(q, p) &= \tilde{\sigma}(q', q'') = \int dp e^{(i/\hbar)p(q'-q'')} \sigma[(q'+q'')/2, p] \\ &= \hat{\sigma}[(q'+q'')/2, (q'-q'')/\hbar] \end{aligned} \quad (2)$$

O produto das matrizes densidade é

$$\tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') = \int dy \tilde{\rho}(q', y) \tilde{\sigma}(y, q'') \quad (3)$$

Seja $q''=y$ na equação 1 e $q'=y$ na equação 2. Então

$$\tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') = \int dy \hat{\rho}[(q'+y)/2, (q'-y)/\hbar] \hat{\sigma}[(y+q'')/2, (y-q'')/\hbar]. \quad (4)$$

Somando e subtraindo $q''/2$ no primeiro argumento de ρ , e somando e subtraindo $q'/2$ no segundo argumento de σ , na eq. 4, obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') &= \int dy \hat{\rho}\left[\frac{q'+q''}{2} + \frac{y-q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar}\right] \hat{\sigma}\left[\frac{q'+q''}{2} + \frac{y-q'}{2}, \frac{y-q''}{\hbar}\right] \\ &= \int dy \hat{\rho}\left[\frac{q'+q''}{2} + \frac{\hbar(y-q'')}{2\hbar}, \frac{q'-y}{\hbar}\right] \hat{\sigma}\left[\frac{q'+q''}{2} + \frac{\hbar(y-q')}{2\hbar}, \frac{y-q''}{\hbar}\right]. \end{aligned} \quad (5)$$

Expandindo a integral em (5) em séries de potência de $\hbar$ obtemos:

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') &= \int dy \left\{ \hat{\rho}\left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar}\right] + \right. \\ &+ \frac{\hbar(y-q'')}{2\hbar} \hat{\rho}_1\left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar}\right] \hat{\sigma}\left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar}\right] + \end{aligned}$$

$$+ \frac{\hbar(y-q')}{2\hbar} \hat{\sigma}_1 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] \} + O(\hbar^2). \quad (6)$$

Multiplicando e recombinaando termos temos

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') &= \int dy \hat{\rho} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar} \right] \hat{\sigma} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] + \\ &+ \frac{\hbar}{2} \int dy \left\{ \hat{\rho}_1 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar} \right] * \frac{(y-q'')}{\hbar} \hat{\sigma} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] - \right. \\ &- \left. \frac{(q'-y)}{\hbar} \hat{\rho} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar} \right] \hat{\sigma}_1 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] \right\} + O(\hbar^2). \quad (7) \end{aligned}$$

Em ambas as integrais acima $(q'+q'')/2$ aparece apenas como um parâmetro. A primeira delas é uma convolução, e pelo teorema da convolução (e.g. Colwell e Mathews(1973), p. 111)) a transformada de Fourier do produto de duas funções é igual à convolução da transformada de Fourier. A primeira integral em (7) se torna então

$$\begin{aligned} \int dy \hat{\rho} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar} \right] \hat{\sigma} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] &= \\ = \rho * \sigma \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-q''}{\hbar} \right] &= W^{-1} \rho \alpha(q, p). \quad (8) \end{aligned}$$

Também como resultado da análise de Fourier, se $\hat{f}(e)$ é a transformada de Fourier de $\tilde{f}(x)$, então $e\hat{f}(e)$ é a transformada de Fourier de $(id/dx)\tilde{f}(x)$. Esta relação e o teorema da convolução permitem expressar a segunda integral em (7) como

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2} \int dy \left\{ \hat{\rho}_1 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar} \right] * \frac{(y-q'')}{\hbar} \hat{\sigma} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] - \right. \\ \left. - \frac{(q'-y)}{\hbar} \hat{\rho} \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-y}{\hbar} \right] \hat{\sigma}_1 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{y-q''}{\hbar} \right] \right\} = \\ = \frac{\hbar}{2} \left\{ \rho_1 * i\sigma_2 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-q''}{\hbar} \right] - i\rho_2 * \sigma_1 \left[\frac{q'+q''}{2}, \frac{q'-q''}{\hbar} \right] \right\} \\ = (i\hbar/2) W^{-1} [\rho_1 * \sigma_2(q, p) - \rho_2 * \sigma_1(q, p)] \\ = \frac{i\hbar}{2} W^{-1} \left[\frac{\partial}{\partial q} \rho(q, p) \frac{\partial}{\partial p} \alpha(q, p) - \frac{\partial}{\partial p} \rho(q, p) \frac{\partial}{\partial q} \alpha(q, p) \right]. \quad (9) \end{aligned}$$

Logo, combinando as equações 8 e 9 temos ($\{\}$ indica o parêntesis de Poisson)

$$\tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q', q'') = W^{-1} \rho \alpha(q, p) + (i\hbar/2) W^{-1} \{\rho(q, p), \alpha(q, p)\} + O(\hbar^2) \quad (10)$$

Nesta equação, quando $\hbar$ tende a zero temos

$$\tilde{\rho}\tilde{\sigma}(q',q'') = W^{-1}\rho\sigma(q,p) \quad (11)$$

NO limite $\hbar = 0$, sob a ação da transformação de Wigner, o produto não-comutativo do espaço de operadores quânticos transforma-se no produto comutativo do espaço de funções clássicas. Os resultados para comutadores e anticomutadores são corolários do teorema I.

$$(ii) \quad (-i/\hbar)[\tilde{\rho}\tilde{\sigma}-\tilde{\sigma}\tilde{\rho}] = W^{-1}\{\rho,\sigma\} + O(\hbar^2)$$

PROVA : Usando a equação 10 em II temos

$$\begin{aligned} (-i/\hbar)[\tilde{\rho}\tilde{\sigma}-\tilde{\sigma}\tilde{\rho}] &= (-i/\hbar)W^{-1}\rho\sigma - (i/\hbar)[i\hbar/2]W^{-1}\{\rho,\sigma\} + \\ &+ (i/\hbar)W^{-1}\sigma\rho + (i/\hbar)[i\hbar/2]W^{-1}\{\sigma,\rho\} + O(\hbar^2) \\ &= (-i/\hbar)W^{-1}(\rho\sigma-\sigma\rho) + (1/2)W^{-1}\{\rho,\sigma\} - (1/2)W^{-1}\{\sigma,\rho\} + O(\hbar^2) \\ &= W^{-1}\{\rho,\sigma\} + O(\hbar^2) \end{aligned} \quad (12)$$

Assim, no limite em que $\hbar$ tende a zero o produto de Lie da álgebra quântica $\mathcal{L}_Q$ é levado pela transformação de Wigner no produto de Lie de $\mathcal{L}_C$.

$$(III) \quad \tilde{\rho}\tilde{\sigma} + \tilde{\sigma}\tilde{\rho} = 2W^{-1}\rho\sigma + O(\hbar^2)$$

PROVA : novamente, substituindo a eq. 10 em III

$$\begin{aligned} \tilde{\rho}\tilde{\sigma}+\tilde{\sigma}\tilde{\rho} &= W^{-1}(\rho\sigma+\sigma\rho) + (i\hbar/2)W^{-1}\{\rho,\sigma\} + (i\hbar/2)W^{-1}\{\sigma,\rho\} + O(\hbar^2) \\ \tilde{\rho}\tilde{\sigma}+\tilde{\sigma}\tilde{\rho} &= 2W^{-1}(\rho\sigma) + O(\hbar^2) \end{aligned} \quad (13)$$

Os anticomutadores quânticos são assim levados pela transformação de Wigner no dobro do produto das funções clássicas correspondentes. Estes são os três resultados de Bruer; para a discussão veja-se a seção 3.5.

REFERÊNCIAS

ABRAHAM, R.; MARSDEN, J.

(1978) - Foundations of Mechanics

Benjamin, segunda edição, 1978

Reading, Massachusetts, XXVII+806 pp. .

ARENS, R.; BABBIT, D.

(1965) - 'Algebraic Difficulties of Preserving Dynamical Relation
When Forming Quantum-Mechanical Operator'

Jnl. Mat. Phys. 6(1965), pp. 1071-1075.

BATES, D. R. (ed.)

(1961) - Quantum Theory - I. Elements

N.Y., Academic Press, 1961, pp. XV+447.

BOHR, N

(1913) - 'On the Constitution of Atoms and Molecules'

Philos. Magaz. 26, 1913, pp. 1-25, 476-502, 857-875

CW2, pp. 159-233.

(1918) - 'On the Quantum Theory of Line-Spectra'

in - Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab.

Skrifter. Naturvidenskabelig og Matematisk

Afdeling 8. Række, qIV.1 - København

CW3, pp. 67-184.

(1920a) - 'On the Series Spectra of the Elements'

in - The Theory of Spectra and Atomic Constitution

Cambridge Univ. Press, 1922, pp. 20-60

CW3, pp. 242-282.

orig. 'Über die Serienspektren der Elemente'

Zeits. F. Physik 2, 1920, p. 423.

REFERÊNCIAS

ABRAHAM, R.; MARSDEN, J.

(1978) - Foundations of Mechanics

Benjamin, segunda edição, 1978

Reading, Massachusetts, XXVIL+806 pp. .

ARENS, R.; BABBIT, D.

(1965) - 'Algebraic Difficulties of Preserving Dynamical Relation

When Forming Quantum-Mechanical Operator'

Jnl. Mat. Phys. 6(1965), pp. 1071-1075.

BATES, D. R. (ed.)

(1961) - Quantum Theory - I. Elements

N.Y., Academic Press, 1961, pp. XV+447.

BOHR, N

(1913) - 'On the Constitution of Atoms and Molecules'

Philos. Magaz. 26, 1913, pp. 1-25, 476-502, 857-875

CW2, pp. 159-233.

(1918) - 'On the Quantum Theory of Line-Spectra'

in - Det Kongelige Danske Videnskabernes Selskab.

Skrifter. Naturvidenskabelig og Matematisk

Afdeling 8. Raekke, qIV.1 - Kobenhavn

CW3, pp. 67-184.

(1920a) - 'On the Series Spectra of the Elements'

in - The Theory of Spectra and Atomic Constitution

Cambridge Univ. Press, 1922, pp. 20-60

CW3, pp. 242-282.

orig. 'Über die Serienspektren der Elemente'

Zeits. F. Physik 2, 1920, p. 423.

- (1920b) - Prefácio de The Theory of Spectra and Atomic Constitution
Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1922
Cit. Nielsen(1976), p. 21.
- (1924) - 'On the Application of the Quantum Theory to Atomic Systems - Part I - The Fundamental Postulates'
Proc. Cambridge Phil. Soc. (Supplement), 1924
CW3, pp. 458-499.
- (1934) - Atomic Theory and the Description of Nature
Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1961, pp. 119.
- (1935) - 'Can Quantum Mechanical Description of Physical Reality Be Considered Complete ?'
Phys. Rev. 48, S2, 1935, pp. 696-702
- (1937) - 'Causality and Complementarity'
Phil. Sci. 4, 1937, pp. 289-298
orig. em Erkenntniss 6, 1936, pp. 293-303.
- (1939) - 'The Causality Problem in Atomic Physics'
in New Theories in Physics,
cit. Folse(1985), n.25, p. 158.
- (1947) - 'Atomic Physics and International Cooperation'
Proc. Amer. Phil. Soc. 91, April, 1947
cit. Folse(1985), n.15, p. 14.
- (1948) - 'On the Notions of Causality and Complemetarity'
Dialectica 2, 1948.
- (1956) - 'Atoms and Human Knowledge - Nicola Tesla'
Niels Bohr Archive - Palestra feita em 1956 na Nicola Tesla Conference - cit. Folse(1985), n. 18, p. 16.
- (1958) - Atomic Physics and Human Knowledge
John Wiley & Sons, NY, 1958, vii+101 pp. .

- (1963) - Essays 1958-1962 on Atomic Physics and Human Knowledge
Interscience, NY, 1963, x+100 pp. .

BOLTZMANN, L.

- (1866) - 'Über die mechanische Bedeutung des zweiten Hauptsatzes der Wärmetheorie'
Wiener Berichte 53, 1866, pp. 195-220
cit. Jammer(1966), n. 36, p. 96.
- (1871) - 'Analytischer Beweiss des zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie aus den Sätzen über das Gleichgewicht der lebendigen Kraft'
Wiener Berichte 63, 1871, pp. 712-732
cit. Jammer(1966), n. 36, p. 96.

BORN, M.

- (1924) - 'Über Quantenmechanik'
Zeit. F. Physik 26, 1924, pp. 379-395
Trad inglesa 'Quantum Mechanics'
in v. d. Waerden(1967), pp. 181-198.

BORN, M.; JORDAN, P.

- (1925) - 'Zur Quantenmechanik'
Zeit. F. Physik 34, 1925, pp. 858-888
Trad inglesa 'On Quantum Mechanics'
in v. d. Waerden(1967), pp. 277-306

BRILLOUIN, L.

- (1926) -
Comptes Rendus 183, 1926, p. 24
cit. Jeffreys(1961), n. 8, p. 229.

BROWN, L. S.

- (1972) - 'Classical Limit and the WKB Approximation'
Am. Jnl. Phys. 40, 1972, pp. 371.

- (1973) - 'Classical Limit of the Hydrogen Atom'
Am. Jnl. Phys. 41, 4, 1973, pp. 525-530

BRUER, J. T.

- (1982) - 'The Classical Limit of Quantum Theory'
Synthese 50(1982) pp. 167-212

BURGERS, M.; JORDAN, P.

- (1917) - 'Die adiabatischen Invarianten bedingt periodischer
Systems'
Ann. Physik 52, 1917, p.195
cit. Klein(1970), n.46, p.290

CABRERA, C. G.; KIWI, M.

- (1987) - 'Large quantum number states and the Correspondence
Principle'
Phys. Rev. A 36, 6, 1987, pp. 2995-2998

CHEN, R. L. W.; RHODES, M. B.

- (1984) - 'Correspondence Principle Demonstrated'
Am. Jnl. Phys. 52, 11, 1984, pp. 988-992

CHERNOFF, P.

- (1981) - 'Mathematical Obstruction to Quantization'
Hadronic Journal 4(1981), pp. 879-888

CHERRY, T. M.

- (1950) -
Trans. Am. Math. Soc. 68, 1950, p. 224
cit. Jeffreys(1961), n. 10, p. 249.

CLAUSIUS, R.

- (1871a) - 'Über die zurückführung des zweiten Hauptsatzes der mechanischen Wärmetheorie auf allgemeine mechanistische Principien'

Poggendorff's Ann. der Physik 142, 1871, pp. 433-461

cit. Jammer(1966), n. 38, p. 96

- (1871b) - 'On the reduction of the Second Axiom of the Mechanical Theory of Heat to General Mechanical Principles'

Philos. Magazine 42, 1871, pp. 161-181

cit. Jammer(1966), n.38, p. 96.

COHEN-TANNOUDJI, C.; DIU, B.; LALOE, F.

- (1977) - Quantum Mechanics

Hermann, John Wiley & Sons, Paris, 1977,

pp. XV+1520(2 volumes).

COLODNY, R. (ed.)

- (1965) - Beyond the Edge of Certainty

Englewood Cliffs, N.J., 1965.

COLWELL, P.; MATHEWS, J. C.

- (1973) - Introduction Complexe Variables

Bell & Howell Company, 1973

Trad. brasileira Introdução às Variáveis Complexas

Edgard-Blucher/Edusp, SP, 1976, pp. 174.

CUFARO-PETRONI, M.; DEWDNEY, C.; HOLLAND, P.; KYPRANIDIS, T.;VIGIER, J. P.

- (1964) - 'Elimination of Negative Probabilities within the Causal Stochastic Interpretation of Qunatum Mechanics'

Phys. Letters 106A, 1984, pp. 368-370.

DIRAC, P. A. M.

- (1926a) - 'The Fundamental equations of Quantum Mechanics'
 Proc. Royal Soc. A109, 1926, pp. 642-653
 in v.d. Waerden(1967), pp. 307-320
- (1977) - 'Recollections of an Exciting Era'
 in Proc. Intern. School Phys. Enrico Fermi: History
 of XXth Century Physics
 (ed.) C. Wiener, Academic Press, 1977

EHRENFEST, P.

- (1913) - 'Een mechanische theorema van Boltzmann en zijne
 betrekking tot de quanta theorie'
 Verslag van de Gewoge Vergaderingen der Wis-en
 Natuurkundig Afdeeling, Amsterdam, 22, 1913, pp. 586-593
 cit. Jammer(1966), n. 50, p. 99
- (1914a) - 'A Mechanical Theorem of Boltzmann and its Relation to
 Theory of Energy Quanta'
 Proc. of the Amsterdam Academy 16, 1914, pp. 591-597
 in Klein(1959), pp. 340-346
 cit. Jammer(1986), n. 50, p. 99; Klein(1970), n. 9,
 p. 270, cita o mesmo local, mas com data de 1913
- (1914b) - 'Zum Boltzmannschen Entropie- Wahrscheinlichkeits-
 Theorem'
 Phys. Z. 15, 1914, p. 657
 in Klein(1959), p. 347; cit. Klein(1970), n. 25, p. 279
- (1916a) - 'Adiabatische Invarianten und Quantentheorie'
 Ann. Physik 51, 1916, p. 327
 cit. Klein(1970), n. 41, p. 286

- (1916b) - 'On Adiabatic Changes of a System in Connection with the Quantum Theory'
Proc. Acad. Amsterdam 19, 1916, p. 576
- (1917) - 'Adiabatic Invariants and the Theory of Quanta'
Phil. Magazine 33, 1917, pp. 500-513, 66
in Klein(1959), pp. 378-399 ;
cit. Jammer(1966), n. 51, p. 99
- (1923) - 'Adiabatische Transformationen in der Quantentheorie und ihre Behandlung durch Niels Bohr'
Die Naturwissenschaften 11, 1923, pp. 543-550
in Klein(1959), pp. 463-470
cit. Jammer(1966), n. 46, p. 98
- (1927) - 'Bemerkung über die angenäherte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik'
Zeit. für Physik 45, 1927, pp. 455-457.

EINSTEIN, A.

- (1914) - 'Beiträge zur Quantentheorie'
Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 16, 1914, pp. 820-828
cit. Jammer(1966), n. 49, p. 99
- (1916a) - 'Zur Quantentheorie des Strahlung'
Mitteilungen der Physikalischen Gesellschaft,
Zurich, 18, 1916, pp. 47-62
cit. Jammer(1966), n. 100, p. 112
- (1916b) - 'Strahlungsemission und -absorption nach der quantentheorie'
Verhandlungen der Deutschen Physikalischen Gesellschaft 18, 1916, pp. 318-323
cit. Jammer(1966), n. 100, p. 112

EINSTEIN, A.; PODOLSKY, B.; ROSEN, N.

- (1935) - 'Can Quantum Mechanical Description of Physical Reality
Be considered Complete ?'

Phys. Review 47, S2, 1935, pp. 777-780

EPSTEIN, P. S.

- (1916a) - 'Zur Theorie des Starkeffektes'

Ann. Physik 50, 1916, pp. 489-520

cit. Jammer(1966), n. 62, p. 103

- (1916b) - 'Zur Quantentheorie'

Ann. Physik 51, 1916, pp. 168-188

cit. Jammer(1966), n. 62, p. 103

- (1916c) - 'Zur Theorie des Starkeffekts'

Physikalische Zeitschrift 17, 1916, pp. 148-150

cit. Jammer(1966), n. 86, p. 108

FANO, U.

- (1957) - 'Description of States in Quantum Mechanics by Density
Matrix and Operator Techniques'

Rev. Mod. Phys. 29, 1, 1957, pp. 74-93.

FEIGL, H.; MAXWELL, G.

- (1962) - Minnesota Studies in the Philosophy of Science

Univ. of Minnesota Press, Minneapolis, 1962.

FEYERABAND, P. K.

- (1962) - 'Explanation, reduction and Empiricism'

cit. em Feigl e Maxwell(1962), p. 100.

- (1965) - 'Problem of Empiricism'

Colodny, 1965

cit. Nickles(1988), p. 34.

FOLSE, H. J.

- (1985) - The Philosophy of Niels Bohr: The Framework of

Complementarity

North-Holland, Amsterdam, 1985, pp. X+281

FRANKLIN, A.

(1986) - The Neglect of Experiment

Cambridge Univ. Press, Cambridge, 1966, pp. xii+290

FRIEDMAN, K.

(1982) - 'Is Intertheoretic Reduction Feasible'

Brit. Jnl. Phil. Sci. 33, 1982, pp. 17-40.

FURRY, W. H.

(1947) - 'Two Notes on Phase-Integral Methods'

Phys. Rev. 71, 1947, pp. 360-371.

GLYMOUR, C.

(1970) - 'On Some Patterns of Reduction'

Phil. Sci. 37, 1970, pp. 340-353

GROENEWOLD, H. J.

(1946) - 'On the Principles of Elementary Quantum Mechanics'

Physics 14, 1946, pp. 405-460.

GUÉRET, P. A.; HOLLAND, P. R.; KYPRIMIDIS, A.; VIGIER, J. P.

(1985) - 'Positive Energy/Positive Probability Density

Association in Second-Order Fermion Theories'

Physics Letters 107A, 1985, pp. 379-382.

HILL, E. L.

(1966) - 'Classical Mechanics as a Limiting Form of Quantum Mechanics'

in 'Mind, Matter and Method. Essays in Honor of Herbert Feigl'

(ed.) P. K. Feyerabend, G. Maxwell; Univ. of Minnesota Press, 1966, pp. 430-448.

HILLERY, M.; O'CONNELL, R. F.; SCULLY, M. O.; WIGNER, E. P.

(1981) - 'Distribution Function in Physics : Fundamentals'

Physics Reports 106, 1984, pp. 121-167.

HEILBRON, J. L.

(1977) - 'Lectures on the History of Atomic Physics 1900-1922'

in Wiener(1977), pp. 40-108

HEISENBERG, W.

(1925) - 'Über quantentheoretische Umdeutung Kinematischer und mechanischer Beziehungen'

Zeit. Phtsik 33, 1925, pp. 879-893

Trad. ingl. 'Quantum Theoretical Re-interpretation of Kinematical and Dynamical Relations'

in v.d.Waerden(1967), pp. 261-276

HELMHOLTZ, H. VON

(1884a) - 'Principien der Statik monozyklischer Systeme'

Journal für die reine und angewandte Mathematik 97,

1884, pp. 112-140, 317-336

cit. Jammer(1966), n. 40, p. 97

(1884b) - 'Studien zur Statik monozyklischer Systeme'

Berliner Berichte 1884, pp. 159-177, 311-318,

755-789, 1197-1201

cit. Jammer(1966), n. 40, p. 97

HENDRY, J.

(1984) - The Creation of Quantum Mechanics and the

Bohr-Pauli Dialogue

Studies in the History of Modern Science - vol. 14 -

D. Reidel, Dordrecht, Holland, 1984, pp. XII+177

HERTZ, H.

(1894) - Principien der Mechanik in neuem Zusammenhang

dargestellt - Leipzig, 1894

the Principles of Mechanics presented in a New Form

Dover, NY, 1956

cit. Jammer(1966), n. 41, p. 97

HOFFMANN, K.; KUNZE, R.

(1971) - Algebra Linear

Ed. Polígono, SP, 1971, terceira impressão 1976, pp.
XII+354.

tit. orig. Linear Algebra, Prentice Hall, Englewoods
Cliffs, N. J., 1961.

HOLLAND, P. R.; KYPRIAMIDIS, A.; VIGIER, J. P.

(1985) - 'On the Association of Positive Probability Densities
with Positive Energies in the Causal Theory of Spin 1
Particles'

Physics Letters 107A, 1985, pp. 376-378.

(1987) - 'Trajectories and Causal Phase-Space Approach to
Relativistic Quantum Mechanics'

Found. Phys. 17, 1987, pp. 531-548.

HOLLAND, P. R.; KYPRIAMIDIS, A.; MARIC, Z.; VIGIER, J. P.

(1986) - 'Relativistic Generalization of the Wigner Function and
its interpretation in the Causal Stochastic Formulation
of Quantum Mechanics'

Physical Review A33, 1986, pp. 4380-4383

HOME, D.; SENGUPTA, S.

(1983) - 'Classical Limit of Quantum Mechanics'

Am. Jnl. Physics 51, 1983, pp. 265-267.

(1984) - 'Classical Limit of Quantum Mechanics: A Paradoxical
Example'

Nuovo Cimento 82B, 1984, pp. 214-223

HOYER, U. (ed.)

(1981) - Niels Bohr - Collected Works - vol. 2: Work on Atomic Physics (1912-1917)

North-Holland, Amsterdam, 1981.

HUMPHREYS, J. E.

(1980) - Introduction to Lie Algebras and Representation Theory

Springer-Verlag, NY, 1972, 3rd print. 1980, pp. xii+171

HUSIMI, K.

(1940) -

Proc. Phys. Math. Soc. Japan 22, 1940, p264

cit. O'Connell(1983), p. 87

ISHIWARA, J.

(1915) - 'Die Universelle Bedeutung des Wirkungsquantums'

Tokyo Sugaku Buturigakkawi 8, 1915, pp. 106-116

cit. Jammer(1966), n. 12, p. 92.

JAMMER, M.

(1966) - The Conceptual Development of Quantum Mechanics

McGraw Hill, NY, 1966, XII-+399 pp. .

JEFFREYS, B. S.

(1961) - 'The Asymptotic Approximation (AA) Method'

in Bates(1961), vol. I, pp. 229-249

JOSEPH, A.

(1970) - 'Derivations of Lie Brackets and Canonical Quantization'

Commun. Mathem. Phys. 17, 1970, pp. 210-232

KEMENY, J. G.; OPPENHEIM, P.

(1956) - 'On Reduction'

Philosophical Studies 7, 1956, p. 6

cit. Nickles(1988), n. 12, p. 27

KLEIN, M. J. (ed)

(1959) - Collected Scientific Papers - Paul Ehrenfest

North-Holland, Amsterdam; Interscience, NY, 1959

cit. Jammer(1966), n. 77, p.17.

KLEIN, M. J.

(1970) - Paul Ehrenfest - vol. 1: The Making of a Theoretical Physicist

North-Holland, Amsterdam, 1970, XVI+330 pp. .

KNESER, H.

(1921) - 'Untersuchungen zur Quantentheorie'

Mathematische Annalen 84, 1921, pp. 277-302.

KOCHEN, S.; SPECKER, E. P.

(1967) - 'The Problem of Hidden Variables in Quantum Mechanics'

Jnl. of Mathem and Mechanics 17, 1967, pp. 59-87

KRAMERS, H. A.; HEISENBERG, W.

(1925) - 'Über die Streuung von Strahlen durch Atome'

Zeits. F. Physik 31, 1925, pp. 681-708

Trad. inglesa 'On the Dispersion of Radiation by Atoms'
in v. d. Waerden (1967), pp. 223-252.

KRAMERS, H. A.

(1926)

Zeits. Phys. 39, 1926, p. 828

cit. Jeffreys(1961), n. 6, p. 229

KUHN, T. S.

- (1962) - The Structure of Scientific Revolutions
 Univ. Chicago Press, Chicago, 1962
 Trad. bras. 'A Estrutura das Revoluções Científicas'
 Ed. Perspectiva, S. Paulo, 2ª ed. 1978

LANDAU, L.; LIFSHITZ, E.

- (1978) - Curso de Física Teórica - vol. 1: Mecânica
 Editora Mir, Moscou, 1978, 248 pp. .

LANGER, R. E.

- (1937) - 'On the Connection Formulas and the Solutions of the
 Wave Equation'
 Phys. Rev. 51, 1937, pp. 669-676

LEAF, B.

- (1968) - 'Weyl Transformation and the Classical Limit of
 Quantum Mechanics'
 Jnl. Math. Phys. 9, 1968, pp. 65-72

MESSIAH, A.

- (1965) - Mécanique Quantique - Tome I
 Dunod, Paris, 1ª ed. 1959, 2ª tirage 1965, pp. XV+430

MORSE, P. M.; FESHBACH, H.

- (1953) - Methods of Theoretical Physics
 McGraw-Hill, NY, 1953, pp. 1092 e segs.

MÜCKENHEIM, W.

- (1986) - 'A Review of Extended Probabilities'
 Physics Reports 133, 6, 1986, pp. 337-401

NAGEL, E.

- (1961) - The Structure of Science
 Harcourt, NY, 1961
 Trad. Esp. La Estructura de la Ciencia

Ed. Paidós, Buenos Aires, 1978, pp. 543

NICKLES, T.

- (1972) - 'Heuristics and Justification in Scientific Research'
in Suppe(1977), pp. 571-589
- (1973) - 'Two Concepts of Intertheoretic Reduction'
Jnl. of Philosophy 70, 1973, pp. 181-201
- (1974) - 'Justification as Discoverability'
Philosophia Naturalis, Band 21, Heft 2-4, 1984, pp. 563-576
- (1974) - 'Methodology, Heuristics and Rationality'
in Pitt e Pera(1987), pp. 103-132
- (1988) - 'Reduction and Conceptual Change'
Preprint conseguido junto ao autor

NIELSEN, J. R.: (ed)(CW3)

- (1976) - Niels Bohr - Collected Works - vol. 3:
The Correspondence Principle (1918-1923)
North-Holland, Amsterdam, 1976

O'CONNEL, R. F.; WIGNER, E. P.

- (1981) - 'Quantum-Mechanical Distribution Functions: Conditions
for Uniqueness'
Physics Letters 83A, 1981, pp. 145-148

O'CONNEL, R. F.

- (1983) - 'The Wigner Distribution Function - 50th Birthday'
Found. of Physics 13, 1983, pp. 83-92

PARK, J. L.

- (1968) - 'Nature of Quantum States'
Amer. Jnl. Phys. 36, 1968, pp. 211-226

PARK, J. L.; MARGENAU, H.

- ~~(1968) - 'Simultaneous Measurability in Quantum Theory'~~
~~Intern. Jnl. Theor. Phys. 1, 1968, pp. 211-283~~

PATHRIA, R. K.

(1972) - Statistical Mechanics

Pergamon Press, NY, 1972, pp. xii+527

PAULI, W.

(1926) - 'Über das Wasserstoffspektrum vom Standpunkt der neuen Quantenmechanik'

Zeit. f. Physik 36, 1926, pp. 336-363

Trad. inglesa 'On the Hydrogen Spectrum from the Standpoint of the the New Quantum Mechanics'

in v. d. Waerden(1967), pp. 387-415.

(1979) - Wissenschaftlicher Briefwechsel mit Bohr, Einstein, Heisenberg u.a., Band 1: 1919-1929

Berlin, Heidelberg, New York

cit. Hendry(1984), p. 166.

PITT, J. C.; PERA, M. (EDS.)

(1987) - Rational Changes in Science

D. Reidel, 1987

PLANCK, M.

(1900) - 'Über eine Verbesserung der Wienschen Spektralgleichung'

Verhandlungen der Deutschen Physikalischen

Gesellschaft 2, 1900, pp. 202-204

cit. Jammer(1966), n. 82, p. 19.

(1906) - Vorlesungen über die Theorie der Wärmestrahlung

Barth, Leipzig, primeira edição 1906,

segunda edição 1913,

trad. inglesa Theory of Heat Radiation

Dover, NY, 1959

cit. Jammer(1966), n. 11, p. 5.

PLANCK, M.; DEBYE, P.; NERNST, W.; v. SMOLUCHOWSKY, M.;

SOMMERFELD, A.; LORENTZ, H. A.

(1914) - Vorträge über die Kinetische Theorie der Materie und der Elektrizität

B. G. Teubner, Leipzig, 1914

cit. Jammer(1966), n. 11, p. 273.

POPPER, K. R.

(1959) - The Logic of Scientific Discovery

Hutchinson & Co., London, 1959

Trad. Bras. A Lógica da Pesquisa Científica

Ed. Cultrix, S. Paulo, 1974, pp. 567

(1963) - Conjectures and Refutations

Routledge & Kegan Paul, 1963

Trad. Bras. Conjecturas e Refutações

Ed. Univ. Brasília, Brasília, 1972, pp. 449

POST, H. R.

(1971) - 'Correspondence, Invariance and Heuristics'

Stud. Hist. Phil. Sci. 2, 1971, pp. 213-355

PRICE, W. C.; CHISSICK, S. S. (EDS.)

(1977) - Uncertainty Principle and Foundations of Quantum Mechanics

John Wiley, Chichester, 1977, pp. 572

PROSSER, R. T.

(1966) - 'A New Formulation of Particle Mechanics'

Mem. Amer. Math. Soc. 61, 1966, pp. 1-57

RAYLEIGH, LORD (J. W. STRUT, 3rd BARON)

(1912)

Proc. Royal Soc. A86, 1912, p. 207

Scientific Papers 6, 71 - cit. Jeffreys(1961), n. 3, p. 229

REDHEAD, M.

(1987) - Incompleteness, Nonlocality and Realism

Clarendon Press, Oxford, 1987, pp. vii+191

SALMON, W. C.

(1984) - Scientific Explanation and the Causal

Structure of the World

Princeton Univ. Press, Princeton, 1984, pp. xiv+306

SCHAFFNER, K.

(1967) - 'Approaches to Reduction'

Phil. Sci. 34, 1967, pp. 137-147

SCHIFF, L. I.

(1955) - Quantum Mechanics

Mc Graw-Hill, NY, 1955, pp. xii+417

SCHWARZCHILD, K.

(1916) - 'Zur Quantenhypothese'

Berliner Berichte 1916, pp. 548-568

cit. Jammer(1966), n. 61, p. 103

SHAPER, D.

(1972) - 'Scientific Theories and Their Domains'

in Suppe(1977), pp. 518-565

SHEWELL, J. R.

(1959) - 'On the Formation of Quantum-Mechanical Operators'

Amer. Jnl. Phys. 27, 1959, pp. 16-21

SHIMONY, A.

- (1984) - 'Contextual Hidden Variables Theories and Bell's Inequalities'
 Brit. Jnl. Phil. Sci. 35, 1984, pp. 25-45

SKLAR, L.

- (1967) - 'Types of Intertheoretic Reduction'
 Brit. Jnl. Phil. Sci. 18, 1967, pp. 109-124
- (1973) - 'Statistical Explanation and Ergodic Theory'
 Phil. Sci. 40, 1973, pp. 109-124

SOMMERFELD, A.

- (1915a) - 'Zur Theorie der Balmerischen Serie'
 Münchener Berichte, 1915, pp. 425-458
 cit. Jammer(1966), n. 8, p. 91.
- (1915b) - 'Die Feinstruktur der wasserstoff- und wasserstoffähnlichen Linien'
 Münchener Berichte 1915, pp. 459-500
 cit. Jammer(1966), n. 8, p. 91.
- (1916a) - 'Zur Quantentheorie der Spektrallinien'
 Ann. d. Physik 51, pp. 1-94, 125-267, 1916
 cit. Jammer(1966), n.8, p. 91.
- (1916b) -
 Sitzunbsberichte der Königlich Preussischen Akademie
 der Wissenschaften zu Berlin, 1916, p. 131
 cit. Bohr(1918), p. 3; CW3, p. 69.
- (1916c) -
 Physikalische Zeitschrift 17, 1916, p. 491
 cit. Bohr(1918), p. 3; CW3, p. 69.

(1917) -

Sitzungsberichte der Königlich Preussischen Akademie
der Wissenschaften zu Berlin, 1917, p. 83
cit. Bohr(1918), p. 3; CW3, p. 69.

SOURIAU, J.-M.

(1969) - Structure des Systèmes Dynamiques

Dunod, Paris, 1969, pp. XXXII+414

STÄCKEL, P.

(1891) - 'Über die Integration der Hamilton-Jacobischen

Differentialgleichung mittels Separation der Variablen'
Habilitationsschrift, Halle, 1891

cit. Jammer(1966), n. 56, p. 102.

(1893a) - 'Über die Bewegung eines Punktes in einer n-fachen
Mannigfaltigkeit'

Mathematische Annalen 42, 1893, pp. 537-544

cit. Jammer(1966), n. 56, p. 102.

(1893b) - 'Über die Integration der Hamilton-Jacobischen

Differentialgleichung mittels der Separation der
Variablen'

Mathematische Annalen 42, 1893, pp. 545-563

cit. Jammer(1966), n. 56, p. 102.

(1893c) - 'Sur une Classe de Problèmes de Dynamique'

Comptes Rendus 116, 1893, pp. 485-487

cit. Jammer(1966), n. 56, p. 102.

(1895) - 'Sur l'Integration de l'Equation Différentielle
de Hamilton'

Comptes Rendus 121, 1895, pp. 489-492

cit. Jammer(1966), n. 56, p. 102.

(1901) - 'Über die Gestalt der Bahncurven bei einer Klasse

dynamischer Probleme'

Mathematische Annalen 54, 1901, pp. 86-90

cit. Jammer(1966), n. 56, p. 102.

STAUDE, O.

(1887) - 'Über eine Gattung doppelt reell periodischer
Funktionen zweier Veränderlicher'

Mathematische Annalen 29, 1887, pp. 468-485

cit. Jammer(1966), n. 55, p. 102.

SUDARSHAN, E. C. G.

(1962) - 'Structure of Dynamical Theories'

Lectures in Theoretical Physics - Brandeis Summer

Institute of 1961, Benjamin Inc., NY, 1962, pp. 143-199

cit. Prosser(1966), p. 57

SUPPE, F. (ed.)

(1977) - 'Afterword'

in The Structure of Scientific Theories

Univ. Illinois Press, Urbana, 1977, 2nd ed., pp. 615-730

ULHORN, U.

(1956) - 'On the Connection Between Transformations in Classical
Mechanics and Quantum Mechanics and the Phase Space
Representation of Quantum Mechanics'

Arkiv Für Fysik, band 11, nr4, 1956, pp. 87-100

VAN DER WAERDEN, B. L. (ed.)

(1967) - Sources of Quantum Mechanics

North-Holland, Amsterdam, 1967, xi+430 pp.

Trad. inglesa de artigos originais, com uma introdução
histórica de van der Waerden.

VAN HOVE, L.

(1951) - 'Sur certaines représentations d'un groupe infini de

transformations'

Proc. Roy. Acad. Sci. Belgium 26, 6, 1951, pp. 1-100

VAN VLECK, J. H.

(1928) - 'The Correspondence Principle in the Statistical Interpretation of Quantum Mechanics'

Proc. Natl. Acad. Sci. USA 14, 1928, pp. 178-188

VON NEUMANN, J.

(1932) - Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

Springer, Berlin, 1932

Trad. Ing. Mathematical Foundations of Quantum Mechanics

Princ. Univ. Press, 1955, pp. XII+445

WEINER, C. (ed.)

(1977) - Proceedings of the International School of Physics

'Enrico Fermi' - Course LVII. History of XXth Century Physics

Academic Press, Ny, London, 1977, 457+XII pp. .

WENTZEL, G.

(1926) -

Zeits. Physik 38, 1926, p. 518

cit. Jeffreys(1961), n. 7, p. 229

WEYL, H.

(1927) - 'Quantenmechanik und Gruppentheorie'

Zeits. Physik 46, 1927, pp. 1-46

WIGNER, E. P.

(1932) - 'On the Quantum Correction for Thermodynamic Equilibrium'

Phys. Review 40, S2, 1932, pp. 749-759

WILSON, W.

(1915) - 'The Quantum Theory of Radiation and Line Spectra'