

Sobre o teorema quântico de Sommerfeld e de Epstein*

(Zum Quantensatz von Sommerfeld und Epstein)

A. Einstein

Publicado nos Deutsche Physikalische Gesellschaft, Verhandlungen **19**, 82-92 (1917)

1. Formulação atual

Não há mesmo mais dúvidas de que a condição de quantização para sistemas mecânicos periódicos de um grau de liberdade seja

$$\int p dq = \int p \frac{dq}{dt} dt = nh \quad (1)$$

(Sommerfeld e Debye). Nessa equação a integral deve ser estendida por um período completo do movimento, q é a coordenada e p a coordenada correspondente ao impulso do sistema. Além disso, os trabalhos teóricos espectrais de Sommerfeld indicam com segurança que, para sistemas com vários graus de liberdade, devem surgir, no lugar desta única condição quântica, diversas condições, geralmente tantas (l) quantas são os graus de liberdade do sistema. Estas l condições são, de acordo com Sommerfeld,

$$\int p_i dq_i = n_i h. \quad (2)$$

Como esta formulação não é independente da escolha das coordenadas, ela é válida apenas com uma escolha apropriada das mesmas. Somente após esta escolha ter sido realizada, e sendo as q_i funções periódicas do tempo, o sistema (2) poderá conter alguma informação sobre o movimento.

Outra contribuição importante para o princípio de quantização foi feito por Epstein (e Schwarzschild). O primeiro baseia sua regra para a escolha das coordenadas q_i de Sommerfeld no teorema de Jacobi que, como se sabe, tem o seguinte enunciado: seja H ($H[q_i p_i]$) a função de Hamilton das q_i , p_i e t , que aparece nas equações canônicas

$$\dot{p}_i = - \frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (3)$$

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i} \quad (4)$$

e que – caso ela não contenha o tempo t explicitamente – é idêntica à função energia¹. Seja ainda $J(t, q_1 \dots q_l, \alpha_1 \dots \alpha_l)$ uma integral completa da equação diferencial parcial de Hamilton-Jacobi

$$\frac{\partial J}{\partial t} + H(q_i, \frac{\partial J}{\partial q_i}) = 0. \quad (5)$$

Então, a solução das equações canônicas é dada por

$$\frac{\partial J}{\partial \alpha_i} = \beta_i, \quad (6)$$

$$\frac{\partial J}{\partial q_i} = p_i. \quad (7)$$

Se H não contiver o tempo explicitamente, o que pressupomos a seguir, então pode-se satisfazer (5) com o ansatz

$$J = J^* - ht, \quad (8)$$

em que h é constante e J^* não depende mais explicitamente do tempo t . No lugar de (5), (6) e (7) aparecem então as equações

$$H(q_i, \frac{\partial J^*}{\partial q_i}) = h, \quad (9)$$

$$\frac{\partial J^*}{\partial \alpha_i} = \beta_i, \quad \frac{\partial J^*}{\partial h} = t - t_0 \quad (10)$$

$$\frac{\partial J^*}{\partial q_i} = p_i, \quad (11)$$

sendo que a primeira das Eqs. (10) representa apenas $l - 1$ equações, no lugar de α_l apareceu a constante h e no lugar de β_l , a constante $-t_0$.²

*Tradução de Jonas Werckmeister. Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, SP, Brasil. Revisão técnica de Marcus A.M. de Aguiar. Instituto de Física “Gleb Wataghin”, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil.

¹Pois tem-se neste caso $\frac{dH}{dt} = \sum_i \frac{\partial H}{\partial q_i} \dot{q}_i + \sum_i \frac{\partial H}{\partial p_i} \dot{p}_i = 0$.

²No original aparece, por engano, o índice n ao invés de l nos coeficientes α e β (N.T.).

Segundo Epstein, tem-se agora que escolher as coordenadas q_i de tal maneira que exista uma integral completa de (9) da forma

$$J^* = \sum_i J_i(q_i), \quad (12)$$

sendo que J_i depende de q_i , mas é independente das q restantes. As condições quânticas (2) de Sommerfeld devem então valer para estas coordenadas q_i , caso as q_i sejam funções periódicas de t .

Mesmo com os grandes sucessos da extensão do teorema quântico de Sommerfeld-Epstein para sistemas de vários graus de liberdade, o fato de este depender de uma separação das variáveis conforme (12) permanece insatisfatório, pois isso nada tem a ver com o problema quântico. A seguir é feita a proposta de uma pequena modificação da condição de Sommerfeld-Epstein, que evita este estado de coisas. Quero esboçar resumidamente meus pensamentos básicos e, então, desenvolvê-los mais profundamente em seguida.

2. Formulação modificada

Enquanto pdq é um invariante em sistemas de um grau de liberdade, isto é, é independente da escolha da coordenada q , cada produto $p_i dq_i$ em um sistema de vários graus de liberdade não é um invariante; por isso a condição de quantização (2) não tem um significado invariante. Apenas a soma $\sum_i p_i dq_i$ estendida a todos os graus de liberdade l é invariante. Para se deduzir agora dessa soma várias condições de quantização invariantes, pode-se proceder da seguinte maneira. Consideram-se as p_i como funções das q_i . Falando-se geometricamente pode-se considerar então as p_i como vetores (de caráter “covariante”) no espaço l -dimensional das q_i . Se eu traçar uma curva fechada qualquer no espaço das q_i , a qual não precisa de modo algum ser uma “trajetória” do sistema mecânico, a integral de linha estendida sobre a mesma

$$\int \sum_i p_i dq_i \quad (13)$$

é um invariante. Se as p_i forem funções arbitrárias das q_i , então a cada curva fechada, em geral, corresponderá um valor diferente da integral (13). Se, entretanto, o vetor p_i é derivável de um potencial J^* , isto é, se valem as relações

$$\frac{\partial p_i}{\partial q_k} - \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0 \quad (14)$$

e/ou

$$p_i = \frac{\partial J^*}{\partial q_i}, \quad (15)$$

então a integral (13) tem o mesmo valor para todas as curvas fechadas que possam ser continuamente deformadas umas nas outras. Para todas as curvas que

possam ser reduzidas a um ponto por uma deformação contínua, a integral (13) se anula. Entretanto, se o espaço considerado das q_i for uma superfície várias vezes conexa, então há curvas fechadas que não podem ser reduzidas a um ponto por deformação contínua; se J^* não é uma função unívoca das q_i (mas plurívoca de ordem ∞), então a integral (13) para tais curvas será geralmente diferente de zero. Haverá, entretanto, um número finito de curvas fechadas no espaço q às quais todas as curvas fechadas podem ser reduzidas por deformações contínuas. Neste sentido pode-se, então, determinar um número finito de condições

$$\int \sum_i p_i dq_i = n_i h, \quad (16)$$

como condições de quantização. Essas devem, na minha opinião, entrar no lugar das condições quânticas (2). Temos que lembrar que o número de Eqs. (14) que não podem ser reduzidas umas das outras é igual ao número de graus de liberdade do sistema. Se ele for menor, então teremos diante de nós um caso de “degenerescência”.

O pensamento básico (intencionalmente incompleto) esboçado acima será mais aprofundado a seguir.

3. Derivação clara da equação diferencial de Hamilton-Jacobi

Seja P um ponto do espaço de coordenadas para o qual são dadas as coordenadas Q_i e também as velocidades correspondentes, *i.e.*, os momentos P_i , de forma que o movimento fique totalmente determinado pelas Eqs. (3) e (4)³. A cada ponto da órbita L que passa por P corresponde então uma determinada velocidade, ou seja, os momentos p_i são determinados em função dos q_i . Imagine agora uma superfície $(l-1)$ -dimensional no espaço de coordenadas onde são dadas, para todo ponto P da superfície, coordenadas Q_i e seus momentos P_i correspondentes. Então, para todo ponto P da superfície existe uma órbita L no espaço de coordenadas. Se os momentos P_i nessa superfície são funções contínuas das Q_i , essas trajetórias irão preencher continuamente o espaço de coordenadas (ou pelo menos uma parte dele). Por cada ponto q_i do espaço de coordenadas irá passar uma determinada órbita. Serão, portanto, agregadas a este ponto também determinadas coordenadas de impulso p_i . Existe com isso um campo vetorial das p_i no espaço das coordenadas das q_i . Vamos agora estabelecer a lei deste campo vetorial.

Considerando as p_i como funções das q_i no sistema canônico de Eqs. (3), temos que substituir o lado esquerdo por

$$\sum_k \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{dq_k}{dt}$$

³Pressupõe-se que H não dependa explicitamente do tempo t .

de modo que, conforme (4), também

$$\sum_k \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \frac{\partial H}{\partial p_k}$$

pode ser determinada. Temos, portanto, no lugar de (3)

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial p_i}{\partial q_k} = 0. \quad (17)$$

Este é um sistema de l equações diferenciais lineares que deve ser suficiente para determinar as p_k em função das q_k .

Nos perguntamos agora se existem campos vetoriais para os quais existe um potencial J^* , isto é, para os quais as condições (14) e (15) são cumpridas. Neste caso (17) toma, em virtude de (14), a forma

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} + \sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial p_k}{\partial q_i} = 0.$$

Esta equação demonstra que H é independente das q_i . Existem, portanto, campos potenciais do tipo procurado, e seu potencial J^* é suficiente para a Eq. (9) de Hamilton-Jacobi e/ou J , para a Eq. (5).

Com isso está demonstrado que as Eqs. (3) podem ser substituídas por (8) e (9) e/ou (7) e (5). Queremos mostrar ainda que com (14) e/ou (6) se satisfaz o sistema de Eqs. (4), mesmo que isso não seja de importância para as considerações seguintes. Se, após a integração de (9) em virtude de (8), as p_i forem expressas em função das q_i , as Eqs. (4) formam um sistema de equações diferenciais totais para a determinação das q_i em função do tempo. De acordo com a teoria das equações diferenciais de primeira ordem, a equação diferencial parcial

$$\sum_k \frac{\partial H}{\partial p_k} \frac{\partial \varphi}{\partial q_k} + \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0 \quad (18)$$

é equivalente a este sistema de equações diferenciais totais. A primeira é, entretanto, dada por

$$\varphi = \frac{\partial J}{\partial \alpha_i}$$

caso J seja uma integral completa de (5). Colocando-se este valor de φ no lado esquerdo de (18), obtém-se, considerando-se (7)

$$\sum_k \frac{\partial H}{\partial (\frac{\partial J}{\partial q_k})} \frac{\partial^2 J}{\partial q_k \partial \alpha_i} + \frac{\partial^2 J}{\partial t \partial \alpha_i} = 0$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \left\{ H(q_k, \frac{\partial J}{\partial q_k}) + \frac{\partial J}{\partial t} \right\},$$

que se anula por causa de (5). Disso resulta que, através de (6) e/ou (14), as Eqs. (4) são integradas.

4. O campo p_i de uma única órbita

Chegamos agora a um ponto essencial, sobre o qual silencieei propositalmente no esboço provisório do pensamento básico da seção 2. Nas observações da seção, imaginamos o campo p_i produzido por um número infinitamente grande de movimentos $(l-1)$ -vezes independentes uns dos outros, os quais estavam representados no espaço q_i pelo mesmo número de órbitas. Imaginamos agora, entretanto, o movimento não perturbado de um sistema isolado acompanhado por um tempo infinitamente longo e imaginamos a órbita correspondente traçada no espaço q_i . Aí podem surgir dois casos:

1°) Existe uma parte do espaço q_i em que a órbita se aproxima arbitrariamente de cada ponto desta parte do espaço l -dimensional no decorrer do tempo.

2°) A órbita pode ser acomodada completamente em um contínuo de dimensão menor do que l . A este pertence, como caso especial, aquele do movimento numa órbita perfeitamente fechada.

O caso 1 é o mais geral; o caso 2 surge do 1 como caso especial. Como exemplo de 1 imaginamos o movimento de um ponto material sob o efeito de uma força central, descrito por duas coordenadas que determinam a posição do ponto no plano da órbita (por exemplo, as coordenadas polares r e θ). O caso 2, por exemplo, acontece se a lei da gravidade for exatamente proporcional a $1/r^2$, e se os desvios do movimento de Kepler exigidos pela teoria da relatividade forem desprezados; a órbita é então uma órbita fechada e seus pontos formam um contínuo de apenas uma dimensão. Observado num espaço tridimensional, o movimento central é sempre um movimento do tipo 2, porque a curva da órbita pode ser colocada em um contínuo de 2 dimensões; observado de maneira tridimensional, o movimento central tem que ser visto como caso especial de um movimento definido por uma lei dinâmica mais complicada (p. ex. o movimento estudado por Epstein na teoria do efeito Stark).

A reflexão seguinte refere-se ao caso geral 1. Observemos um elemento $d\tau$ de área q_i . Através dele passam infinitas vezes as órbitas do movimento observado. A cada uma dessas trajetórias corresponde um sistema (p_i) de coordenadas de impulso. São possíveis "a priori" 2 tipos de órbitas que se diferenciam de maneira fundamentalmente clara um do outro. Tipo a): os sistemas p_i se repetem de modo que apenas um número finito de sistemas p_i pertencem a $d\tau$. Neste caso as p_i podem ser representadas como funções unívocas ou plurívocas das q_i para o movimento observado.

Tipo b): No ponto observado surgem inúmeros sistemas p_i . Neste caso as p_i não podem ser representadas como funções das q_i . Nota-se logo que o tipo b) exclui a condição de quantização (16) formulada na seção 2. Por outro lado a mecânica estatística clássica refere-se essencialmente apenas ao tipo b), pois somente neste

caso as médias no ensemble microcanônico são equivalente às médias temporais sobre o sistema.⁴

Resumindo podemos dizer: a aplicação da condição quântica (16) exige que existam órbitas semelhantes, de forma que cada órbita determine um campo p_i para o qual existe um potencial J^* .

5. O espaço de coordenadas racional

Já foi notado que as p_i são em geral funções polivalentes das q_i . Observamos novamente, como exemplo simples, o movimento plano de revolução de um ponto sob efeito da tração de um ponto fixo. Neste caso o ponto se movimenta de tal modo que sua distância r do centro de tração oscila periodicamente entre um valor mínimo r_1 e um valor máximo r_2 . Observando-se um ponto do espaço das q_i , isto é, um ponto da superfície circular delimitada pelos dois círculos com os raios r_1 e r_2 , a curva orbital passa infinitas vezes arbitrariamente próxima a este ponto ou – um pouco menos precisamente – através dele. Mas, conforme ocorre a passagem, em uma parte da órbita com r crescente ou em uma parte da órbita com r decrescente, a componente radial de velocidade tem sinal diferente: as p_r são funções bivalentes das q_r .

Essa complicação pode ser eliminada através do conhecido método introduzido por Riemann na teoria das funções. Imaginamos a superfície do anel entre r_1 e r_2 duplicada, de tal modo que duas folhas congruentes circulares fiquem uma sobre a outra. No anel superior imaginamos marcadas as partes da órbita com dr/dt positivo, no anel inferior, as partes da órbita com dr/dt negativo, juntamente com o sistema vetorial correspondente das p_r . Nas duas linhas circulares imaginamos as duas folhas ligadas entre si, porque a órbita passa de uma folha circular para a outra se a curva orbital tocar um dos dois círculos limítrofes. Ao longo destes círculos, as p_i coincidem umas com as outras nas duas folhas, como se vê facilmente. Interpretadas nessa superfície dupla, as p_r são funções não só contínuas como também unívocas das q_r ; nisso está o valor dessa representação.

Nesta superfície dupla há obviamente dois tipos de curva fechada, que por meio de uma variação contínua não podem ser reduzidas a um ponto nem recolocadas uma sobre a outra. A Fig. 1 mostra um exemplo (L_1 e L_2) para cada um destes dois tipos de curvas; as partes das linhas que se encontram na folha inferior são representadas por linhas tracejadas. Todas as outras curvas fechadas podem, através de deformações contínuas na superfície duplicada, serem reduzidas ou transportadas em uma ou várias revoluções dos tipos L_1 e L_2 . O teorema quântico (16) deveria ser aplicado aqui aos dois tipos de linhas L_1 e L_2 .

É claro que essas observações se generalizam para todos os movimentos que cumprem a condição da seção

4. É necessário imaginar o espaço de fase dividido em um número de “setores” ligados ao longo de superfícies $(l - 1)$ -dimensionais de tal maneira que, interpretadas na forma acima surgida, as p_i são funções unívocas e contínuas (também na passagem de um setor para outro); denominamos essa construção geométrica auxiliar de “espaço de fase racional”. O teorema quântico de (16) deve se referir a todas as linhas fechadas no espaço racional das coordenadas.

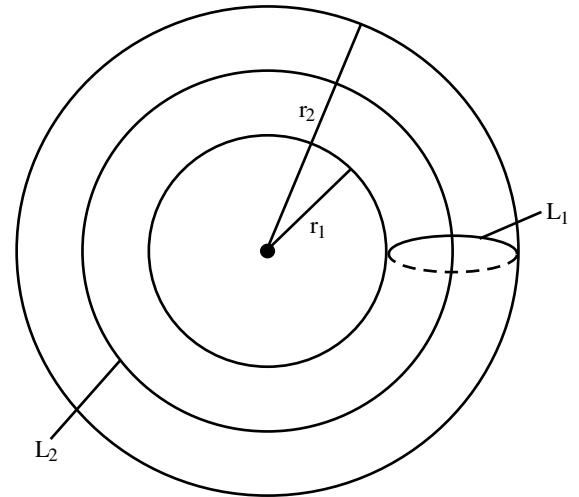


Figura 1 -

Para que o teorema quântico tenha um significado exato nesta versão, a integral $\int \sum dp_i dq_i$, estendida por todas as curvas fechadas do espaço racional q_i , que podem ser continuamente transportadas umas nas outras, tem que ter o mesmo valor. A prova deve ser apresentada exatamente de acordo com o esquema corrente. Sejam L_1 e L_2 (veja o esquema na Fig. 2) curvas fechadas no espaço racional das q_i , as quais podem ser continuamente transportadas umas nas outras, sem prejuízo do sentido de revolução marcado. Então a linha indicada na figura é uma curva fechada que pode ser continuamente reduzida a um ponto. Disso resulta, por causa de (14), que a integral estendida sobre o caminho da linha é nula. Se considerarmos além disso o fato de que as integrais estendidas sobre as linhas de ligação infinitamente vizinhas A_1A_2 e B_1B_2 são iguais entre si por causa da univalência das p_i no espaço racional das q_i , então segue a igualdade das integrais estendidas sobre L_1 e L_2 .

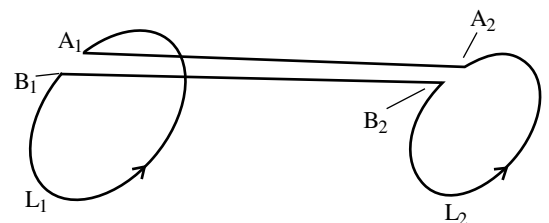


Figura 2 -

⁴No ensemble microcanônico existem sistemas onde, dadas as q_i , as p_i são aleatórias (compatíveis com o valor da energia).

No espaço racional das q_i o potencial J^* é infinitamente polivalente, mas de acordo com o teorema quântico, essa polivalência é a mais simples imaginável. Se J^* é um valor do potencial correspondente a um ponto do espaço racional das q_i , então os restantes são $J^* + nh$, sendo n um número inteiro.

Adendo para correção. Outra reflexão trouxe como resultado o fato de que a segunda das condições indicadas na seção 4 para a aplicabilidade da fórmula (16) tem que ser sempre cumprida por si, isto é, vale a afirmação: se um movimento fornece um campo de p_i , este possui necessariamente um potencial J^* .

Segundo o teorema de Jacobi, cada movimento de um sistema originado de uma integral J^* completa pode ser deduzido de (9). Existe, portanto, em todo o caso, pelo menos uma função J^* das q_i , da qual podem ser calculadas as coordenadas de impulso p_i de um movimento com base nas equações

$$p_i = \frac{\partial J^*}{\partial q_i}$$

para cada ponto de sua órbita.

Precisamos nos lembrar agora que J^* é definida por uma equação diferencial parcial, que fornece uma instrução de como a função J^* deve ser continuada no espaço q_i . Se nós, portanto, quisermos saber como J^* se altera no decurso de um movimento, precisamos imaginar J^* continuada ao longo da órbita (juntamente com sua vizinhança) de acordo com a equação diferencial. Se agora a órbita, após certo tempo (muito longo), passar muito próxima de um ponto P já atravessado anteriormente pela curva da órbita, então $\partial J^*/\partial q_i$ nos fornece as coordenadas de impulso para ambos os tempos, desde que integremos J^* continuamente ao longo de todo o trecho intermediário da curva orbital. Que

se consiga de volta, com essa continuação, os valores anteriores de $\partial J^*/\partial q_i$, não é de se esperar de modo algum; é de se esperar muito mais, em geral, que toda vez que a configuração considerada das coordenadas q_i é outra vez aproximadamente alcançada no decurso do movimento, aparece outro valor das p_i totalmente diferente, de modo que se o movimento continua infinitamente é completamente impossível representar as p_i como função das q_i . Se, entretanto, as $p_i - e$ /ou um número finito de valores dessas grandezas – se repetem no retorno da configuração das coordenadas, então as $\partial J^*/\partial q_i$ podem ser apresentadas como funções das q_i para o movimento perpetuado infinitamente. Se existe, portanto, para o movimento perpetuado infinitamente um campo de p_i , então existe também sempre um potencial correspondente a J^* .

Podemos afirmar conseqüentemente o seguinte: existem l integrais das $2l$ equações de movimento da forma

$$R_k(q_i, p_i) = \text{const.}, \quad (19)$$

sendo R_k funções algébricas das p_i . Assim $\sum p_i dq_i$ é sempre uma diferencial total, pois as p_i , em virtude de (19), podem ser expressas em função das q_i . A condição quântica diz que a integral $\int \sum p_i dq_i$ estendida sobre uma curva irredutível deve ser um múltiplo de h . Esta condição quântica coincide com a de Sommerfeld-Epstein se, em especial, cada p_i depender apenas da q_i correspondente.

Se existirem menos do que l integrais do tipo (19), como é o caso, por exemplo, segundo Poincaré do problema dos três corpos, então as p_i não podem ser expressas através das q_i e a condição quântica de Sommerfeld-Epstein falha também na forma um pouco generalizada aqui apresentada.