



UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ  
CENTRO DE CIÊNCIAS  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
GRADUAÇÃO EM FÍSICA

KEN FELIPE PIRES AIKAWA

A EVOLUÇÃO DA MECÂNICA CLÁSSICA PARA MECÂNICA  
QUÂNTICA: UMA BREVE HISTÓRIA E CONSTRUÇÃO DA TEORIA  
DE SCHRÖDINGER

FORTALEZA

2016

KEN FELIPE PIRES AIKAWA

A EVOLUÇÃO DA MECÂNICA CLÁSSICA PARA MECÂNICA QUÂNTICA: UMA  
BREVE HISTÓRIA E CONSTRUÇÃO DA TEORIA DE SCHRÖDINGER

Monografia de Bacharelado apresentada à  
Coordenação da Graduação do Curso de  
Física, da Universidade Federal do Ceará,  
como requisito parcial para a obtenção do  
Título de Bacharel em Física.

Orientador: Prof. Dr. Geová Maciel de Alen-  
car Filho

FORTALEZA  
2016

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca do Curso de Física

- 
- A252e Aikawa, Ken Felipe Pires  
A evolução da mecânica clássica para mecânica quântica: uma breve história e construção da teoria de Schrödinger / Ken Felipe Pires Aikawa. – 2016.  
31 f. : il. algumas color.
- Monografia (Graduação em Física) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Departamento de Física, Curso de Bacharelado em Física, Fortaleza, 2016.  
Orientação: Prof. Dr. Geová Maciel de Alencar Filho.  
Inclui bibliografia.
1. Mecânica clássica. 2. Mecânica quântica. 3. Hamilton-Jacobi, equação de. 4. Schrödinger, equação de. 5. Aspectos históricos da Física. I. Alencar Filho, Geová Maciel de. II. Título.

KEN FELIPE PIRES AIKAWA

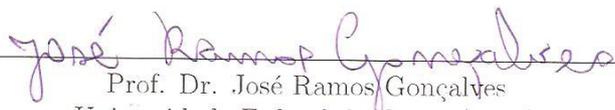
A EVOLUÇÃO DA MECÂNICA CLÁSSICA PARA MECÂNICA QUÂNTICA: UMA  
BREVE HISTÓRIA E CONSTRUÇÃO DA TEORIA DE SCHRÖNDINGER

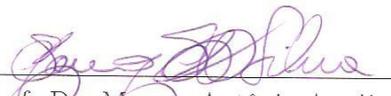
Monografia de Bacharelado apresentada à  
Coordenação da Graduação do Curso de  
Física, da Universidade Federal do Ceará,  
como requisito parcial para a obtenção do  
Título de Bacharel em Física.

Aprovada em 04/02/2016.

BANCA EXAMINADORA

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Geová Maciel de Alencar Filho (Orientador)  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. José Ramos Gonçalves  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Dr. Marcos Antônio Araújo Silva  
Universidade Federal do Ceará (UFC)

*A minha mãe e  
minha irmã*

## AGRADECIMENTOS

A minha mãe, Irlene, pelo apoio cotidiano - apesar da distância constante -, por acreditar no meu potencial, nos meus sonhos e por todo amor que só a figura maternal pode oferecer.

A minha irmã, Waleska, pelo apoio e cuidado constantes e por sempre estar presente em todos os momentos marcantes da minha vida, sendo indispensável nestes.

Ao Ubirajara, por ser uma pessoa que sempre esteve dando contribuições em situações importantes.

Ao meu amigo Bentivi, pela sua companhia, pelas discussões criativas e por ensinar-me meus primeiros passos de dança.

Aos meus amigos de turma: Raul, Emanuel, Nathan, Sofia, Pablo, Michel, Airton, Adaias, Felipe, Wendel, João Pedro, Pessoa, Misa, entre outros, por terem compartilhado momentos de felicidades e de tristezas ao longo de toda essa graduação.

A Hydra Walesca, por escutar minhas ideias e pelo apoio estrutural na apresentação deste trabalho.

Ao meu orientador, Geová, que sempre esteve presente e disposto a tirar qualquer dúvida e por me motivar a continuar no estudo da física teórica.

Aos meus professores responsáveis pela minha formação, em especial, José Ramos, Andrey Chaves, Renan Landim e Humberto Carmona.

A pessoas importantes como Rafaelle e Rebeca que fizeram parte das amizades que construí ao longo desses quatro anos em Fortaleza.

A todos meus ex-alunos do XII de maio que sempre serviram de motivação nessa dupla jornada discente-docente durante esses quatro anos.

Aos funcionários do Departamento de Física, em especial, Josa e Ana Lúcia.

## RESUMO

Apresenta-se uma breve história da construção de ideias acerca da mecânica quântica, enfatizando a evolução experimental e teórica as quais foram utilizadas nos trabalhos desenvolvidos por Erwin Schrödinger na elaboração de seu formalismo via teoria de Hamilton-Jacobi.

**Palavras-chave:** Mecânica. Clássica. Quântica. Hamilton-Jacobi. Schrödinger.

## ABSTRACT

A brief history of the construction of ideas about Quantum Mechanics is presented, emphasizing the experimental and theoretical evolution, which were used in the work developed by Erwin Schrödinger in the preparation of its formalism Hamilton-Jacobi theory.

**Keywords:** Mechanics. Classical. Quantum. Hamilton-Jacobi. Schrödinger.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Comparação do espectro real do corpo negro em diferentes temperaturas com a previsão teórica clássica. . . . .	12
Figura 2 – Dispositivo esquemático para a observação experimental do efeito fotoelétrico . . . . .	13
Figura 3 – Diagrama simplório sobre as ideias de De Broglie. . . . .	17
Figura 4 – superfícies de fase móveis $S=C$ . . . . .	24
Figura 5 – Diagrama de simetrias. . . . .	27

## SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO . . . . .	10
2	A VELHA MECÂNICA QUÂNTICA . . . . .	11
2.1	O modelo ondulatório para radiações eletromagnéticas . . . . .	11
2.2	O problema da radiação do corpo negro . . . . .	11
2.3	O efeito fotoelétrico . . . . .	12
2.4	A dualidade das ondas eletromagnéticas . . . . .	14
2.5	Elo entre as óticas . . . . .	14
2.6	O átomo de Bohr . . . . .	14
2.7	A regra de Wilson e Sommerfeld . . . . .	15
2.8	A dualidade para matéria . . . . .	16
2.9	Schrödinger e os artigos de 1926 . . . . .	17
3	FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DA TEORIA DE HAMILTON JACOBI . . . . .	18
3.1	Fundamentos básicos . . . . .	18
3.1.1	Lagrangiana, Hamiltoniana e momento canônico . . . . .	18
3.1.2	Princípio de Hamilton . . . . .	18
3.1.3	Equações de movimento . . . . .	19
3.2	Transformações canônicas . . . . .	19
3.3	A equação de Hamilton-Jacobi . . . . .	21
3.4	Relação entre a ação e a integral completa . . . . .	22
4	O FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER . . . . .	23
4.1	A analogia ótica-mecânica . . . . .	23
4.2	A equação de Schrödinger . . . . .	24
5	CONCLUSÃO . . . . .	28
	APÊNDICE A – SOLUÇÃO PARTICULAR DA EQUAÇÃO DE HAMILTON JACOBI . . . . .	29
	REFERÊNCIAS . . . . .	31

## 1 INTRODUÇÃO

Um desafio sempre presente da física consiste na busca da compreensão do Universo em sua pluralidade. Nesse contexto, destaca-se o universo subatômico que é descrito pela mecânica quântica. No entanto, durante o estudo de Física no ensino médio e no superior, a transição da Física Clássica para a Física Quântica nem sempre é feita de forma clara, gerando um certo questionamento sobre a parte estrutural da teoria.

Dessa forma, o presente trabalho tem como finalidade discutir como ocorreu a construção da Mecânica Quântica via formalismo de Schrödinger através de diversos estudos que ocorreram na conhecida velha mecânica quântica.

Pode-se considerar que o começo da Mecânica Quântica está relacionado com uma série de "problemas" que, no início do século passado, não apresentavam soluções consistentes quando somente os conceitos da Física Clássica eram considerados, período conhecido como velha mecânica quântica (1900-1925). Nessa época, a Física passava por uma grande revolução teórica. Podem-se citar inúmeros estudos que impactaram a ciência da época: corpo negro, efeito fotoelétrico, efeito Compton, dualidade onda-partícula, entre outros.

Na presente monografia, a priori, o foco será na descrição qualitativa dos problemas como corpo negro, efeito fotoelétrico, dualidade onda-partícula, átomo de Borh e analogia ótica-mecânica. Posteriormente, será dada uma breve incursão matemática na Mecânica Analítica, a fim de dar o embasamento teórico necessário à compreensão dos raciocínios que influenciaram as publicações monumentais de Schrödinger em 1926.

## 2 A VELHA MECÂNICA QUÂNTICA

### 2.1 O modelo ondulatório para radiações eletromagnéticas

Em torno de 1860, James Clerk Maxwell estabeleceu quatro equações que sintetizavam as ideias ligadas ao Eletromagnetismo. Através delas, é possível mostrar um fato interessante: a possibilidade da propagação conjunta de campos elétricos e magnéticos. Basicamente, um campo elétrico  $\vec{E}$  variável no tempo induz um campo magnético  $\vec{B}$  também variável no tempo e vice-versa.

Assim, a teoria previa que, se um ambiente fosse gerando  $\vec{E}$  e  $\vec{B}$ , ambos variáveis no tempo, um poderá sustentar a existência do outro e ocorrerá a propagação conjunta dos campos. Esse efeito descreve as ondas eletromagnéticas.

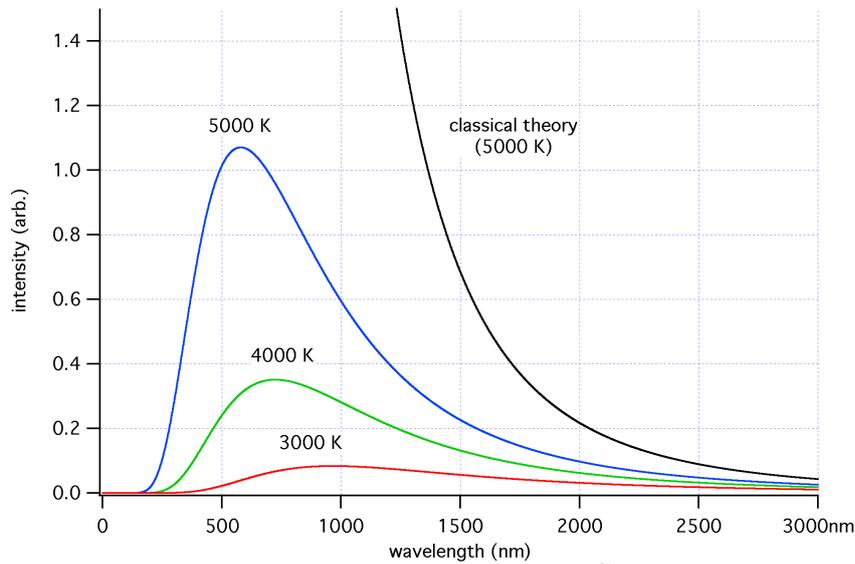
Tal comportamento acontece quando uma carga elétrica começa a vibrar em determinada frequência e emite uma onda eletromagnética de mesma frequência. Essa teoria do Eletromagnetismo clássico foi a primeira tentativa -frustrada- utilizada pela comunidade científica de explicar dois fenômenos importantes que são: a radiação do corpo negro e o efeito fotoelétrico.

### 2.2 O problema da radiação do corpo negro

Com os conceitos da Teoria Eletromagnética, era possível explicar satisfatoriamente a propagação das ondas eletromagnéticas, porém, a teoria falhava ao abordar a interação com a matéria. Segundo ela, a radiação térmica é emitida por cargas elétricas de um corpo oscilando em diversas frequências. Dessa maneira, a radiação é emitida num espectro contínuo. Assim, quando um corpo fosse aquecido, os seus constituintes (considerados osciladores harmônicos clássicos) emitiriam energia de forma contínua, isto é, a intensidade  $I = I(\nu)$  seria sempre crescente, tendendo para o infinito, em frequências muito altas (ou comprimentos de onda baixos). Veja a Figura 1:

Tal fato concordava com os experimentos apenas em baixas frequências e gerou uma grande discussão sobre tal fenômeno experimental. Para contornar o problema, o físico Max Planck, em Dezembro de 1900, apresentou a ideia de quanta de energia. A teoria considera que na superfície do corpo negro existem osciladores simples que só podem

Figura 1 – Comparação do espectro real do corpo negro em diferentes temperaturas com a previsão teórica clássica.



absorver determinados valores de energias dados por:

$$E = nh\nu \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (2.1)$$

onde  $n$  é um número inteiro ou também conhecido como quântico,  $h$  é a constante de Planck e  $\nu$  é a frequência do oscilador. Assim, a nova teoria confronta o modelo clássico, pois as energias dos osciladores são restritas para múltiplos inteiros de  $h\nu$ . Além disso, na teoria clássica, a energia não depende da frequência, mas sim da amplitude de oscilação. Com isso, Planck conseguiu resolver o problema do corpo negro. No entanto, Planck não acreditava que o quantum fosse algo real e pode-se afirmar que suas ideias constituíram mais um "ato de desespero" do que um formalismo concreto, crendo ele que tratava-se mais de uma hipótese puramente formal sem dar uma explicação teórica concreta.

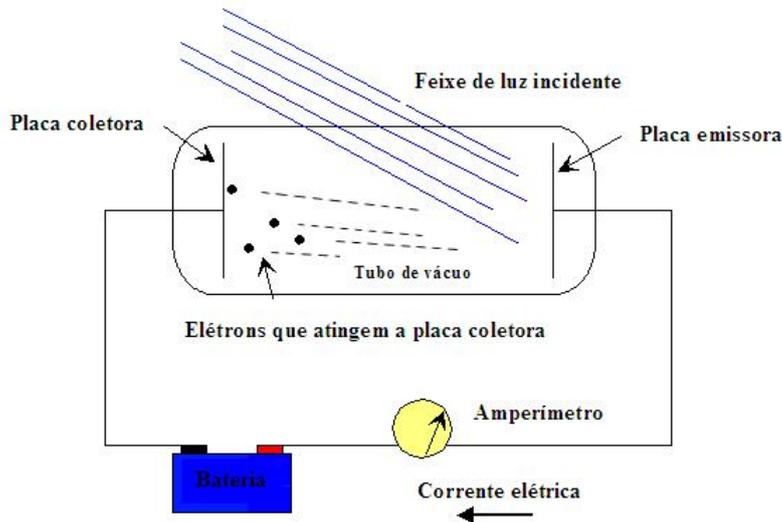
Assim, com o problema do corpo negro, iniciou-se uma série de indagações acerca da validade da Física Clássica na escala atômica. Para muitos, o presente problema é considerado o marco inicial da conhecida Velha Mecânica Quântica.

### 2.3 O efeito fotoelétrico

Outro problema experimental que gerou dificuldades para ser explicado com a Teoria Clássica foi o conhecido Efeito Fotoelétrico, observado inicialmente por Alexander Stoletov em 1872 e posteriormente por Henrich Hertz em 1887 [1]. Ele foi descrito da seguinte maneira: "Quando ondas eletromagnéticas incidem numa placa metálica, cargas

elétricas podem absorver energia suficiente para escapar dela”. A detecção do fenômeno pode ser feita com base no seguinte dispositivo experimental:

Figura 2 – Dispositivo esquemático para a observação experimental do efeito fotoelétrico



Fonte: disponível em [http://www.if.ufrgs.br/tex/fis142/fismod/mod03/m\\_s01.html](http://www.if.ufrgs.br/tex/fis142/fismod/mod03/m_s01.html). Acesso em jan.2016

Observaram-se as seguintes características dos fotoelétrons:

- A energia cinética dos fotoelétrons não dependia da intensidade da radiação, apesar de que, com o aumento da intensidade, mais fotoelétrons eram ejetados;
- Ao incidir radiações de baixa intensidade causadoras do efeito, o fenômeno tinha duração quase que instantânea;
- As energias dos fotoelétrons dependiam da frequência da radiação.

Com todas essas características, observou-se clara incompatibilidade com a Teoria Clássica, uma vez que ela previa que a energia da radiação era absorvida sempre de forma contínua.

A explicação desse fenômeno foi proposta com Albert Einstein em 1905, que propôs que a energia da radiação era quantizada (tratava-se de uma clara expansão da teoria de Planck para as ondas eletromagnéticas). Com isso, a radiação eletromagnética era tratada como se fosse um feixe de partículas, as quais foram denominadas de fótons e possuíam energia  $E = h\nu$ .

Assim, quando a radiação incide no metal, ocorre a interação entre fótons e elétrons. Cada fóton pode atingir apenas um elétron e fornecer energia  $h\nu$ . Caso o elétron absorva a radiação, ele sai com a energia que recebeu. Caso contrário, ele permanecerá no metal. Dessa maneira, Einstein conseguiu relacionar a energia do elétron com a frequência da radiação ao invés da intensidade da luz, como era previsto pelo modelo clássico.

## 2.4 A dualidade das ondas eletromagnéticas

Ao explicar o efeito fotoelétrico, Einstein propôs um modelo corpuscular para a luz. Porém, pelo modelo de Maxwell (muito aceito pelos físicos da época), a radiação eletromagnética possui comportamento ondulatório. Assim, a resposta, na época, para a famosa pergunta: "a luz é onda ou partícula?" era a seguinte: dependendo do fenômeno, a luz pode ter comportamento ondulatório ou corpuscular.

Fenômenos como difração e interferência são explicados pelo modelo ondulatório. O efeito fotoelétrico, por exemplo, pelo corpuscular. Tal comportamento é conhecido como dualidade onda-partícula para ondas eletromagnéticas.

## 2.5 Elo entre as óticas

Alguns comentários sobre radiações são pertinentes. É conhecido que os fenômenos como reflexão e refração são explicados através da ótica geométrica e ondulatória. Porém, fenômenos como difração e interferência são explicados apenas pelo modelo ondulatório, os quais estão relacionados com o tamanho do comprimento de onda e o ambiente de estudo. Em outras palavras, a ótica geométrica pode ser considerada como um caso limite da ótica ondulatória, quando a ordem do comprimento de onda é desprezível em relação ao sistema analisado. Além disso, no mundo microscópico, a luz retorna a um comportamento corpuscular "estranho" (os fótons) quando interage com a matéria. Essas ideias, tiveram profunda relevância nos trabalhos de Schrodinger, como será visto posteriormente.

## 2.6 O átomo de Bohr

Um outro questionamento à teoria da Física Clássica foi com respeito à estabilidade atômica. O modelo atômico que foi melhor aceito na época foi o de Ernest Rutherford, proposto em 1911. Nele, o átomo é descrito de forma semelhante a um sistema planetário, no qual o núcleo possui carga positiva e é envolvido com elétrons em

órbita ao seu redor.

Entretanto, o Eletromagnetismo de Maxwell previa que qualquer carga em movimento emite radiação e, conseqüentemente, energia. Dessa maneira, os elétrons iriam descrever uma trajetória espiralada até atingir o núcleo e a matéria colapsaria.

A fim de resolver esse problema, Niels Bohr enunciou os seguintes postulados:

- Os elétrons descrevem órbitas circulares em torno de um núcleo positivo submetidos a Lei de Coulomb;
- Os elétrons só podem descrever órbitas específicas denominado de estados estacionários de tal forma que os seus momentos angulares obedeçam à relação de quantização  $L = n \frac{h}{2\pi}$  e suas energias,  $E_n = -\frac{13,6}{n^2} eV$ ;
- Ao passar de um estado estacionário para outro, o átomo emite ou absorve um quantum de energia igual a diferença entre os dois estados.

Com esses postulados, Bohr conseguiu caracterizar bem o átomo de hidrogênio, contudo, sua teoria não era expansível para sistemas mais complexos. Um dos grandes indícios experimentais da teoria de Bohr foi o estudo feito com o espectro de H (Transições eletrônicas do átomo de hidrogênio) por Johann Balmer, no qual notou-se concordância para as emissões de energias entre os estados estacionários.

## 2.7 A regra de Wilson e Sommerfeld

Nesse momento, os físicos da época já tinham uma compreensão mediana do mundo subatômico. Os trabalhos sobre osciladores quânticos de Planck, átomo de Borh e Efeito Fotoelétrico eram exemplos que deixavam claro uma breve compreensão desse universo. No entanto, ainda faltava uma teoria mais sólida para sistemas subatômicos.

Buscando uma melhor compreensão sobre a quantização, em 1916, Wilson e Arnold Sommerfeld criaram um conjunto de regras de quantização para qualquer sistema físico, nos quais as coordenadas fossem funções periódicas do tempo, que são as conhecidas condições quânticas:

$$\oint p_q dq = n_q h, \quad (2.2)$$

Onde  $q$  é uma coordenada,  $p_q$  é o momento associado a tal coordenada,  $n_q$  é um número inteiro e a integração é feita sobre um período completo da coordenada.

Sommerfeld aplicou sua teoria para diversos sistemas quânticos como o oscilador harmônico, rotor rígido, átomo de hidrogênio (o qual teve alguns avanços, como a explicação da estrutura fina) entre outros sistemas simples. Porém, tal teoria não mostrava-se convincente para sistemas ligeiramente mais complicados como o átomo de hélio ou a molécula de íon de hidrogênio. Estava claro que essas regras não poderiam ser a palavra final da teoria quântica.

## 2.8 A dualidade para matéria

Em 1923, Louis De Broglie, influenciado pelos estudos da dualidade das ondas eletromagnéticas, do fóton e pelos trabalhos de Bohr, propôs a dualidade da matéria, isto é, para cada partícula, associa-se uma onda correspondente, conhecida como onda de matéria. O elo entre os dois comportamentos seria regido por:

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (2.3)$$

A quantização de Bohr para as órbitas do elétrons teve grande relevância nos estudos de De Broglie. Em suas palavras:

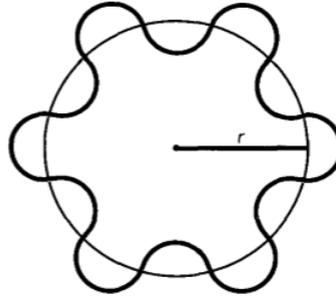
”A determinação do movimento estacionário dos elétrons no átomo introduz números inteiros; ora, até aqui os únicos fenômenos em que intervinham números inteiros na física eram os de interferência e modos normais de vibração. Esse fato me sugeriu a ideia de que também os elétrons não deveriam ser considerados somente com corpúsculos mas que deveriam estar associados com periodicidade”. (NUSSENVEIG, *apud* de Broglie, p 272, 1998)

Assim, De Broglie descrevia os estados estacionários do elétron de forma semelhante aos modos normais de ondas estacionárias numa corda (Figura 3).

Numerosos experimentos indicaram a existência de ondas de matéria. Entre

eles, podem-se citar os trabalhos de G.P. Thomson em 1927 com difração de elétrons, com o qual ganhou o Nobel juntamente com Clinton Davisson por demonstrar o comportamento ondulatório dos elétrons.

Figura 3 – Diagrama simplório sobre as ideias de De Broglie.



Fonte: Erwin Schrödinger: A Compreensão do Mundo Infinitesimal através de uma Realidade Ondulatória[7].

## 2.9 Schrödinger e os artigos de 1926

No ano de 1925, Schrödinger tomou conhecimento dos trabalhos de De Broglie e não deu muita importância inicialmente. No entanto, logo depois, ele se envolveu cada vez mais com a ideia de ondas associadas a elétrons (o comportamento ondulatório do elétron foi descoberto no ano seguinte). Com base nessa ideia, junto com todos os episódios antecedentes, redigiu uma série de trabalhos no ano de 1926[6], nos quais expunha diversas ideias na construção de uma teoria quântica baseada no comportamento dual da luz, nas ondas de matéria de De Broglie e na analogia de ótica-mecânica de Hamilton.

### 3 FUNDAMENTOS MATEMÁTICOS DA TEORIA DE HAMILTON JACOBI

No presente capítulo, serão apresentadas as ferramentas teóricas básicas da mecânica analítica desenvolvidas por volta do século XVIII. Elas foram utilizadas em conjunto com as evidências experimentais e conjecturas teóricas do período da Velha Mecânica Quântica por Schrödinger na busca de seu formalismo diferencial.

#### 3.1 Fundamentos básicos

##### 3.1.1 Lagrangiana, Hamiltoniana e momento canônico

A função Lagrangiana é definida por:

$$L = T - V \quad , \quad (3.1)$$

onde  $T$  e  $V$  são as energias cinética e potencial do sistema, respectivamente.

A função Hamiltoniana é definida por:

$$H(q, p, t) = \sum p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t) \quad , \quad (3.2)$$

onde  $q_i$  e  $p_i$  são as coordenadas e momentos generalizados de cada partícula do conjunto (também conhecidas como coordenadas canônicas) e  $t$  é o tempo. O somatório refere-se a todo o conjunto de elementos

Para a maioria dos casos físicos, a função  $H$  também corresponde à energia total do sistema e pode ser expressa como:

$$H = T + V \quad . \quad (3.3)$$

O momento canônico, por sua vez, é definido como:

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \quad . \quad (3.4)$$

##### 3.1.2 Princípio de Hamilton

O movimento descrito por um sistema mecânico é tal que a ação:

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) dt \quad , \quad (3.5)$$

é mínima para a trajetória real. Onde consideram-se as variações  $\delta q = \delta \dot{q} = 0$  nos extremos do funcional  $S$ .

### 3.1.3 Equações de movimento

Baseado no princípio de Hamilton, podem-se deduzir as equações fundamentais da Mecânica nos formalismos lagrangiano e hamiltoniano apresentadas a seguir:

- Equação de Euler-Lagrange:

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0 \quad . \quad (3.6)$$

- Equações canônicas de Hamilton:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad . \quad (3.7)$$

Tais equações podem ser utilizadas para estudar os movimentos dos corpos. Porém, o formalismo hamiltoniano fornece um método poderoso para investigar questões estruturais importantes na transição da mecânica clássica para a mecânica quântica.

## 3.2 Transformações canônicas

A importância das transformações canônicas está na busca de um sistema com novas variáveis de tal forma que a hamiltoniana seja simplificada e, conseqüentemente, a resolução das equações de movimento. Em outras palavras, dadas as variáveis  $(q, p)$ , e  $H(q, p, t)$ , e:

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad ; \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad . \quad (3.8)$$

Procuram-se  $Q_i = Q_i(q, p, t)$  e  $P_i = P_i(q, p, t)$  em que seja possível encontrar uma nova Hamiltoniana  $K(Q, P, t)$  de tal forma que a física do sistema seja preservada, isto é:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} \quad ; \quad \dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial Q_i} \quad . \quad (3.9)$$

A fim de buscar uma relação entre as antigas e as novas coordenadas, deve-se notar que a validade simultânea das (3.8) e (3.9) implica na validade conjunta dos seus respectivos princípios variacionais. Ou seja, aplicando  $\delta S = 0$  e com o auxílio de (3.2),

temos:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \sum p_i \dot{q}_i - H(q, p, t) dt = 0 \quad , \quad (3.10)$$

e também:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \sum P_i \dot{Q}_i - K(Q, P, t) dt = 0 \quad . \quad (3.11)$$

Assim o elo entre as relações anteriores é possível desde que os seus integrandos difiram pela derivada total em relação ao tempo de uma função  $\Phi$  (lembrando da condições  $\delta q = \delta \dot{q} = 0$  nos extremos temporais), pois:

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{d\Phi}{dt} dt = \delta \Phi(q(t_2), p(t_2), t_2) - \delta \Phi(q(t_1), p(t_1), t_1) = 0 \quad .$$

Dessa maneira:

$$\begin{aligned} \sum p_i \dot{q}_i - H &= \sum P_i \dot{Q}_i - K + \frac{d\Phi}{dt} \\ \sum (p_i dq_i - P_i dQ_i) + (K - H) dt &= d\Phi \quad . \end{aligned} \quad (3.12)$$

Assim, a função  $\Phi$  e outras relacionadas a ela estabelecem uma relação entre as antigas e as novas coordenadas, que são conhecidas como funções geradoras das transformações canônicas. Existem diversos tipos delas e as mesmas são classificadas de acordo com a escolha do par de coordenadas independentes. Para o presente propósito, escolheu-se a função conhecida na literatura [3] como tipo 2  $F_2 = F_2(q, P, t)$ , onde as coordenadas  $(q, P)$  são tomadas como independentes definindo:

$$F_2(q, P, t) = \sum P_i Q_i + \Phi \quad , \quad (3.13)$$

que na forma diferencial fica:

$$\begin{aligned} dF_2 &= d \sum P_i Q_i + d\Phi \\ dF_2 &= \sum dP_i Q_i + \sum P_i dQ_i + \sum (p_i dq_i - P_i dQ_i) + (K - H) dt \\ dF_2 &= \sum p_i dq_i + \sum Q_i dP_i + (K - H) dt \quad . \end{aligned} \quad (3.14)$$

Mas:

$$dF_2 = \sum \frac{\partial F_2}{\partial q_i} dq_i + \sum \frac{\partial F_2}{\partial P_i} dP_i + \frac{\partial F_2}{\partial t} dt \quad . \quad (3.15)$$

Comparando (2.13) e (2.14) temos:

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i}, Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \quad (3.16)$$

$$K(Q, P, t) = H(q, p, t) + \frac{\partial F_2}{\partial t} \quad . \quad (3.17)$$

As equações (2.15) e (2.16) estabelecem as relações entre (q,p) e (Q,P) para uma função do tipo  $F_2 = F_2(q, P, t)$ .

Para maiores detalhes sobre outros tipos de funções geradoras, é sugerida a consulta de GOLDSTEIN. [2]

### 3.3 A equação de Hamilton-Jacobi

Na secção anterior viu-se uma transformação canônica do tipo 2, a qual será designada como  $S=S(q,P,t)$ . Se no novo sistema de coordenadas, isto é, a nova hamiltoniana  $K(P,Q,t)$ , for igual a zero, temos as soluções triviais:

$$\dot{Q}_i = \frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad \Rightarrow \quad Q_i = \beta_i \quad (3.18)$$

$$\dot{P}_i = -\frac{\partial K}{\partial P_i} = 0 \quad \Rightarrow \quad P_i = \alpha_i \quad (3.19)$$

onde  $\alpha_i$  e  $\beta_i$  são constantes. Pode-se realizar uma transformação inversa e obter as equações de movimento para as coordenadas originais:

$$\begin{aligned} q_i &= q_i(Q, P, t) \Rightarrow q_i = q_i(\beta_i, \alpha_i, t) \\ p_i &= p_i(Q, P, t) \Rightarrow p_i = p_i(\beta_i, \alpha_i, t) \quad . \end{aligned} \quad (3.20)$$

O presente objetivo é achar a função S que seja capaz de resolver tal transição. Para isso, utiliza-se a equação (3.17) e a relação  $p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i}$  e obtemos:

$$H(q_1 \dots q_n, \frac{\partial S}{\partial q_1} \dots \frac{\partial S}{\partial q_n}, t) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (3.21)$$

que é conhecida como a equação de Hamilton-Jacobi (HJ).

A solução da equação da HJ fornece a função geradora que procuramos, porém, por ser uma equação diferencial parcial, encontrar a solução geral não é algo simples. Por outro lado, pode-se achar uma solução particular (também conhecida como integral completa) da forma  $S = S(q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, t)$ , onde as constantes  $\alpha_i$  de integração são não aditivas e independentes (vide Apêndice A). Realizando a identificação  $\alpha_i = P_i$ , a função  $S = S(q, P, t)$  realiza a transformação desejada.

As equações de transformação (2.15) ficam:

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \Rightarrow p_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q_i} \quad (3.22)$$

$$, Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \Rightarrow \beta_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i} \quad (3.23)$$

A equação (3.23) irá fornecer, por inversão, o valor para  $q_i = q_i(\alpha_i, \beta_i, t)$ , substituindo esse resultado em  $S = S(q, \alpha, t)$  e depois em (3.22) encontra-se  $p_i = p_i(\alpha_i, \beta_i, t)$ , que são as equações de movimento nas coordenadas originais, resolvendo o problema.

### 3.4 Relação entre a ação e a integral completa

Existe uma relação interessante entre a ação  $\int L dt$  e a integral completa  $S = S(q, \alpha, t)$ . Diferenciando S em relação ao tempo, têm-se:

$$\frac{dS}{dt} = \sum \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t} = \sum p_i \dot{q}_i - H = L \quad . \quad (3.24)$$

Assim:

$$S = \int L dt \quad . \quad (3.25)$$

Isto mostra que a ação difere da integral completa por apenas uma constante, revelando um estreito laço entre essas duas quantidades.

## 4 O FORMALISMO DA MECÂNICA QUÂNTICA DE SCHRÖDINGER

### 4.1 A analogia ótica-mecânica

No presente capítulo, serão discutidas as ideias que levaram Schrödinger a postular sua equação baseada na analogia ótica-mecânica e nas outras descobertas do período. A linha de raciocínio básica é a seguinte: seja uma partícula sob a ação de um potencial  $V = V(x, y, z)$ , seu hamiltoniano é:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \quad . \quad (4.1)$$

$$(4.2)$$

Utilizando a equação de Hamilton-Jacobi (3.21) e a relação para os momentos(3.22), temos:

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\partial S}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial S}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial S}{\partial z} \right)^2 \right] + V(x, y, z) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad , \quad (4.3)$$

buscando uma solução do tipo  $S(x, y, z, t) = W(x, y, z) + T(t)$ , encontra-se:

$$\frac{1}{2m} \left[ \left( \frac{\partial W}{\partial x} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial y} \right)^2 + \left( \frac{\partial W}{\partial z} \right)^2 \right] + V(x, y, z) = -\frac{\partial T}{\partial t} = E \quad . \quad (4.4)$$

Para que a relação acima seja satisfeita, os dois membros devem ser iguais a uma constante e, observando a estrutura do primeiro membro, este deve ser a energia total do sistema ( $E = \frac{p^2}{2m} + V$ ), identificando  $\vec{p} = \nabla W$  (veja a relação 3.22). Assim, podemos escrever as relações:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -E \quad \Rightarrow \quad T = -Et \quad (4.5)$$

$$\frac{1}{2m} (\nabla W)^2 + V = E \quad \Rightarrow \quad \nabla W^2 = 2m(E - V) \quad , \quad (4.6)$$

$$(4.7)$$

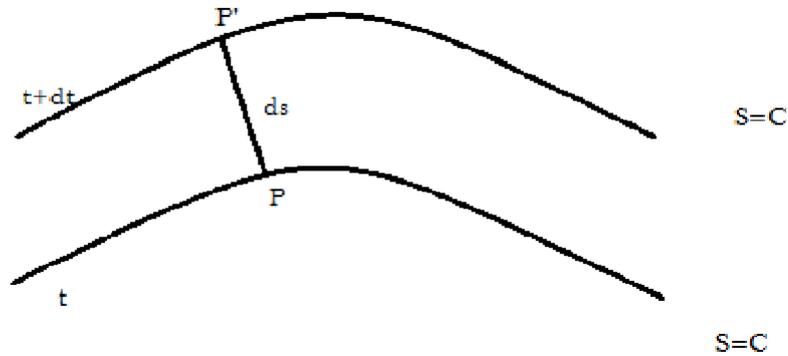
cuja a solução particular é:

$$S = W(x, y, z) - Et \quad . \quad (4.8)$$

Analisando o caso em que  $S=C$ (constante), observa-se que  $S$  representa a equação de uma superfície móvel. Além disso, o momento  $\vec{p} = \nabla W$  corresponde a um vetor perpendicular a essas superfícies (Figura 4). Ou seja, as trajetórias possíveis da partícula devem ser tais que, em cada instante  $t$ , o momento linear é perpendicular às

superfícies  $S = C$ . Além disso,  $S$  (a menos de uma constante) representa a ação.

Figura 4 – superfícies de fase móveis  $S=C$



Fonte: Elaborado pelo autor

Diferenciando a equação (4.8), temos:

$$dW = E dt \quad , \quad (4.9)$$

mas:

$$dW = |\nabla W| ds \quad , \quad (4.10)$$

assim:

$$|\nabla W| ds = E dt \quad \Rightarrow \quad \frac{ds}{dt} = \frac{E}{|\nabla W|} \quad \Rightarrow \quad u = \frac{E}{\sqrt{2m(E - V)}} \quad . \quad (4.11)$$

onde  $u$  representa a velocidade de fase associada ao processo ondulatório.

Tais características levaram Hamilton a associar o movimento de uma partícula a um processo ondulatório imaginário no qual a ação do movimento representa a fase da onda com velocidade  $u$  dada por (4.11). Essa analogia ficou conhecida como ótica-mecânica.

## 4.2 A equação de Schrödinger

Com a analogia entre mecânica e óptica geométrica proposta por Hamilton, Schrödinger foi induzido ao pensamento de que a Mecânica Clássica fosse apenas uma forma aproximada de uma Mecânica mais geral com características ondulatórias. Dessa forma, sua falha na escala microscópica poderia ser compreendida assim como o fracasso da ótica geométrica em explicar fenômenos como a interferência e a difração. Ou seja,

assim como a Ótica Geométrica é um caso particular da Ótica Ondulatória (onde o caso limite é dado pelo comprimento de onda), a Mecânica Clássica poderia ser um caso particular de algo mais geral (Mecânica Quântica) e essa relação poderia ser descoberta através da relação entre ondas e partículas (ondas de matéria  $\lambda = \frac{h}{p}$ ).

Assim, Schrodinger, em seus trabalhos de 1926 conjecturou que  $S$  deveria ser a fase de um processo ondulatório real. A descrição de uma onda unidimensional pode ser dada da forma:

$$\Psi = \exp[i(kx - \omega t)] \quad , \quad (4.12)$$

onde o termo  $(kx - \omega t)$  representa sua fase que é composta por um termo espacial  $kx$  e um temporal  $\omega t$  e  $\omega = 2\pi\nu$ ,  $\nu$  corresponde a frequência . Assim, o processo de Schrödinger foi descrito com a forma:

$$\Psi = \exp\left(\frac{i}{\hbar}S\right) = \exp\left[\frac{i}{\hbar}(-Et + W(x, y, z))\right] \quad . \quad (4.13)$$

O termo  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  tem a finalidade de garantir que a frequência seja dada pela relação de Planck  $E = h\nu$ , o que pode ser observado comparando as equações (4.12) e (4.13).

A descrição de uma onda com velocidade de fase  $u$  é descrito pela equação:

$$\nabla^2\Psi - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0 \quad , \quad (4.14)$$

utilizando a relação para a velocidade de fase (4.11) e a estrutura para  $\Psi$  (4.13), resulta:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = E\Psi \quad (4.15)$$

que é conhecida como equação de Schrödinger independente do tempo. Pode-se reescrever:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} \quad , \quad (4.16)$$

a qual é a equação de Schrödinger dependente do tempo.

Embora sejam bons argumentos, tal procedimento não constitui uma demonstração da equação de Schrödinger. Por outro lado, realizando o processo inverso, isto é, postulando a equação anterior e escrevendo  $\Psi = e^{\frac{i}{\hbar}S}$ , obtêm-se:

$$\frac{1}{2m}(\nabla S)^2 + V + \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m}\nabla^2 S = 0 \quad . \quad (4.17)$$

Considerando  $h \rightarrow 0$ , tal equação resulta no problema clássico de Hamilton para partícula sob o potencial  $V$  (compare com a equação 4.3) e a fase da função de onda  $\Psi$  coincide com a ação clássica, ilustrando que a Mecânica Quântica no formalismo de Schrödinger tem como elo a teoria de Hamilton-Jacobi na Mecânica Clássica.

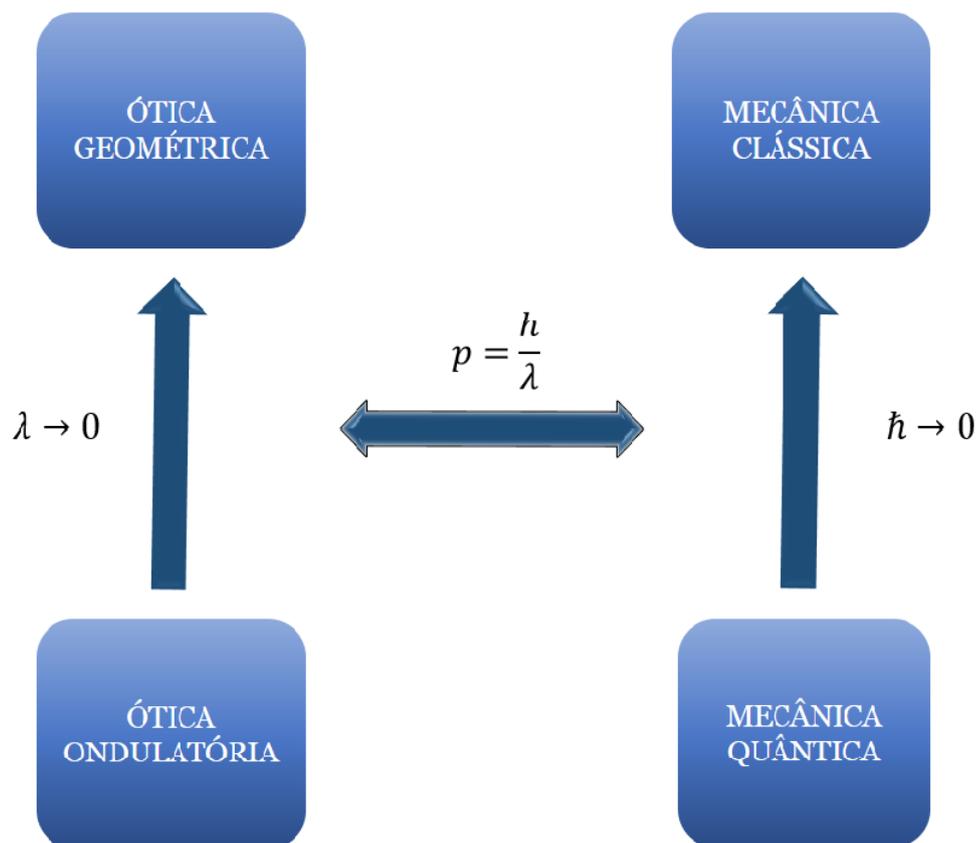
Com esses resultados, nota-se que, assim como na ótica, a Mecânica Clássica pode ser encarada como caso limite dado pela constante de Planck da Mecânica Quântica.

Um aspecto interessante é que, pelo fato de trabalhar com derivadas parciais, a equação de Schrödinger, em comparação ao formalismo de Heisenberg, teve uma forte aceitação pelos físicos da época, já que era uma matemática a qual a maioria dos cientistas estavam acostumados. Além disso, em 1924 é lançado um livro de Física Matemática (*Methoden der mathematischen Physik*) dos autores Richard Courant e David Hilbert o qual continha inúmeras ferramentas aplicáveis ao formalismo diferencial -uma feliz coincidência histórica.

Inúmeros casos foram solucionados utilizando a equação de Schrödinger, inclusive de sistemas mais complexos como o do átomo de Hélio, o qual descobriram-se seus níveis de energia com boa aproximação.

Alguns questionamentos eram pertinentes: afinal, qual é o significado função de onda? Como pode-se localizar um objeto microscópico? Diversas interpretações foram discutidas posteriormente como a estatística, variáveis ocultas não locais, entre outras. Porém, estava claro que a equação de Schrödinger era um marco histórico no problema que Planck solucionou como um "ato de desespero" e os diversos significados da função de onda eram as cenas dos próximos episódios. A figura 5 ilustra de maneira didática a simetria do problema estudado.

Figura 5 – Diagrama de simetrias.



Fonte: elaborado pelo autor

## 5 CONCLUSÃO

No decorrer dessa monografia, tentou-se mostrar de forma clara como foi construída a teoria quântica através de experimentos confusos, conjecturas duvidosas e postulados incompletos, inicialmente. Notou-se a importância de uma ferramenta matemática poderosa aliada a várias conjecturas interessantes decorrentes de experimentos curiosos.

Embora seja uma história bem contada, tal transição poderia ser feita de outras maneiras, como foi proposto pelo formalismo matricial de Heisenberg no mesmo período e, posteriormente, via integrais de trajetória de Richard Feynman. Tais estudos são equivalentes fisicamente e mostram um grande avanço na compreensão do universo subatômico, porém a escolha do formalismo de Schrödinger possui grande apelo estético devido seu formalismo diferencial e sua fama no meio acadêmico.

Com base em questões históricas, mostrou-se a mecânica analítica como grande alicerce da física teórica, particularmente o formalismo hamiltoniano. Sua capacidade de investigar questões estruturais da física revela-se indispensável na compreensão do cerne da Mecânica Quântica, ilustrando, de forma clara, a divisória dos dois mundos, onde o limite clássico da teoria de Schrödinger corresponde a teoria de Hamilton-Jacobi.

Espera-se que o presente trabalho tenha se mostrado satisfatório tanto do ponto de vista histórico quanto matemático e compressível para uma gama maior de leitores, servindo de atalho na compreensão desse assunto e sendo capaz de estimular alguns leitores a prosseguirem em estudos mais avançados sobre o tema.

## APÊNDICE A – SOLUÇÃO PARTICULAR DA EQUAÇÃO DE HAMILTON JACOBI

Recordando as relações:

$$q_i = q_i(Q, P, t) \Rightarrow q_i = q_i(\beta_i, \alpha_i, t) \quad (\text{A.1})$$

$$p_i = p_i(Q, P, t) \Rightarrow p_i = p_i(\beta_i, \alpha_i, t) \quad (\text{A.2})$$

$$p_i = \frac{\partial S}{\partial q_i} \quad (\text{A.3})$$

$$p_i = \frac{\partial F_2}{\partial q_i} \Rightarrow p_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial q_i} \quad (\text{A.4})$$

$$, Q_i = \frac{\partial F_2}{\partial P_i} \Rightarrow \beta_i = \frac{\partial S(q, \alpha, t)}{\partial \alpha_i} \quad (\text{A.5})$$

**DEFINIÇÃO:** Uma solução particular da equação de Hamilton-Jacobi possui a forma  $S(q_1, \dots, q_n, \alpha_1, \dots, \alpha_n, t)$  onde as constantes  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  são não aditivas e de forma que:

$$\det\left(\frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial \alpha_j}\right) \neq 0 \quad . \quad (\text{A.6})$$

Dessa maneira, a condição (A.6) caracteriza os parâmetros  $\alpha_i$  como mutuamente independentes e assegura que (A.5) possa ser resolvida por inversão para achar  $q_i$  como sugere (A.1)

**Teorema de Jacobi:** Seja  $S(q, \alpha, t)$  uma solução da equação de Hamilton-Jacobi. Então os qs e ps determinados por (A.1) e (A.2) obedecem as equações de Hamilton:

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad , \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad .$$

**Prova:** tomando a derivada total em relação ao tempo de (A.5), temos:

$$\sum_j \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i} \dot{q}_j + \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial \alpha_i} = 0 \quad . \quad (\text{A.7})$$

Utilizando (A.3) e reescrevendo a equação de Hamilton-Jacobi como:

$$H(q, p(q, \alpha, t)) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0 \quad (\text{A.8})$$

e diferenciando com relação a  $\alpha_i$ :

$$\sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{p_j}{\partial \alpha_i} + \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial t} = \sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial \alpha_i \partial t} = 0 \quad , \quad (\text{A.9})$$

combinando (A.7) e (A.9), encontra-se:

$$\sum_j \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i} (\dot{q}_j - \frac{\partial H}{\partial p_j}) = 0 \quad (\text{A.10})$$

e utilizando a definição de que a matriz com os elementos  $\frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i}$  é não-singular, encontra-se as soluções triviais para o conjunto de equações (A.10):

$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j} \quad . \quad (\text{A.11})$$

A fim de demonstrar a segunda parte, tomemos como derivada em relação ao tempo a equação (A.3), encontrando:

$$\frac{dp_i}{dt} = \sum_j \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial q_i} \dot{q}_j + \frac{\partial^2 S}{\partial t \partial q_i} \quad (\text{A.12})$$

e diferenciando, novamente a equação de Hamilton-Jacobi (A.8) em relação a  $q_i$ , encontra-se:

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_j \frac{\partial H}{\partial p_j} \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial q_j} + \frac{\partial^2 S}{\partial q_i \partial t} = 0 \quad . \quad (\text{A.13})$$

Combinando (A.12) e (A.13):

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_j \frac{\partial^2 S}{\partial q_j \partial \alpha_i} (\dot{q}_j + \frac{\partial H}{\partial p_j}) \quad (\text{A.14})$$

Finalmente, utilizando (A.11), encontra-se a outra equação desejada completando a dedução:

$$\dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad . \quad (\text{A.15})$$

Completando a demonstração.

## REFERÊNCIAS

- [1] DOCA, R. H. NEWTON, B. V. BISCUOLA, G. J. *Tópicos de Física 3*, São Paulo, Saraiva, 17<sup>a</sup> ed, 2007.
- [2] GOLDSTEIN, H. *Classical Mechanics*, Addison-Wesley, Reading, MA, 2<sup>a</sup>ed, 1980.
- [3] LEMOS, N. A *Mecânica Analítica*, São Paulo, Livraria da Física, 2<sup>a</sup> ed, 2007.
- [4] LANDAU, L.D & LIFSHITZ, E. *Mechanics*, Amsterdam: Butterworth-Heinemann, 3<sup>a</sup>ed, 1976.
- [5] NUSSENVEIG, H. M *Curso de Física Básica - vol.4*. São Paulo, Editora Blucher, 1998.
- [6] SCHRODINGER, E. *Collected Papers on Wave Mechanics*, New York Chelsea Publishing Co., 3<sup>a</sup> ed, 1982.
- [7] SCHMIDT, G.D. *Erwin Schrodinger: A compreensão do mundo infinitesimal através de uma realidade ondulatória*. São Paulo, 2008.