

Hara Dessano Farias

*Função de Wigner, quasi-amplitudes de
probabilidades e sistemas dissipativos*

Dissertação apresentada ao Instituto de Física da Universidade de Brasília, para obtenção do título de mestre em Física

Orientador:
Ademir Eugênio de Santana

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
INSTITUTO DE FÍSICA

Brasília
dezembro de 2014

Dedicatória

Dedico este trabalho às duas mulheres da minha vida: minha mãe, Fátima Paes Loureiro e minha esposa, Aline Menezes Pereira. Dedico também aos meus amigos, em especial, Sérgio (Chico), Arthur, Renato, Maurício (Bart), Kleuber, Thiago (Valdico), Gustavo (Gus), Lott, Guilherme (Guigui), Tahan, Girão, Hugo (Buza) e Brunno. Ao meu irmão Tahian e ao meu primo Gabriel. Aos meus sogros, José Gonçalves e Josenira Menezes. Aos colegas da pós, Arthur (baiano), Akira, Neymar (Dr. Nepomucemo), Jucélia e José (Zé), pelas discussões e por partilharmos das mesmas angústias durante o processo. Aos professores Ademir e Marco Cezar pela recomendação à pós-graduação. Aos professores Ademir e Ronni pela orientação nesses dois anos.

Agradecimentos

À minha mãe, que durante todos esses anos me deu suporte, apoio incondicional em todas as decisões que tive que tomar, além de motivação para que eu continuasse minha pesquisa sempre de cabeça erguida.

À minha esposa, por nunca deixar me abater, por estar sempre ao meu lado nas horas mais difíceis e cansativas, por compreender a minha ausência nos momentos de lazer, por ser minha fiel escudeira, não deixando nada me atrapalhar e, por, com apenas com um sorriso, tornar minha jornada mais confortável.

À todos os meu amigos por estarem presentes nos momentos únicos que só a companhia de um amigo pode proporcionar. Sem vocês, como seria possível sorrir durante a escalada de uma montanha?

Aos professores Ademir e Ronni, pelo incentivo, motivação, apoio, mesmo com toda a minha falta de tempo.

E, é claro, à pessoa que inventou o afastamento remunerado para estudos.

"Nunca se vence uma guerra lutando sozinho."(Raul Seixas)

Resumo

Neste trabalho, explorando o conceito de grupo de Galilei, é deduzida uma teoria de representação para a mecânica quântica simplética consistente com o método da função de Wigner. É construído um espaço de Hilbert com uma estrutura simplética mediante o estudo de operadores unitários que fazem parte do grupo de rotação e do grupo de translação, cujos geradores satisfazem a álgebra de Galilei-Lie. Essa representação permite deduzir a equação de Schroedinger para funções de onda no espaço de fase, cujas variáveis carregam conteúdo de posição e *momentum* linear e estão associadas às funções de Wigner via o produto estrela, isto é, o produto de Moyal. Como aplicação, será resolvido o oscilador quântico amortecido.

Abstract

In this work, by exploring the concept of Galilei group, a representation for the symplectic quantum mechanics is derived consistently with the Wigner function method. A Hilbert space is built up endowed with a symplectic structure, by studying unitary operators describing rotations and translations, whose generators satisfy the Galilei-Lie algebra. Such a representation gives rise to the Shroedinger equation for wave functions in phase space, such that the dependent variables have the content of position and linear momentum. The wave functions are associated with the Wigner function through the Moyal product. As application, the quantum dissipative oscillator is solved.

Sumário

Lista de Figuras

1	Introdução	p. 9
2	Revisão do formalismo de Wigner	p. 12
2.1	Matriz densidade	p. 12
2.2	Definição da Função de Wigner	p. 14
2.3	Propriedades da Função de Wigner	p. 18
2.4	A função de Wigner na Óptica Quântica	p. 23
3	Propriedades Algébricas do Formalismo de Wigner	p. 31
3.1	Operadores na Representação de Wigner	p. 31
3.2	O Produto de Weyl-Moyal (produto-estrela)	p. 36
3.3	Propriedades do Produto-estrela	p. 37
3.4	Evolução Temporal da Função de Wigner	p. 43
3.5	Equação característica envolvendo a Função de Wigner	p. 45
4	Mecânica Quântica Simplética	p. 47
4.1	Estrutura Simplética	p. 48
4.2	Operadores lineares em H_Γ	p. 51
4.3	A equação de Schroedinger no espaço de fase	p. 62
4.4	<i>Quasi</i> -amplitudes de probabilidades	p. 65
4.5	Matriz densidade em H_Γ	p. 67

4.6	Teorema de Ehrenfest	p. 68
5	Osciladores Quânticos	p. 70
5.1	Oscilador Harmônico Quântico	p. 70
5.2	Oscilador amortecido no espaço de fase	p. 73
6	Conclusão e Perspectivas	p. 81
	Referências	p. 83

Lista de Figuras

1	Função de Wigner para o oscilador harmônico, estado fundamental . . .	p. 17
2	Função de Wigner para o oscilador harmônico, 1 ^o estado excitado . . .	p. 18
3	Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 0$	p. 78
4	Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 1$	p. 79
5	Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 2$	p. 79
6	Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 5$	p. 80
7	Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 10$	p. 80

1 *Introdução*

A primeira tentativa de uma formulação da mecânica quântica no espaço de fase foi proposta por Dirac, em 1930 [1]. Porém, seu formalismo não se conectava com a mecânica clássica. Em 1932, Wigner obteve sucesso [2]. Seu objetivo inicial era efetuar correções quânticas à mecânica estatística, onde os fatores de Boltzmann continham energias expressas tanto em função das coordenadas, quanto dos *momenta*. Ou seja, era necessário utilizar a noção de espaço de fase. Mapeando, entretanto, o espaço de fase da mecânica clássica Hamiltoniana em um espaço de fase quântico através da substituição das variáveis posição e *momentum* x e p , por operadores hermitianos \hat{x} e \hat{p} , respectivamente, que satisfazem a relação de comutação $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar\mathbf{1}$, nota-se que a noção de ponto é perdida e a constante de Planck, \hbar , dimensiona uma área mínima no espaço de fase (células de Bohr). Assim, as flutuações quânticas evitam a medida exata das variáveis dentro dessa célula. A noção de ponto fica recuperada quando tomamos o limite clássico, isto é, quando tomamos formalmente $\hbar \rightarrow 0$.

Esse formalismo proposto por Wigner tem se desenvolvido desde então, sendo aplicado em diversas áreas, como a física nuclear, física da matéria condensada [3]- [6], a óptica quântica [7]- [14], obtendo-se, inclusive, medidas diretas da função de Wigner em armadilhas de íons, por exemplo [15]. Nesse formalismo, o estado do sistema é descrito pela função de Wigner, $f_w(q, p)$, originalmente concebida para ser uma função de distribuição no espaço de fase. Mas, apesar de ser real e normalizada, ela pode assumir valores negativos, o que contraria o sentido usual da ideia de distribuição. Por esse motivo ela é conhecida como uma função de *quasi*-distribuição. Uma outra característica é que as variáveis dinâmicas são representadas por funções sobre o espaço de fase e não por operadores. Nesse formalismo de Wigner, cada operador representado por A e definido em um espaço de Hilbert, H , é associado a uma função, denotada por $a_w(q, p)$, no espaço de fase, Γ [16]. Esta associação consiste em uma aplicação $\Omega_w : A \rightarrow a_w(q, p)$ tal que a álgebra associativa de operadores em H corresponde a uma álgebra também associativa, mas não-comutativa em Γ . Portanto, o produto de operadores, em H , fica definido em

Γ pelo chamado produto-estrela, ou produto de Moyal. O produto de dois operadores é mapeado, então, da seguinte forma $\Omega_w : AB \rightarrow a_w(q, p) \star b_w(q, p)$. Assim, o produto estrela de duas funções no espaço de fase corresponde ao produto de operadores no espaço de Hilbert e é definido por [16]

$$a_w(q, p) \star b_w(q, p) = a_w(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2} (\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)} b_w(q, p).$$

É importante notar que o produto acima pode ser visto como uma aplicação do operador $\hat{A} = a_w \star$ atuando sobre uma função b_w , ou seja $\hat{A}(b_w) = a_w \star b_w$.

No formalismo de Wigner o produto de Moyal torna-se imprescindível, pois ao representar o estado de um sistema, a função de Wigner obedece a uma equação análoga à de Liouville - von Neumann, com o parenteses de Moyal substituindo o comutador, isto é

$$i\hbar \frac{\partial f_w(q, p, t)}{\partial t} = \{H_w, f_w\}_M = H_w \star f_w - f_w \star H_w.$$

Usando as propriedades do produto de Moyal, é possível construir problemas de autovalor dentro do formalismo de Wigner, sendo, portanto, considerado como uma descrição alternativa da mecânica quântica à de Schroedinger, à de Heisenberg ou à das integrais de caminho. Por outro lado, para se conseguir a descrição completa de um sistema quântico no espaço de fase Γ é necessário:

1. escrever a equação de Schroedinger do problema;
2. introduzir o operador densidade e em seguida, a equação de Liouville-von Neumann;
3. determinar a função de Wigner.

Este procedimento é intrincado, principalmente quando lidamos com sistemas não-lineares ou sistemas quânticos relativísticos, pois a construção de simetrias de calibre ainda não é bem compreendida nesse formalismo, além do que não é possível visualizar efeitos de superposição. Uma solução para estas dificuldades foi proposta por Oliveira *et al.* [17]- [19]. Estudando representações unitárias da álgebra de Lie do grupo de Galilei e utilizando a noção de uma estrutura simplética associada ao produto de Moyal, a função de Wigner é obtida por um caminho alternativo ao da equação de Liouville-von Neumann. Nesse formalismo, a equação de Schroedinger no espaço de fase é deduzida de maneira consistente. À procura de resultados relativísticos, utilizando operadores do tipo $a_w \star$ para estudar representações unitárias e irredutíveis do grupo de Poincaré, Amorim *et al.* [20] mostrou como escrever as equações de Klein-Gordon e de Dirac no espaço de fase.

Nesse trabalho, após uma revisão da função de Wigner e de suas propriedades, exploramos as propriedades algébricas do produto estrela. Com esse ferramental matemático é construída uma estrutura simplética utilizando o conceito do grupo de Lie das simetrias galileanas (e não a álgebra de Lie), na qual $\{q, p\}$ correspondem às coordenadas no espaço de fase Γ , formando uma base para a construção de funções de onda no espaço de Hilbert H_Γ . Tais funções são interpretadas como *quasi*-amplitudes de probabilidades sendo associadas à função de Wigner de maneira que os resultados físicos sejam obtidos coerentemente. Aplicaremos esse formalismo ao oscilador amortecido quântico, obtendo as funções de Wigner para cada estado.

A apresentação desse trabalho está disposta da seguinte maneira. No Capítulo 2 revisaremos o método da função de Wigner, explorando suas principais propriedades. Ainda nesse capítulo, uma pequena revisão da função de Wigner aplicada a alguns estados estudados na ótica quântica também será feita. No Capítulo 3 veremos como os operadores se comportam na representação de Wigner, além de definirmos o produto de Moyal e estudarmos suas propriedades, o que será fundamental para encontrarmos uma equação que governe a evolução temporal da função de Wigner. No Capítulo 4 será construído um formalismo alternativo daqueles existentes na literatura para a mecânica quântica no espaço de fase adotando uma estrutura simplética. Serão obtidos operadores unitários representados por funções em Γ , que possuem uma interpretação física coerente, satisfazendo a álgebra de Galilei-Lie e tornando possível escrever a equação de Schroedinger no espaço de fase. No Capítulo 5 aplicamos esse formalismo no problema do oscilador harmônico e do oscilador amortecido no espaço de fase. No Capítulo 6 apresentamos nossas conclusões finais e perspectivas.

2 *Revisão do formalismo de Wigner*

Em 1932, Wigner [2] percebeu que para altas temperaturas, a probabilidade de uma configuração dada pela teoria clássica de Boltzmann é também compatível com a teoria quântica. Porém, para baixas temperaturas era necessária uma correção. Para isso, foi introduzida uma função capaz de calcular probabilidades tanto nas coordenadas quanto nos *momenta*. Tal função é conhecida, hoje, como função de Wigner, que estatisticamente, representa uma função de *quasi*-distribuição (ou *quasi*-probabilidade) no espaço de fase. O formalismo proposto por Wigner tem sido utilizado em diversas áreas como óptica quântica e física da matéria condensada, tendo inclusive sua medição sendo realizada em experimentos de cavidade quântica [15]. Esse capítulo é dedicado à revisão desse formalismo, definindo a função de Wigner através da matriz densidade e explorando suas propriedades. Por último, será introduzido o produto estrela, ferramenta necessária para o desenvolvimento da mecânica quântica simplética e suas propriedades. A revisão é baseada nas referências [18] - [21].

2.1 Matriz densidade

O conceito de probabilidade surge naturalmente quando se trata com problemas de muitas partículas. Nesse universo, as ideias da mecânica clássica dão suporte para a formulação da mecânica estatística. Assim, um ponto no espaço de fase representa o estado do sistema e sua evolução temporal é caracterizada por uma trajetória bem definida nesse espaço. Mas, no âmbito microscópico é impossível conhecer as condições iniciais, tornando essa trajetória não definida. Na mecânica quântica, uma forma de lidar com esse problema é representar o estado macroscópico de um sistema como sendo constituído

de uma infinidade de estados microscópicos (ensemble) através do operador densidade ¹

$$\rho = \sum_i \omega_i |\psi_i(t)\rangle \langle \psi_i(t)|, \quad (2.1)$$

onde $\{|\psi_i\rangle\}$ são os estados microscópicos possíveis do ensemble estatístico e $\omega_i = \frac{N_i}{N}$ é o peso estatístico para o estado quântico $|\psi_i\rangle$. Considera-se que a matriz densidade ρ contém todas as informações sobre o sistema e permite descrever qualquer sistema físico. Para estados puros, teremos

$$\rho(t) = |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)|. \quad (2.2)$$

O valor esperado de um operador A na formulação da mecânica quântica estatística usual é dado por

$$\langle A \rangle = Tr(\rho A) = Tr(A\rho), \quad (2.3)$$

com a matriz densidade, ρ , apresentando as seguintes propriedades,

(i) hermiticidade: $\rho^\dagger = \rho$;

(ii) traço: $Tr\rho = 1$.

Para completar esse formalismo falta somente a equação que governa a evolução temporal do operador densidade ρ . Essa equação surge naturalmente da equação de Schrödinger,

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H(t) |\psi(t)\rangle,$$

onde H representa a energia total do sistema.

Derivando a matriz densidade, dada na Eq. (2.2), temos

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= \left(\frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle \right) \langle \psi(t)| + |\psi(t)\rangle \left(\frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t)| \right) \\ &= \frac{1}{i\hbar} H(t) |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| + \frac{1}{-i\hbar} |\psi(t)\rangle \langle \psi(t)| H(t). \end{aligned}$$

Portanto, obtemos

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)]. \quad (2.4)$$

Essa é a equação que determina a evolução temporal do operador densidade, conhecida como equação de Liouville-von Neumann.

¹A notação utilizada nesse trabalho será da seguinte forma: operadores usuais da mecânica quântica não apresentarão *chapéu* e quando representados pelo alfabeto latino apresentarão letras maiúsculas. O *chapéu* será utilizado para representar os operadores estrelas que serão construídos ao longo do texto.

A partir de ρ é possível introduzir uma formulação da mecânica quântica no espaço de fase, conhecida como método da função de Wigner. A próxima seção será baseada na referência [21].

2.2 Definição da Função de Wigner

Na mecânica quântica usual os operadores correspondentes aos observáveis posição e momento obedecem às conhecidas relações de comutação

$$[Q, Q] = [P, P] = 0 \quad e \quad [Q, P] = i\hbar \mathbf{1}$$

e às equações de autovalores

$$P|p\rangle = p|p\rangle \quad e \quad Q|q\rangle = q|q\rangle.$$

Os autovetores dos operadores posição Q e *momentum* P formam um conjunto completo no espaço de Hilbert, o que permite escrever as relações de completudeza

$$\int |q\rangle\langle q|dq = \mathbf{1}$$

$$\int |p\rangle\langle p|dp = \mathbf{1}$$

Além de serem ortonormalizados, ou seja

$$\langle q|q'\rangle = \delta(q - q')$$

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p - p').$$

Assim, é possível reescrever um operador arbitrário A que atua nos autovetores do espaço de Hilbert da seguinte maneira

$$A \equiv \int |q''\rangle\langle q''|p''\rangle\langle p''|A|p'\rangle\langle p'|q'\rangle\langle q'|dq'dq''dp'dp''. \quad (2.5)$$

Fazendo a seguinte mudança de variável

$$2p = p' + p'' \quad 2q = q' + q''$$

e

$$k = p'' - p' \quad z = q'' - q',$$

que possui jacobiano igual a 1 e utilizando a função de onda associada ao autovetor do momento na representação da posição

$$\langle q|p\rangle = \frac{e^{\frac{ipq}{\hbar}}}{\sqrt{2\pi\hbar}},$$

a Eq. (2.5) fica dada por

$$A \equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{iqk}{\hbar}} \langle p + \frac{k}{2} | A | p - \frac{k}{2} \rangle e^{\frac{ipz}{\hbar}} | q + \frac{z}{2} \rangle \langle q - \frac{z}{2} | dq dp dz dk.$$

Reorganizando os termos dentro dessa integral de modo que

$$a_w(q, p) \equiv \int e^{\frac{iqk}{\hbar}} \langle p + \frac{k}{2} | A | p - \frac{k}{2} \rangle dk \quad (2.6)$$

e

$$\Delta(q, p) \equiv \int e^{\frac{ipz}{\hbar}} | q + \frac{z}{2} \rangle \langle q - \frac{z}{2} | dz, \quad (2.7)$$

a Eq. (2.5) leva então a

$$A \equiv \frac{1}{2\pi\hbar} \int a_w(q, p) \Delta(q, p) dq dp. \quad (2.8)$$

Como estamos lidando com uma teoria no espaço de fase, é interessante que tenhamos uma simetria entre as variáveis q e p . Assim, de forma análoga, podemos expressar as Eq. (2.6) e (2.7) na forma

$$a_w(q, p) \equiv \int e^{\frac{-ipz}{\hbar}} \langle q + \frac{z}{2} | A | q - \frac{z}{2} \rangle dz \quad (2.9)$$

e

$$\Delta(q, p) \equiv \int e^{\frac{-iqk}{\hbar}} | p + \frac{k}{2} \rangle \langle p - \frac{k}{2} | dk. \quad (2.10)$$

A função $a_w(q, p)$, em suas duas formas, é chamada de *transformada de Weyl* do operador A . Se esse operador for hermitiano, o operador $\Delta(q, p)$ também o será e a função $a_w(q, p)$, será real. Nota-se, então, que nessa forma de tratar a mecânica quântica, os operadores hermitianos são representados por funções reais (do tipo *c-number*).

A função de Wigner é definida como a *transformada de Weyl* do operador densidade, introduzido na Eq. (2.1), a menos de um fator de normalização. Portanto,

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle \quad (2.11)$$

ou

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dk e^{\frac{-iqk}{\hbar}} \langle p - \frac{k}{2} | \rho | p + \frac{k}{2} \rangle. \quad (2.12)$$

Fica evidente que a função de Wigner é real e é representada por uma transformada de Fourier dos elementos não diagonais da matriz densidade. Note que apesar de estarmos trabalhando com apenas uma dimensão, a generalização para casos que possuam maior número dimensional pode ser feita sem maiores problemas.

O operador densidade, dado pela Eq. (2.1), descreve estados mistos, porém vamos considerar somente estados puros (Eq. (2.2)) já que o foco deste trabalho não está na mecânica estatística. Deste modo, a definição da função de Wigner se reduz a,

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{ipz}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right) dz. \quad (2.13)$$

Analisando a função acima, podemos obter uma interpretação mais prática. Primeiro, notemos que

$$\left\langle q + \frac{z}{2} \middle| p \right\rangle \left\langle p \middle| q - \frac{z}{2} \right\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}pz}.$$

Então a função de Wigner, dada na Eq. (2.13) pode ser escrita na forma

$$f_w(q, p) = \int \langle \psi | q + \frac{z}{2} \rangle \langle q + \frac{z}{2} | p \rangle \langle p | q - \frac{z}{2} \rangle \langle q - \frac{z}{2} | \psi \rangle dz.$$

Os brackets na expressão acima podem ser interpretados da seguinte maneira:

- $\langle q - \frac{z}{2} | \psi \rangle$ é a amplitude de uma partícula no estado ψ estar na posição $q - \frac{z}{2}$;
- $\langle p | q - \frac{z}{2} \rangle$ é a amplitude de uma partícula na posição $q - \frac{z}{2}$ ter momento p ;
- $\langle q + \frac{z}{2} | p \rangle$ é a amplitude de uma partícula com momento p estar na posição $q + \frac{z}{2}$;
- $\langle \psi | q + \frac{z}{2} \rangle$ é a amplitude de uma partícula na posição $q + \frac{z}{2}$ ainda estar no estado ψ .

A integração sobre z fornece a função de Wigner, que representa a superposição de todas as possíveis trajetórias quânticas do estado ψ entre as posições $q - \frac{z}{2}$ e $q + \frac{z}{2}$, que se interferem construtivamente e destrutivamente, provendo uma distribuição de *quasi*-probabilidade no espaço de fase, não podendo ser, portanto, interpretada como uma distribuição de probabilidades, pois apesar de ser real, pode assumir valores negativos.

Tomemos como exemplo o oscilador harmônico. Em unidades atômicas e tomando $m = \omega = 1$, o hamiltoniano fica dado por

$$H = \frac{p^2 + q^2}{2},$$

e as soluções para o estado fundamental e para o primeiro estado excitado são, respectivamente,

$$\psi_0(q) = \left(\frac{1}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{q^2}{2}}$$

e

$$\psi_1(q) = \left(\frac{4}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} x e^{-\frac{q^2}{2}}.$$

A função de Wigner correspondente a cada estado pode ser calculada através da Eq. (2.13). Então, para o estado fundamental

$$\begin{aligned} f_w^0(q, p) &= \int e^{ipz} \psi_0^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi_0\left(q - \frac{z}{2}\right) dz \\ f_w^0(q, p) &= \frac{1}{\pi} e^{-(q^2+p^2)}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

E, para o primeiro estado excitado

$$\begin{aligned} f_w^1(q, p) &= \int e^{ipz} \psi_1^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi_1\left(q - \frac{z}{2}\right) dz \\ f_w^1(q, p) &= \frac{1}{\pi} e^{-(q^2+p^2)} (2p^2 + 2q^2 - 1). \end{aligned} \quad (2.15)$$

As funções dadas pelas Eqs.(2.14) e (2.15) possuem os seguintes comportamentos no espaço de fase, dadas nas Fig. 1 e 2, respectivamente,

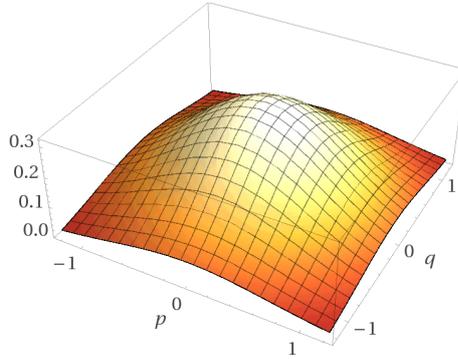


Figura 1: Função de Wigner para o oscilador harmônico, estado fundamental

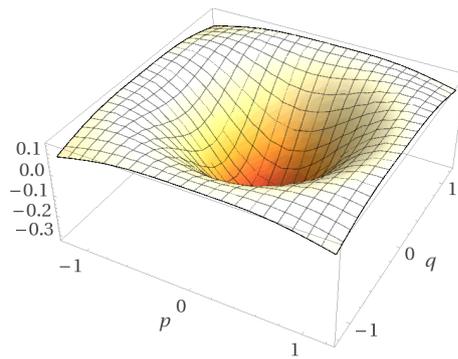


Figura 2: Função de Wigner para o oscilador harmônico, 1^o estado excitado

Se fizermos o produto escalar das funções de Wigner associadas a cada estado no espaço de fase, teremos

$$\int f_w^0(q, p) f_w^1(q, p) dq dp = 0.$$

Esse resultado mostra que a função de Wigner, apesar de ser real, pode assumir valores negativos. Portanto, não pode ser interpretada como uma distribuição de probabilidades no espaço de fase. Generalizando, se f_ψ e f_ϕ são duas funções de Wigner associadas, respectivamente, aos estados $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$, então

$$|\langle \psi | \phi \rangle|^2 = 2\pi\hbar \int f_\psi^\dagger(q, p; t) f_\phi(q, p; t) dq dp. \quad (2.16)$$

O produto entre os estados pode ser positivo ou nulo, caso sejam ortogonais como mostrado para o oscilador harmônico. Se for esse o caso, a integral é nula. Porém, as funções f_ψ e f_ϕ não são necessariamente nulas, nos forçando a concluir que podem assumir valores negativos. Por esse motivo a função de Wigner é conhecida como uma distribuição de *quasi*-probabilidade, já que, quando integrada, pode ser interpretada como uma distribuição de probabilidades de variáveis físicas, como veremos a seguir.

2.3 Propriedades da Função de Wigner

O fato da função de Wigner assumir valores negativos é motivo de muita discussão na literatura. Essas regiões são associadas a não classicidade de um sistema, e nos força a não aceitar a função de Wigner como uma distribuição de probabilidades. Porém, densidades de probabilidades são conseguidas se a integramos. Ou seja, a função de Wigner possui certas propriedades inerentes à interpretação física de um sistema.

Primeiramente, nota-se que a função de Wigner é limitada. Tomemos como

exemplo um estado puro, dado pela Eq. (2.13),

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{ipz}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right) dz.$$

Se definirmos as funções de onda normalizadas

$$\varphi_1(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-\frac{ipz}{\hbar}} \psi\left(x + \frac{z}{2}\right) \quad e \quad \varphi_2(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} \psi\left(x - \frac{z}{2}\right),$$

vemos que a função de Wigner pode ser interpretada como o produto escalar

$$f_w(q, p) = \frac{1}{\pi\hbar} \int dz \varphi_1^\dagger(z) \varphi_2(z) = \frac{1}{\pi\hbar} \langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle,$$

e, portanto,

$$|f_w(q, p)| = \frac{1}{\pi\hbar} |\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|.$$

Utilizando a desigualdade de Cauchy-Schwarz

$$|\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \leq \langle \varphi_1 | \varphi_1 \rangle \langle \varphi_2 | \varphi_2 \rangle,$$

temos que, já que as funções φ_1 e φ_2 são normalizadas,

$$|\langle \varphi_1 | \varphi_2 \rangle|^2 \leq 1.$$

Portanto,

$$|f_w(q, p)| \leq \frac{1}{\pi\hbar}. \quad (2.17)$$

Assim, a função de Wigner para sistemas puros normalizados não pode assumir valores maiores que $\frac{1}{\pi\hbar}$.

Densidades de probabilidades são obtidas integrando a função de Wigner no espaço de fase. Vamos começar integrando a função de Wigner em relação a p .

$$\int dp f_w(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp dz \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle e^{\frac{ipz}{\hbar}}.$$

Se recordarmos que a função delta de Dirac, em sua forma integral, é expressa por $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ikx} dk$, podemos encontrá-la reorganizando os termos dentro da integral acima.

$$\int dp f_w(q, p) = \int dz \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp e^{\frac{ipz}{\hbar}} \right).$$

Notamos, dessa forma que o termo entre parênteses é a função delta de Dirac $\delta(z)$. Assim,

$$\int dp f_w(q, p) = \int dz \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle \delta(z).$$

Lembrando que a função delta tem a propriedade $\int f(x)\delta(x)dx = f(0)$, encontramos o seguinte

$$\int dp f_w(q, p) = \langle q | \rho | q \rangle.$$

Essa propriedade mostra a densidade de probabilidade de se encontrar uma partícula entre q e $q + dq$.

Analogamente, podemos integrar a função de Wigner em q .

$$\int dq f_w(q, p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp dk \langle p - \frac{k}{2} | \rho | p + \frac{k}{2} \rangle e^{\frac{-iqk}{\hbar}}.$$

Novamente, separando as integrais

$$\int dq f_w(q, p) = \int dk \langle p - \frac{k}{2} | \rho | p + \frac{k}{2} \rangle \left(\frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dq e^{\frac{-iqk}{\hbar}} \right),$$

notamos que o termo entre parenteses é a função delta de Dirac, $\delta(k)$, e assim

$$\int dq f_w(q, p) = \int dk \langle p - \frac{k}{2} | \rho | p + \frac{k}{2} \rangle \delta(k).$$

Utilizando, outra vez, a definição da delta, tem-se

$$\int dq f_w(q, p) = \langle p | \rho | p \rangle,$$

que expressa a densidade de probabilidades para se encontrar uma partícula com momento entre p e $p + dp$.

É interessante notar que a integração em p revela uma densidade de probabilidade nas coordenadas e em q , nos *momenta*. Mas, além disso, podemos também integrar sobre todo o espaço de fase. Então,

$$\int f_w(q, p) dq dp = (2\pi\hbar)^{-1} \int dz dq dp \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Se for calculada a integral na variável p , tem-se

$$\int f_w(q, p) dq dp = \int dz dq \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle \left((2\pi\hbar)^{-1} \int dp e^{\frac{ipz}{\hbar}} \right),$$

onde o termo entre parenteses é a função delta de Dirac. Com isso, temos

$$\begin{aligned} \int f_w(q, p) dq dp &= \int dz dq \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle \delta(z) \\ &= \int dq \langle q | \rho | q \rangle = \text{Tr} \rho = 1. \end{aligned}$$

Ou seja, a função de Wigner é normalizada, o que expressa uma consistência com a normalização da matriz densidade. Agora, se a integração sobre o espaço de fase for realizada em um produto de duas funções de Wigner referentes a dois estados distintos, caracterizados por ρ_1 e ρ_2 , encontraremos uma propriedade que diz respeito ao traço do produto de duas matrizes de densidade. Dessa forma, usando a Eq. (2.11), segue que

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int dqdp dz_1 dz_2 e^{\frac{ip}{\hbar}(z_1+z_2)} \langle x - \frac{z_1}{2} | \rho_1 | x + \frac{z_1}{2} \rangle \langle x - \frac{z_2}{2} | \rho_2 | x + \frac{z_2}{2} \rangle.$$

A integração em p revela-se uma delta de Dirac, $\delta(z_1 + z_2)$, de forma que, após integrarmos em z_2 , teremos

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx dz_1 \langle x - \frac{z_1}{2} | \rho_1 | x + \frac{z_1}{2} \rangle \langle x + \frac{z_1}{2} | \rho_2 | x - \frac{z_1}{2} \rangle.$$

Fazendo a mudança de variáveis

$$x' = x - \frac{z_1}{2} \quad x'' = x + \frac{z_1}{2},$$

chegamos a

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx' dx'' \langle x'' | \rho_1 | x' \rangle \langle x' | \rho_2 | x'' \rangle.$$

Utilizando a relação de fechamento, temos

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx'' \langle x'' | \rho_1 \rho_2 | x'' \rangle,$$

que pode ser escrito como

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \text{Tr}(\rho_1 \rho_2).$$

Ou seja, o traço do produto de dois operadores densidade pode ser determinado pelo produto das funções de Wigner correspondente integrado sobre todo o espaço de fase. Se for considerado o estado puro, dado pela Eq. (2.2), associado ao fato que $\text{Tr}|u\rangle\langle v| = \langle v|u\rangle$, temos

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} |\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle|^2.$$

Note que caso os estados sejam ortogonais, isto é, $\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle = 0$, então

$$\int dqdp f_{w_1}(q, p) f_{w_2}(q, p) = 0.$$

Resultado que nos leva a concluir que a função de Wigner pode assumir valores negativos, sendo interpretada como uma função de quasi-probabilidades, como já foi discutido na Eq. (2.16).

A parte negativa da função de Wigner pode ser vista como um fator de não classicidade de um estado, pois para interpretá-la como uma distribuição clássica de probabilidades seria necessária sua não-negatividade. Porém, isso só acontece com os estados coerentes e com os estados de vácuo comprimido, pois possuem comportamento análogo ao clássico. Portanto, a negatividade da função de Wigner pode ser interpretada como uma assinatura do nível quântico do sistema. É possível obter um indicador da não classicidade de um sistema através do volume da parte negativa da função de Wigner [22]. O dobro do volume da parte negativa pode ser escrito como

$$\eta(\psi) = \int dqdp\{|f_w(q,p)| - f_w(q,p)\}.$$

Assim, $\eta(\psi)$ corresponde a um indicador de negatividade para um estado $|\psi\rangle$, que, utilizando o fato que a função de Wigner é normalizada, pode ser escrito como

$$\eta(\psi) = \int dqdp|f_w(q,p)| - 1. \quad (2.18)$$

Note que, por definição, η deve ser igual a zero para os estados coerentes e estados de vácuo comprimido.

Em resumo, podemos listar as propriedades vistas até aqui.

- Propriedade 2.3.1

$$|\psi(q)|^2 = \int f_w(q,p)dp = \langle q|\rho|q\rangle \quad (2.19)$$

- Propriedade 2.3.2

$$|\tilde{\psi}(p)|^2 = \int f_w(q,p)dq = \langle p|\rho|p\rangle \quad (2.20)$$

- Propriedade 2.3.3

$$\int f_w(q,p)dqdp = Tr\rho = 1 \quad (2.21)$$

2.4 A função de Wigner na Óptica Quântica

O estudo da interface entre a física quântica e a clássica tem inspirado diversos trabalhos, principalmente na óptica quântica, na qual encontra-se frequentemente problemas na caracterização de campos, que possuem comportamento aparentemente clássico, mas com importantes aspectos quânticos. Para isso é necessário investigar que tipo de estado quântico pode ser visto como o mais próximo possível de um estado clássico, isto é, aquele que possui a menor incerteza possível nas variáveis posição, *momentum* e energia, simultaneamente. O estado coerente, definido como o autoestado do operador destruição, [23]

$$A|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle, \quad (2.22)$$

satisfaz essas condições. Aqui, α corresponde ao autovalor do operador destruição A .

Vamos considerar o caso do oscilador harmônico como ilustração. Seu hamiltoniano é dado por

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 Q^2}{2},$$

onde $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$, P e Q são os operadores correspondentes ao *momentum* e à posição, respectivamente. O operador destruição A e seu conjugado, o operador criação A^\dagger , são definidos como [24]

$$A = \sqrt{\frac{k}{2\hbar\omega}}Q + \frac{iP}{\sqrt{2\hbar\omega m}} \quad (2.23)$$

$$A^\dagger = \sqrt{\frac{k}{2\hbar\omega}}Q - \frac{iP}{\sqrt{2\hbar\omega m}}.$$

Dessa forma,

$$H = \hbar\omega\left(A^\dagger A + \frac{1}{2}\right) \quad [A, A^\dagger] = 1.$$

e,

$$[H, A] = -\hbar\omega A \quad [H, A^\dagger] = \hbar\omega A^\dagger.$$

A equação de autovalores para o hamiltoniano é escrita como

$$H|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle,$$

e, portanto

$$HA^\dagger|E_n\rangle = (E_n + \hbar\omega)|E_n\rangle$$

e

$$HA|E_n\rangle = (E_n - \hbar\omega)|E_n\rangle.$$

Segue que podemos obter uma sequência de autovalores na forma $E \pm n\hbar\omega$ para qualquer inteiro n . Considerando que E_0 seja o menor valor possível para a energia, a sequência deve terminar de forma que

$$A|E_0\rangle = 0.$$

Portanto, $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ e os autovalores do hamiltoniano são $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$. Definimos então o operador número $N = A^\dagger A$, que obedece à equação de autovalor

$$N|n\rangle = n|n\rangle.$$

Como o hamiltoniano H e o operador número N são observáveis, o estado $|n\rangle$ forma uma base ortonormal na representação de n . Assim,

$$\langle n|n'\rangle = \delta_{nn'} \quad e \quad \sum_0^\infty |n\rangle\langle n| = 1.$$

E então, podemos deduzir que

$$A|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle$$

e

$$A^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle.$$

Aplicando o operador A^\dagger no estado $|0\rangle$ chegaremos à seguinte relação

$$|n\rangle = \frac{(A^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad (2.24)$$

Como n representa o número de *quanta* de energia de um determinado estado, na óptica quântica, n corresponde ao número de fótons e o estado $|0\rangle$, ao estado de vácuo.

Para encontrarmos os estados coerentes, precisamos resolver a equação de autovalores que o define, dado pela Eq. (2.22). Porém, note que como A não é hermitiano, seu autovalor α pode não ser real e $|\alpha\rangle$ pode não formar uma base ortogonal. Vamos, então, expandir o estado coerente usando a relação de fechamento escrita na representação de n

$$|\alpha\rangle = \sum_0^\infty |n\rangle\langle n|\alpha\rangle = \sum_0^\infty c_n(\alpha)|n\rangle.$$

Substituindo essa expansão na Eq. (2.22), temos

$$A|\alpha\rangle = \sum_{n=1}^\infty c_n(\alpha)\sqrt{n}|n-1\rangle = \sum_0^\infty \alpha c_n(\alpha)|n\rangle.$$

Como o termo para $n = 0$ é nulo, a primeira soma corre de $n = 1$ até ∞ . Fazendo a mudança $n \rightarrow n + 1$, ficamos com

$$\sum_{n=0}^{\infty} c_{n+1}(\alpha) \sqrt{n+1} |n\rangle = \sum_0^{\infty} \alpha c_n(\alpha) |n\rangle.$$

Multiplicando ambos os lados por $\langle n'|$ usando o fato que $\langle n'|n\rangle = \delta_{nn'}$, encontramos a relação de recorrência

$$c_{n+1}(\alpha) \sqrt{n+1} |n\rangle = \alpha c_n(\alpha),$$

e, portanto

$$c_n(\alpha) = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} c_0.$$

A constante c_0 pode ser encontrada através da normalização

$$\langle \alpha | \alpha \rangle = 1 = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\alpha^{*m} \alpha^n}{\sqrt{m!n!}} \langle m | n \rangle,$$

e então,

$$c_0 = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}.$$

Assim,

$$\langle n | \alpha \rangle = c_n(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}},$$

e o estado coerente fica dado por

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (2.25)$$

Em relação ao estado de vácuo, podemos usar a Eq. (2.24) para chegar a

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}} e^{\alpha A^\dagger} |0\rangle. \quad (2.26)$$

Note que

$$|\langle n | \alpha \rangle|^2 = e^{-|\alpha|^2} \frac{|\alpha|^{2n}}{n!},$$

isto é, a probabilidade de termos n fótons é representada por uma distribuição de Poisson.

Uma importante propriedade dos estados coerente é que eles não são ortogonais. Isso pode ser visto através do produto escalar de dois estados coerentes com o auxílio da Eq. (2.25)

$$\langle \beta | \alpha \rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\beta^{*m}}{\sqrt{m!}} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle m | n \rangle,$$

o que nos leva a

$$\langle \beta | \alpha \rangle = e^{-\frac{|\alpha|^2 + |\beta|^2}{2} + \alpha \beta^*}.$$

Então,

$$|\langle \beta | \alpha \rangle|^2 = e^{-|\alpha - \beta|^2},$$

isto é, os estados tornam-se aproximadamente ortogonais com o aumento de $|\alpha - \beta|^2$. Uma consequência desse resultado é que o estado coerente forma um conjunto super-completo de estados, onde a relação de fechamento, assumindo α complexo, é dada por

$$\int \frac{d^2\alpha}{\pi} |\alpha\rangle\langle\alpha| = 1, \quad (2.27)$$

onde 1 é o operador identidade.

Para verificarmos que o estado coerente corresponde a um estado de incerteza mínima é necessário calcular os valores esperados dos operadores Q , P , Q^2 e P^2 . Usando as Eqs.(2.22) e (2.23), temos que

$$\begin{aligned} \langle Q \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle \alpha | A + A^\dagger | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\alpha + \alpha^*) \\ \langle P \rangle &= i\sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} \langle \alpha | A - A^\dagger | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\hbar m\omega}{2}} (\alpha - \alpha^*) \end{aligned} \quad (2.28)$$

$$\begin{aligned} \langle Q^2 \rangle &= \frac{\hbar}{2m\omega} (\alpha^{*2} + \alpha^2 + 2\alpha^*\alpha + 1) \\ \langle P^2 \rangle &= \frac{\hbar m\omega}{2} (\alpha^{*2} + \alpha^2 - 2\alpha^*\alpha - 1). \end{aligned}$$

Portanto,

$$(\Delta Q)^2 = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}$$

e

$$(\Delta P)^2 = \langle P^2 \rangle - \langle P \rangle^2 = \frac{\hbar m\omega}{2},$$

ou seja,

$$\Delta Q \Delta P = \frac{\hbar}{2},$$

que é o menor valor permitido pelo princípio da incerteza. Assim, o limite clássico da mecânica quântica pode ser dado pela descrição de um estado coerente.

Através da relação de fechamento, dada pela Eq. (2.27), é possível expandir qualquer operador definido no espaço de Hilbert em termos do estado coerente. Ou ainda, podemos expressar o operador densidade em termos de uma função, do tipo *c-number*, de uma variável α do estado coerente. Isso pode ser realizado por diferentes maneiras, sendo a representação Q de Husimi, a P de Glauber e a de Wigner as mais comuns. Na

representação Q , a ideia é gerar uma densidade de probabilidades usando os elementos diagonais do operador densidade na representação do estado coerente. Na representação P , o operador densidade é representado pelo conjunto estatístico de estados coerentes. Na representação de Wigner, o objetivo é construir uma função de distribuição conjunta das variáveis canonicamente conjugadas, q e p , que se assemelhasse a uma distribuição clássica de probabilidades. Portanto, as funções Q de Husimi, P de Glauber, e de Wigner são definidas, em termos do estado coerente, respectivamente, como ([25] e [26])

$$Q(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi} \langle \alpha | \rho | \alpha \rangle, \quad (2.29)$$

$$\rho = \int d^2\alpha P(\alpha, \alpha^*) |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (2.30)$$

e

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda e^{-\lambda\alpha^* + \lambda^*\alpha} Tr\{\rho e^{\lambda A^\dagger - \lambda^* A}\}, \quad (2.31)$$

onde $\chi(\lambda, \lambda^*) = Tr\{\rho e^{\lambda A^\dagger - \lambda^* A}\}$ corresponde à função característica, isto é, sua transformada de Fourier determina a função de Wigner. Todas as funções são normalizadas e representam *quasi*-distribuições no espaço de fase. A Eq. (2.31) corresponde à mesma daquela representada pelas variáveis q e p , dada pela Eq. (2.11).

Para demonstrar esse fato, primeiramente vamos reorganizar a Eq. (2.31) da seguinte maneira

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda Tr\{\rho e^{\lambda(A^\dagger - \alpha^*) + \lambda^*(\alpha - A)}\}, \quad (2.32)$$

já que λ e α são números complexos e não operadores. De acordo com a Eq. (2.28), temos que

$$\alpha = \sqrt{\frac{\eta}{2}} \langle Q \rangle + \frac{i \langle P \rangle}{\hbar \sqrt{2\eta}}, \quad (2.33)$$

onde $\eta = \frac{m\omega}{\hbar}$. Substituindo a Eq. (4.30) na Eq. (4.29) e fazendo $\langle Q \rangle = q$ e $\langle P \rangle = p$, segue que

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda Tr\{\rho e^{\sqrt{\frac{\eta}{2}}(q-Q)(\lambda-\lambda^*) - \frac{i}{\hbar\sqrt{2\eta}}(p-P)(\lambda+\lambda^*)}\}.$$

A integral é realizada no plano complexo, de modo que $\lambda = \lambda_R + i\lambda_i$ e $d\lambda = d\lambda_R d\lambda_i$. Assim, fazendo a mudança de variáveis

$$\mu = \sqrt{2\eta}\lambda_i \quad e \quad \sigma = \frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{\eta}} \lambda_R,$$

encontramos

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \int d\mu d\sigma Tr(\rho e^{i\mu(Q-q) - i\sigma(P-p)}). \quad (2.34)$$

A mudança de variáveis precisa ser compensada de modo que a probabilidade seja con-

servada. Assim,

$$f_w(\alpha, \alpha^*) d\alpha d\alpha^* = f_w(q, p) dq dp,$$

e, portanto,

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\hbar} f_w(\alpha, \alpha^*).$$

Substituindo esse resultado na Eq. (2.34), e introduzindo a relação de fechamento na representação da posição, $\int dq' |q'\rangle \langle q'| = 1$, ficamos com

$$f_w(q, p) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mu d\sigma \text{Tr} \left(\int dq' |q'\rangle \langle q'| \rho e^{i\mu(Q-q) - i\sigma(P-p)} \right),$$

onde, rearranjando os termos, temos

$$f_w(q, p) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int d\mu d\sigma dq' e^{-i\mu q + i\sigma p} \langle q'| \rho e^{i\mu Q - i\sigma P} |q'\rangle.$$

Note que, como Q e P comutam com seu comutador, podemos usar a relação de *Baker-Hausdorff*, $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$, então

$$e^{i\mu Q - i\sigma P} = e^{i\mu Q} e^{-i\sigma P} e^{-\frac{i\mu\sigma\hbar}{2}}.$$

Fazendo $\sigma = \frac{z}{\hbar}$ e usando o fato que o operador P é gerador de translação na posição, isto é, $e^{-\frac{izP}{\hbar}} |q\rangle = |q+z\rangle$, e em seguida, $e^{i\mu Q} |q+z\rangle = e^{i\mu(q+z)} |q+z\rangle$, segue que

$$f_w(q, p) = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar} \int dz dq' \left(\int d\mu e^{q' - q + \frac{z}{2}} \right) e^{\frac{izp}{\hbar}} \langle q'| \rho |q' + z\rangle.$$

O termo entre parêntese é função delta de Dirac, o que nos leva, finalmente a

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz e^{\frac{izp}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle,$$

como queríamos demonstrar.

Como ilustração, seguem algumas aplicações.

Estado coerente

Para o estado coerente, o operador densidade é dado por

$$\rho = |\alpha_0\rangle \langle \alpha_0|.$$

Substituindo-o na Eq. (2.31), e usando o fato que $\text{Tr}|u\rangle \langle v| = \langle v|u\rangle$, temos

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda e^{-\lambda\alpha^* + \lambda^*\alpha} \langle \alpha_0 | e^{\lambda A^\dagger - \lambda^* A} | \alpha_0 \rangle.$$

Porém, novamente usando a relação de *Baker-Hausdorff*,

$$e^{\lambda A^\dagger - \lambda^* A} = e^{\lambda A^\dagger} e^{\lambda^* A} e^{-\frac{|\lambda|^2}{2}}.$$

Assim,

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda e^{\{\lambda(\alpha_0^* - \alpha^*) + \lambda^*(\alpha - \alpha_0) - \frac{|\lambda|^2}{2}\}},$$

o que nos leva a

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} e^{-2|\alpha - \alpha_0|^2}. \quad (2.35)$$

Estado Térmico

Em termos da função característica, a função de Wigner dada pela Eq. (2.31) é escrita como

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda e^{-\lambda\alpha^* + \lambda^*\alpha} \chi(\lambda, \lambda^*).$$

Para o estado térmico, a função característica é dada por

$$\chi(\lambda, \lambda^*) = e^{-\frac{|\lambda|^2}{2} \left(\frac{\frac{\hbar\omega}{e kT} + 1}{\frac{\hbar\omega}{e kT} - 1} \right)},$$

onde k é a constante de Boltzmann e T , a temperatura absoluta. Portanto, a função de Wigner, para o estado térmico fica

$$f_w(\alpha, \alpha^*) = \frac{1}{\pi^2} \int d^2\lambda e^{-\lambda\alpha^* + \lambda^*\alpha} e^{-\frac{|\lambda|^2}{2} \left(\frac{\frac{\hbar\omega}{e kT} + 1}{\frac{\hbar\omega}{e kT} - 1} \right)},$$

que, integrando sobre todo o plano complexo, nos leva a

$$f_{wT}(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) e^{-2|\alpha|^2 \tanh\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)}. \quad (2.36)$$

Estado de Fock (Estado Número)

O estado número é caracterizado pelo número de *quanta* de energia, ou fótons, e o operador densidade é dado por

$$\rho_n = |n\rangle\langle n|.$$

Se compararmos com a matriz densidade do estado térmico

$$\rho_T = (1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}) \sum_n e^{-\frac{n\hbar\omega}{kT}} |n\rangle\langle n|,$$

podemos relacionar os operadores de cada estado. Fazendo $z = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ o operador densidade para o estado térmico fica dado por

$$\rho_T = (1 - z) \sum_n z^n |n\rangle\langle n|.$$

Como os operadores são proporcionais, as funções de Wigner para cada estado também serão. Portanto, podemos fazer a seguinte relação

$$f_{wT}(\alpha, \alpha^*) = (1 - z) \sum_n z^n f_{wn}(\alpha, \alpha^*). \quad (2.37)$$

Substituindo $z = e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}$ na Eq. (2.36) temos

$$f_{wT}(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} \left(\frac{1 - z}{1 + z} \right) e^{-2\left(\frac{1-z}{1+z}\right)|\alpha|^2},$$

que nos leva a

$$f_{wT}(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} (1 - z) e^{-2|\alpha|^2} \frac{e^{4|\alpha|^2 \frac{z}{1+z}}}{1 + z}.$$

É possível identificar esse resultado como uma função geradora dos polinômios de Laguerre, já que

$$\sum_{n=0}^{\infty} L_n(x) z^n = (1 + z)^{-1} e^{x \frac{z}{z-1}}.$$

Assim, a função de Wigner para o estado térmico fica

$$f_{wT}(\alpha, \alpha^*) = \frac{2}{\pi} (1 - z) e^{-2|\alpha|^2} \sum_{n=0}^{\infty} L_n(4|\alpha|^2) (-1)^n z^n,$$

e com o auxílio da Eq. (2.37), a função de Wigner para o estado de Fock fica dada por

$$f_{wn}(\alpha, \alpha^*) = (-1)^n \frac{2}{\pi} e^{-2|\alpha|^2} L_n(4|\alpha|^2). \quad (2.38)$$

Para que este formalismo fique completo, é necessário estudar como é a representação dos operadores quânticos no seu contexto e quais as suas propriedades. O próximo capítulo será dedicado a este assunto.

3 Propriedades Algébricas do Formalismo de Wigner

Neste capítulo faremos uma revisão das propriedades algébricas do formalismo de Wigner, que serão utilizadas nos capítulos seguintes.

3.1 Operadores na Representação de Wigner

Conforme foi discutido, os operadores quânticos são substituídos por funções no espaço de fase (*transformada de Weyl*) nessa representação que está sendo abordada, vide Eqs. (2.6) e (2.9). E que a função de Wigner relaciona-se com a matriz densidade de modo que

$$f_w = (2\pi\hbar)^{-1}\rho_w. \quad (3.1)$$

Como uma das metas da mecânica quântica é calcular valores esperados, precisamos saber se essas funções estão de acordo com a estrutura padrão. Ou seja, é necessário conferir se a relação

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int dq dp a_w(q, p) f_w(q, p) = \text{Tr} \rho A \quad (3.2)$$

é válida. Vamos, então substituir as Eqs.(2.6) e (2.11) na integral acima.

$$\langle A \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) \int dq dp dz dz' e^{\left(\frac{ipz'}{\hbar}\right)} \langle q - \frac{z'}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z'}{2} \rangle e^{\left(\frac{ipz'}{\hbar}\right)} \langle q - \frac{z'}{2} | \rho | q + \frac{z'}{2} \rangle.$$

Organizando os termos,

$$\langle A \rangle = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right) \int dp e^{\left(\frac{ip(z+z')}{\hbar}\right)} \int dq dz dz' \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle \langle q - \frac{z'}{2} | \rho | q + \frac{z'}{2} \rangle,$$

fica claro que a integração em p é a função delta de Dirac. Assim,

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \int dq dz dz' \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle \langle q - \frac{z'}{2} | \rho | q + \frac{z'}{2} \rangle \delta(z + z') \\ &= \int dq dz \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle \langle q + \frac{z}{2} | \rho | q - \frac{z}{2} \rangle. \end{aligned}$$

Fazendo a mudança de variável, que possui jacobiano igual a 1

$$\bar{q} = \left(q - \frac{z}{2}\right)$$

$$\bar{z} = \left(q + \frac{z}{2}\right),$$

tem-se,

$$\begin{aligned}\langle A \rangle &= \int d\bar{q}d\bar{z} \langle \bar{q} | A(Q, P) | \bar{z} \rangle \langle \bar{z} | \rho | \bar{q} \rangle \\ &= \text{Tr} \rho A = \langle A \rangle.\end{aligned}$$

Portanto, as funções *c-number* sobre o espaço de fase que representam os operadores quânticos no espaço de Hilbert são compatíveis com a teoria quântica padrão.

Algumas propriedades importantes surgem desse formalismo. Por exemplo, se tivermos um operador independente de Q , isto é $A = A(P)$, então o seu recíproco na abordagem de Wigner também será da mesma forma funcional, com a diferença que os operadores P serão substituídos pelas variáveis p . Isso pode ser facilmente visto se for feita uma expansão de $A(P)$ em séries de P .

$$A(P) = A(0) + PA'(0) + \frac{P^2}{2!}A''(0) + \dots$$

Substituindo essa expansão na Eq. (2.6), tem-se

$$a_w(q, p) = \int dk e^{\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)} \left\langle p - \frac{k}{2} \left| A(0) + PA'(0) + \frac{P^2}{2!}A''(0) + \dots \right| p + \frac{k}{2} \right\rangle.$$

Porém, $P|p\rangle = p|p\rangle$, então

$$\begin{aligned}a_w(q, p) &= A(0) \int dk e^{\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)} \left\langle p - \frac{k}{2} \left| p + \frac{k}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad + A'(0) \int dk e^{\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)} \left(p + \frac{k}{2}\right) \left\langle p - \frac{k}{2} \left| p + \frac{k}{2} \right\rangle \right. \\ &\quad \left. + A''(0) \int dk e^{\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)} \frac{\left(p + \frac{k}{2}\right)^2}{2!} \left\langle p - \frac{k}{2} \left| p + \frac{k}{2} \right\rangle + \dots\right.\end{aligned}$$

Como $\left\langle p - \frac{k}{2} \left| p + \frac{k}{2} \right\rangle = \delta(k)$, após o cálculo da integral em k , chega-se a

$$a_w(p) = A(0) + pA'(0) + \frac{p^2}{2!}A''(0) + \dots = A(p).$$

Analogamente, se o operador for independente de P , ($A = A(Q)$), então $a_w(q, p) = A(q)$ por razões análogas. Agora, basta expandir (Q) em séries de Q ,

$$A(Q) = A(0) + QA'(0) + \frac{Q^2}{2!}A''(0) + \dots,$$

e substituir na Eq. (2.9), isto é

$$a_w(q, p) = \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | A(0) + QA'(0) + \frac{Q^2}{2!} A''(0) + \dots | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Agora, $Q|q\rangle = q|q\rangle$, então

$$\begin{aligned} a_w(q, p) = & 1A(0) \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | q + \frac{z}{2} \rangle \\ & + A'(0) \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} (q + \frac{z}{2}) \langle q - \frac{z}{2} | q + \frac{z}{2} \rangle \\ & + A''(0) \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \frac{(q + \frac{z}{2})^2}{2!} \langle q - \frac{z}{2} | q + \frac{z}{2} \rangle + \dots \end{aligned}$$

Utilizando a propriedade da delta $\delta(z)$ para calcular a integral em z , chegamos a

$$a_w(q) = A(0) + qA'(0) + \frac{q^2}{2!} A''(0) + \dots = A(q).$$

Mas se o operador for independente tanto de Q , quanto de P , isto é, for uma constante, então a função recíproca também o será. Essa propriedade segue facilmente se substituirmos $A(Q, P) = c$ na Eq. (2.9).

$$a_w(q, p) = \int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \langle q - \frac{z}{2} | c | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Como constantes não atuam em kets e notando que $\langle q - \frac{z}{2} | q + \frac{z}{2} \rangle = \delta(z)$, chegamos a

$$a_w(q, p) = c \int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \delta(z).$$

O que, após a integração em z , leva a

$$a_w(q, p) = c = A(q, p).$$

Vimos que função de Wigner, quando integrada, resulta em probabilidades. E já que a mesma exibe a mesma forma da *transformada de Weyl* dos operadores, podemos explorar também a integração dessas funções. Começemos integrando a Eq. (2.9) sobre todo o espaço de fase.

$$\int dq dp a_w(q, p) = \int dq dp \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle$$

Reorganizando os termos, podemos notar a função delta na forma integral.

$$\int dq dp a_w(q, p) = \int dq dz \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle \left(\int dp e^{\frac{ipz}{\hbar}} \right)$$

Dessa maneira,

$$\int dq dp a_w(q, p) = \int dq dz \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle (2\pi\hbar) \delta(z),$$

o que nos leva a

$$\int dq dp a_w(q, p) = 2\pi\hbar \left(\int dq \langle q | A(Q, P) | q \rangle \right) = \text{Tr} A.$$

Ou seja,

$$\text{Tr} A = (2\pi\hbar)^{-1} \int dq dp a_w(q, p).$$

Agora, se integrarmos a Eq. (2.9) em p , teremos

$$\int dp a_w(q, p) = \int dp \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Reorganizando novamente os termos, identificamos a forma integral da delta de Dirac.

$$\int dp a_w(q, p) = \int dz \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle \left(\int dp e^{\frac{ipz}{\hbar}} \right)$$

Após a integração em p , tem-se

$$\int dp a_w(q, p) = \int dz \langle q - \frac{z}{2} | A(Q, P) | q + \frac{z}{2} \rangle (2\pi\hbar) \delta(z).$$

Ou seja,

$$\int dp a_w(q, p) = (2\pi\hbar) \langle q | A(Q, P) | q \rangle.$$

Por simetria, a integração da Eq. (2.6) em q fica

$$\int dq a_w(q, p) = \int dq \int dk e^{\frac{-iqk}{\hbar}} \langle p - \frac{k}{2} | A(Q, P) | p + \frac{k}{2} \rangle.$$

Após uma integração análoga à feita anteriormente, teremos

$$\int dq a_w(q, p) = \int dk \langle p - \frac{k}{2} | A(Q, P) | p + \frac{k}{2} \rangle (2\pi\hbar) \delta(k).$$

Então,

$$\int dq a_w(q, p) = (2\pi\hbar) \langle p | A(Q, P) | p \rangle.$$

A próxima propriedade será de grande valia para construirmos o produto de operadores nesse formalismo e diz respeito aos elementos não diagonais de um operador. Para isso, vamos usar a regra de quantização de Weyl. Uma função clássica no espaço de

fase pode ser expandida através de

$$A(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\sigma d\tau e^{\frac{i(\sigma q + \tau p)}{\hbar}} \alpha(\tau, \sigma),$$

onde τ está associado à posição e σ ao *momentum* no espaço de fase. A quantização é feita substituindo as variáveis q e p pelos operadores Q e P .

$$A(Q, P) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\sigma d\tau e^{\frac{i(\sigma Q + \tau P)}{\hbar}} \alpha(\tau, \sigma)$$

Podemos, então, calcular os elementos não diagonais da seguinte maneira

$$\langle q|A|q'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\sigma d\tau \alpha(\sigma, \tau) \langle q|e^{\frac{i(\sigma Q + \tau P)}{\hbar}}|q'\rangle. \quad (3.3)$$

Utilizando, a relação $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A,B]}$, o bracket dentro da integral fica

$$\langle q|e^{\frac{i(\sigma Q + \tau P)}{\hbar}}|q'\rangle = \langle q|e^{\frac{i\sigma Q}{\hbar}} e^{\frac{i\tau P}{\hbar}} e^{\frac{i\sigma\tau}{2\hbar}}|q'\rangle.$$

O operador P na representação da posição é gerador de translações e $|q\rangle$ é autovetor de Q , isto é

$$e^{\frac{i\tau P}{\hbar}}|q\rangle = |q - \tau\rangle$$

$$Q|q\rangle = q|q\rangle.$$

Assim, ficamos com

$$\langle q|e^{\frac{i(\sigma Q + \tau P)}{\hbar}}|q'\rangle = e^{\frac{i\sigma}{\hbar}(q' - \frac{\tau}{2})} \delta(q - q' + \tau).$$

Substituindo na Eq. (3.3), temos

$$\langle q|A|q'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\sigma d\tau \alpha(\sigma, \tau) e^{\frac{i\sigma}{\hbar}(q' - \frac{\tau}{2})} \delta(q - q' + \tau).$$

Portanto,

$$\langle q|A|q'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\sigma e^{\frac{i\sigma}{\hbar}(q'+q)} \alpha(\sigma, q' - q). \quad (3.4)$$

Resumindo, temos as seguintes propriedades

- Propriedade 3.0.1

$$\text{Se } A = A(P), \text{ então } a_w = A(p)$$

- Propriedade 3.0.2

$$\text{Se } A = A(Q), \text{ então } a_w = A(q)$$

- Propriedade 3.0.3

Se $A = \text{constante}$, então $a_w = A$

- Propriedade 3.0.4

$$\text{Tr}A = (2\pi\hbar)^{-1} \int dqda_w(q, p)$$

- Propriedade 3.0.5

$$\int dp a_w(q, p) = (2\pi\hbar) \langle q|A(Q, P)|q\rangle$$

- Propriedade 3.0.6

$$\int dq a_w(q, p) = (2\pi\hbar) \langle p|A(Q, P)|p\rangle$$

- Propriedade 3.0.7

$$\langle q|A|q'\rangle = \frac{1}{2\pi\hbar} \int d\sigma e^{\frac{i\sigma}{\hbar}(q'+q)} \alpha(\sigma, q' - q)$$

Após estudarmos os operadores e suas propriedades, o próximo passo será focado no produto de operadores na representação de Wigner, o qual é fundamental na descrição da dinâmica de um sistema.

3.2 O Produto de Weyl-Moyal (produto-estrela)

Na representação de Wigner, o produto de dois operadores quânticos AB é escrito na forma

$$(AB)_w = \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | AB | q + \frac{z}{2} \rangle,$$

que, introduzindo a relação de fechamento $\int dq |q\rangle \langle q| = 1$, fica

$$(AB)_w = \int dz dq' e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | A | q' \rangle \langle q' | B | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Usando a Eq. (3.4), temos

$$(AB)_w = (2\pi\hbar)^{-2} \int dz dq' e^{\frac{ipz}{\hbar}} \int d\sigma d\sigma' e^{\frac{i\sigma}{2\hbar}(q+q'-\frac{z}{2})} \alpha(\sigma, q' - q + \frac{z}{2}) \\ \times e^{\frac{i\sigma'}{2\hbar}(q+q'+\frac{z}{2})} \beta(\sigma', q - q' + \frac{z}{2}).$$

Fazendo as mudanças de variáveis; $\tau = q' - q + \frac{z}{2}$ e $\tau' = q - q' + \frac{z}{2}$, chega-se a

$$(AB)_w = (2\pi\hbar)^{-2} \int d\sigma d\sigma' d\tau d\tau' e^{\frac{i(\sigma q + \tau p)}{\hbar}} \alpha(\sigma, \tau) e^{\frac{i(\sigma' \tau + \sigma \tau')}{2\hbar}} \beta(\sigma', \tau') e^{\frac{i(\sigma' q + \tau' p)}{\hbar}}.$$

O fator $e^{\frac{i(\sigma' \tau + \sigma \tau')}{2\hbar}}$ pode ser substituído de modo equivalente por $e^{\frac{i\Lambda}{2\hbar}}$, onde Λ é o operador bidiferencial

$$\Lambda = \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q.$$

As setas indicam o sentido em que os operadores diferenciais são aplicados. Portanto, fazendo $A_w(q, p) = \int dq dp e^{\frac{i(\sigma q + \tau p)}{\hbar}} \alpha(\tau, \sigma)$ e $B_w(q, p) = \int dq dp e^{\frac{i(\sigma' q + \tau' p)}{\hbar}} \beta(\tau', \sigma')$, o produto de operadores na representação de Wigner fica escrito como

$$(AB)_w = A_w(q, p) e^{\frac{i\Lambda}{2\hbar}} B_w(q, p),$$

ou

$$(AB)_w = B_w(q, p) e^{\frac{-i\Lambda}{2\hbar}} A_w(q, p).$$

Dessa forma, a operação denominada produto-estrela fica definida como [27]

$$(AB)_w = A_w(q, p) e^{\frac{i\Lambda}{2\hbar}} B_w(q, p) = A_w(q, p) \star B_w(q, p). \quad (3.5)$$

Note que o produto-estrela não é comutativo e relaciona o formalismo proposto por Wigner com o formalismo de quantização proposto por Weyl.

O próximo passo será estudar o produto-estrela e suas propriedades, pois é a partir dele que definiremos operadores que ajudarão a estabelecer uma representação simplética para a mecânica quântica, no capítulo 4.

3.3 Propriedades do Produto-estrela

O produto-estrela é uma das ferramentas matemáticas mais importantes para a descrição de Wigner da mecânica quântica. Em toda equação dinâmica envolvendo a função de Wigner estará o produto estrela envolvido. Além do que o produto-estrela é peça-chave para a definição do operador-estrela, que será explorado na construção de representações unitárias de uma mecânica quântica simplética.

Na intenção de facilitar a visualização de algumas situações, vamos reescrever o produto-estrela de algumas formas diferentes, porém equivalentes, que se reduzem uma na outra. O produto-estrela (também denominado produto de Weyl-Moyal), entre duas

funções $f(q, p)$ e $g(q, p)$ é definido por

$$f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p) e^{[\frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)]} g(q, p). \quad (3.6)$$

Ao invés de indicar as funções a serem diferenciadas por setas, pode-se rotular as variáveis com uma linha indicando qual função será diferenciada, ou seja

$$f(q, p) \star g(q, p) = \exp[\frac{i\hbar}{2}(\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})] f(q, p) g(q', p').$$

A exponencial pode ser expandida numa série de potências

$$e^{[\frac{i\hbar}{2}(\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})]} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n (\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})^n,$$

assim como o termo $(\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})^n$, através do binômio de Newton, isto é,

$$(\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})^n = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q \partial_{p'}]^{n-m} [\partial_p \partial_{q'}]^m.$$

Dessa forma, chegamos a uma forma operacionalmente útil de escrever o produto-estrela,

$$f(q, p) \star g(q, p) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q^{n-m} \partial_p^m f(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} g(q, p)]. \quad (3.7)$$

Essas reescritas do produto-estrela viabilizam o estudo de suas propriedades, as quais serão muito úteis nos desenvolvimentos posteriores.

Propriedade 3.2.1 Se um dos fatores for uma constante, o produto estrela trivializa-se.

Isto é,

$$c \star f(q, p) = f(q, p) \star c = cf(q, p). \quad (3.8)$$

Com $c \in C$. Tal propriedade é facilmente notada se utilizarmos a expansão em série para o produto-estrela.

$$c \star f(q, p) = c \{1 + \frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q) + \frac{1}{2!} \frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)^2 + \dots\} f(q, p).$$

Os operadores diferenciais que atuam à esquerda se anulam, pois c é uma constante, restando apenas o primeiro termo. O mesmo acontece quando o produto-estrela por c for efetuado pelo lado direito, isto é $f(q, p) \star c$.

Propriedade 3.2.2 Definição do Operador-estrela

O produto-estrela entre duas funções no espaço de fase eleva uma delas à categoria de operador,

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f\left(q + \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p\right)g(q, p) \\ &= f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p)g\left(q - \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_q\right). \end{aligned}$$

Definindo $a = \overrightarrow{\partial}_p$ e $b = \overrightarrow{\partial}_q$, a Eq. (3.6) assume a forma

$$f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p)e^{\frac{i\hbar}{2}(a\overleftarrow{\partial}_q - b\overleftarrow{\partial}_p)}g(q, p).$$

Como as exponenciais em questão geram translações, isto é $e^{a\partial_x}f(x) = f(x+a)$, chega-se a

$$f(q, p) \star g(q, p) = f\left(q + \frac{i\hbar}{2}a, p - \frac{i\hbar}{2}b\right)g(q, p);$$

e, finalmente, substituindo a e b , temos

$$f(q, p) \star g(q, p) = f\left(q + \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p\right)g(q, p).$$

Conseqüentemente, podemos definir o operador-estrela como sendo

$$\widehat{f}(q, p) = f(q, p) \star .$$

Propriedade 3.2.3 Associatividade

Sejam f , g e h funções no espaço de fase. Então,

$$(f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) = f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)). \quad (3.9)$$

Pela propriedade anterior,

$$(f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) = \left\{f\left(q + \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p\right)g(q, p)\right\}h\left(q - \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_q\right),$$

e também,

$$f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)) = f\left(q + \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial}_p\right)\left\{g(q, p)h\left(q - \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial}_q\right)\right\}.$$

Como os operadores diferenciais envolvidos aqui são associativos, pode-se concluir que o produto-estrela também será.

Propriedade 3.2.4 Não-comutatividade

O produto-estrela não é comutativo, ou seja

$$f(q, p) \star g(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p).$$

O que temos, de fato é

$$f(q, p)e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}}g(q, p) = g(q, p)e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}}f(q, p), \quad (3.10)$$

que pode ser visto no seguinte exemplo,

$$q \star p = \left(q + \frac{i\hbar}{2}\partial_p\right)p = qp + \frac{i\hbar}{2},$$

e

$$p \star q = \left(p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q\right)q = pq - \frac{i\hbar}{2},$$

este é um resultado básico em geometrias não-comutativas e um ingrediente fundamental da mecânica quântica. Observe que esses operadores obedecem à relação de incerteza de Heisenberg.

Propriedade 3.2.5 A conjugação complexa

A conjugação complexa inverte a ordem do produto estrela-assim como ocorre ao conjugado complexo de dois operadores usuais.

$$(f \star g)^\dagger = g^\dagger \star f^\dagger. \quad (3.11)$$

Se tomarmos o complexo conjugado da Eq. (3.7), teremos

$$(f(q, p) \star g(q, p))^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \{(-1)^n \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q^{n-m} \partial_p^m f^\dagger(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} g^\dagger(q, p)]\}, \quad (3.12)$$

onde o fator $(-1)^n$ vem da conjugação complexa do parte imaginária $(\frac{i\hbar}{2})^n$. Esse fator pode ser agregado ao binômio

$$(-1)^n (\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})^n = (\partial_p \partial_{q'} - \partial_q \partial_{p'})^n = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_p \partial_{q'}]^{n-m} [\partial_q \partial_{p'}]^m.$$

Portanto, ao aplicarmos esses operadores acima em um produto de duas funções no espaço de fase, $f(q, p)g(q', p')$, teremos

$$(\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})^n f(q, p)g(q', p') = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q^{n-m} \partial_p^m f(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} g(q, p)],$$

e

$$(-1)^n (\partial_q \partial_{p'} - \partial_p \partial_{q'})^n f(q, p) g(q', p') = \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q^{n-m} \partial_p^m g(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} f(q, p)].$$

Comparando essas duas últimas equações, conclui-se que

$$\begin{aligned} & (-1)^n \sum_{m=0}^n (-1)^m [\partial_q^{n-m} \partial_p^m f(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} g(q, p)] \\ &= \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q^{n-m} \partial_p^m g(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} f(q, p)]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Se substituirmos a Eq. (3.13) na Eq. (3.12), tem-se

$$(f(q, p) \star g(q, p))^\dagger = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^n \left\{ (-1)^n \sum_{m=0}^n (-1)^m \binom{n}{m} [\partial_q^{n-m} \partial_p^m g^\dagger(q, p)] [\partial_q^m \partial_p^{n-m} f^\dagger(q, p)] \right\} = g^\dagger \star f^\dagger.$$

Propriedade 3.2.6 A Forma Integral do Produto-estrela

Assim como feito com a Eq. (3.7), existe uma outra forma útil de representar o produto-estrela, que pode ser feito através de integrais. Para isso, uma função $f(q, p)$ no espaço de fase pode ser escrita por

$$f(q, p) = \int dq' dp' f(q', p') \delta(q' - q) \delta(p' - p). \quad (3.14)$$

As funções deltas de Dirac, na forma integral, são escritas como

$$\delta(q' - q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{-iu(q'-q)}{\hbar}} du, \quad (3.15)$$

e

$$\delta(p' - p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{\frac{-iv(p'-p)}{\hbar}} dv. \quad (3.16)$$

O que, substituindo na Eq. (3.14) nos leva a

$$f(q, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int dudvdq'dp' f(q', p') e^{\frac{-i}{\hbar}[v(p'-p)+u(q'-q)]}.$$

Já foi visto que o produto-estrela entre duas funções eleva uma delas à categoria de operador, portanto

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f\left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p\right) g(q, p) \\ &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int dudvdq'dp' f(q', p') e^{\frac{-i}{\hbar}[v(p'-p)+u(q'-q)]} e^{\left(\frac{v}{2} \partial_q - \frac{u}{2} \partial_p\right)} g(q, p). \end{aligned}$$

As exponenciais atuando sobre a função $g(q, p)$ geram translações, ou seja

$$e^{(\frac{v}{2}\partial_q - \frac{u}{2}\partial_p)}g(q, p) = g(q + \frac{v}{2}, p + \frac{u}{2}).$$

Então,

$$f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int dudvdq'dp' f(q', p') e^{\frac{-i}{\hbar}[v(p'-p)+u(q'-q)]} g(q + \frac{v}{2}, p + \frac{u}{2}).$$

Se fizermos a mudança de variáveis, que tem jacobiano igual a 4,

$$q'' = q + \frac{v}{2} \quad e \quad p'' = p - \frac{u}{2},$$

obtemos o resultado

$$f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^2 \int 4dq''dp''dq'dp' f(q', p') e^{\frac{-2i}{\hbar}[(q''-q)(p'-p)+(p-p'')(q'-q)]} g(q'', p'').$$

De onde segue que

$$f(q, p) \star g(q, p) = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^2 \int dq'dq''dp'dp'' f(q', p') g(q'', p'') e^{\frac{-2i}{\hbar}[p'(q'-q'')+p'(q''-q)+p''(q-q')]} g(q'', p''). \quad (3.17)$$

Essa é a forma integral do produto-estrela.

Propriedade 3.2.7 A Integral do Produto-estrela no Espaço de Fase

Se integrarmos o produto-estrela entre duas funções no espaço de fase, representado pela Eq. (3.17), teremos

$$\int f \star g dq dp = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^2 \int dq dq' dq'' dp dp' dp'' f(q', p') g(q'', p'') e^{\frac{-2i}{\hbar}[p'(q'-q'')+p'(q''-q)+p''(q-q')]}.$$

Reorganizando os termos, podemos escrever

$$\int f \star g dq dp = \left(\frac{1}{\pi\hbar}\right)^2 \int dq dq' dq'' dp dp' dp'' f(q', p') g(q'', p'') e^{\frac{-2i}{\hbar}[p'(q''-q)+p''(q-q')]} [e^{\frac{-2i}{\hbar}p'(q'-q'')}].$$

Fazendo uso da forma integral da função delta de Dirac, é possível reconhecer que

$$\frac{1}{\pi\hbar} \int dp e^{\frac{-2ip(q'-q'')}{\hbar}} = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp e^{\frac{-ip(q'-q'')}{\hbar}} = \delta(q' - q'').$$

Logo,

$$\int f \star g dq dp = \frac{1}{\pi\hbar} \int dq dq' dq'' dp' dp'' f(q', p') g(q'', p'') e^{\frac{-2i}{\hbar}[p'(q''-q)+p''(q-q')]} \delta(q' - q'').$$

Integrando em dq' , temos

$$\int f \star g dq dp = \frac{1}{\pi\hbar} \int dq dq'' dp' dp'' f(q'', p') g(q'', p'') e^{\frac{-2i[p'(q''-q)+p''(q-q'')]}{\hbar}}.$$

Rearranjando os termos, podemos escrever que

$$\int f \star g dq dp = \frac{1}{\pi\hbar} \int dq dq'' dp' dp'' f(q'', p') g(q'', p'') e^{\frac{-2i[q''(p'-p'')]}{\hbar}} \delta(p'' - p'),$$

e finalmente, integrando em dp' , ficamos com

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dq dp = \int dq'' dp'' f(q'', p'') g(q'', p'').$$

Como as variáveis são mudas, podemos trocar q'' por q e p'' por p , conduzindo a

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dq dp = \int dq dp f(q, p) g(q, p).$$

Conclui-se, portanto, que o produto-estrela se trivializa ao ser integrado no espaço de fase. Porém, essa propriedade é coerente apenas se houver convergência da integral. Para isso, é necessário que as funções $f(q, p)$ e $g(q, p)$ se anulem no infinito ($-\infty$ e $+\infty$).

3.4 Evolução Temporal da Função de Wigner

Um formalismo completo da mecânica quântica supõe o conhecimento de uma função que caracterize o estado físico, de uma expressão que permita calcular os valores esperados de observáveis e de uma expressão que forneça a evolução temporal desse estado. Por enquanto, já temos os dois primeiros. Nos falta a evolução temporal. Essa equação, por construção, também deve expressar a evolução de um operador na representação de Wigner. O mapeamento utilizado até aqui foi da forma $\Omega_w : A \rightarrow a_w(q, p)$. De maneira que

$$\Omega_w(A) = (2\pi\hbar)^{-1} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | A | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Ou seja, o mapeamento que leva um operador, definido no espaço de Hilbert H , a uma função no espaço de fase Γ é feito através do operador

$$(2\pi\hbar)^{-1} \int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \langle q - \frac{z}{2} | \cdot | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Vamos aplicá-lo à equação de Liouville - von Neumann, Eq. (2.4),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ (2\pi\hbar)^{-1} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | \rho | q + \frac{z}{2} \rangle \right\} = (2\pi\hbar)^{-1} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | H \rho | q + \frac{z}{2} \rangle$$

$$-(2\pi\hbar)^{-1} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \langle q - \frac{z}{2} | \rho H | q + \frac{z}{2} \rangle.$$

Então,

$$i\hbar \frac{\partial f_w(q, p, t)}{\partial t} = H_w(q, p, t) \star f_w(q, p, t) - f_w(q, p, t) \star H_w(q, p, t).$$

O lado direito dessa expressão é conhecido como parêntese de Moyal, $\{a, b\}_M = a \star b - b \star a$, ficando então

$$i\hbar \frac{\partial f_w(q, p, t)}{\partial t} = \{H_w, f_w\}_M. \quad (3.18)$$

Fica evidente que essa equação dinâmica é muito parecida com a equação de Liouville-von Neumann habitual, notando que o estado do sistema é descrito pela função de Wigner e o comutador foi substituído pelo parêntese de Moyal. Agora, se lembrarmos que $e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} - e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}} = 2i \sin(\frac{\hbar\Lambda}{2})$, o parêntese de Moyal poderá ser reescrito na forma

$$\{a(q, p), b(q, p)\}_w = 2ia(q, p) \sin[\frac{\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)]b(q, p). \quad (3.19)$$

O operador $\sin(\frac{\hbar\Lambda}{2})$ pode ser expandido em série de potências, o que nos leva a um resultado deveras interessante.

$$\sin(\frac{\hbar\Lambda}{2}) = \frac{\hbar\Lambda}{2} - \frac{1}{3!}(\frac{\hbar\Lambda}{2})^3 + \frac{1}{5!}(\frac{\hbar\Lambda}{2})^5 + \dots$$

Pois, ao tomarmos o limite em que $\hbar \rightarrow 0$, a evolução temporal terá a forma

$$\frac{\partial f_w(q, p, t)}{\partial t} = f_w(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q) H_w,$$

isto é

$$\frac{\partial f_w}{\partial t} = \frac{\partial H_w}{\partial q} \frac{\partial f_w}{\partial p} - \frac{\partial H_w}{\partial p} \frac{\partial f_w}{\partial q} = \{H_w, f_w\}. \quad (3.20)$$

Fica claro, portanto, que a função de Wigner, nesse limite, obedece à equação de Liouville clássica, com H_w no lugar da função hamiltoniana, o que induz a

$$-\frac{\partial H_w}{\partial q} = \dot{p} \quad e \quad \frac{\partial H_w}{\partial p} = \dot{q}. \quad (3.21)$$

Então, o formalismo de Wigner recupera as equações canônicas da mecânica clássica [28], quando tomamos o limite clássico, o que mostra que esse formalismo é compatível com o princípio da correspondência, fortalecendo a importância da descrição de Wigner na mecânica quântica no estudo do limite clássico e no desenvolvimento de métodos semi-clássicos.

O estudo apresentado sobre o método de Wigner, até o momento, foi baseado na descrição de Schroedinger da mecânica quântica, ou seja, considerando que apenas os

estados (e não os operadores) evoluem com o tempo. No entanto, é possível desenvolver um tratamento análogo em termos de operadores expressos na descrição de Heisenberg (onde os operadores evoluem com o tempo, e os estados ficam estáticos), sem maiores problemas [19].

3.5 Equação característica envolvendo a Função de Wigner

Assim como no formalismo usual da mecânica quântica existe uma equação de auto-valores envolvendo operadores com seus respectivos auto-estados, no formalismo apresentado nesse trabalho deve existir uma equação análoga. A diferença é que no lugar de operadores, temos funções no espaço de fase com o produto-estrela envolvido. Para isso, basta que a função de Wigner corresponda a uma autofunção do hamiltoniano. Ou seja, para a equação de autovalores no formalismo usual,

$$H(Q, P)\psi(q) = E\psi(q), \quad (3.22)$$

é interessante a existência da equação-estrela

$$H_w(q, p) \star f_w(q, p) = Ef_w(q, p), \quad (3.23)$$

já que a proposta é construir um formalismo que descreva a teoria quântica em sua completude. Aqui, E é um autovalor do hamiltoniano. Para testar a validade da Eq. (3.23) vamos escrever o hamiltoniano como

$$H(Q, P) = \frac{P^2}{2m} + V(Q),$$

e supor que $f_w(q, p)$ seja a função de Wigner correspondente a autofunção $\psi(q)$ do hamiltoniano. $H(Q, P)\psi(q) = E\psi(q)$). A função de Wigner, como vimos, é dada por

$$f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right).$$

Através da propriedade 3.2.2, o produto-estrela entre $H(q, p)$ e $f(q, p)$ pode ser escrito por

$$H(q, p) \star f(q, p) = H\left(q, p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q\right) f\left(q, p + \frac{i\hbar}{2}\partial_q\right).$$

Portanto,

$$H_w(q, p) \star f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz \frac{1}{2m} \left[\left(p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q\right)^2 + V\left(q - \frac{z}{2}\right) \right] e^{\frac{ipz}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right),$$

o que leva a

$$H_w(q, p) \star f_w(q, p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz \left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\partial_z - \frac{\partial_q}{2} \right)^2 + V\left(q - \frac{z}{2}\right) \right] e^{\frac{ipz}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right).$$

Os operadores diferenciais nesta equação, quando aplicados a ψ^\dagger , se anulam, pois,

$$\left(\partial_z - \frac{\partial_q}{2} \right) \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) = \frac{1}{2} \dot{\psi}^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) - \frac{1}{2} \dot{\psi}^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) = 0,$$

onde o ponto sobre ψ^\dagger indica a derivada com respeito ao argumento. Assim, a Eq. (3.23)

fica dada por

$$\left[\frac{-\hbar^2}{2m} \left(\partial_z - \frac{\partial_q}{2} \right)^2 + V\left(q - \frac{z}{2}\right) \right] \psi\left(q - \frac{z}{2}\right) = E \psi\left(q - \frac{z}{2}\right).$$

Com isso, finalmente temos,

$$H_w(q, p) \star f_w(q, p) = E \left\{ \frac{1}{2\pi\hbar} \int dz e^{\frac{ipz}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right) \right\} = E f_w(q, p), \quad (3.24)$$

logo,

$$H_w(q, p) \star f_w(q, p) = E f_w(q, p).$$

Se a função de Wigner, $f_w(q, p)$, corresponde a uma autofunção do hamiltoniano, então satisfará à equação-estrela de autovalor.

Uma das dificuldades em se trabalhar com esse formalismo reside em resolver a evolução temporal da função de Wigner, dada pela Eq. (3.18), em função do operador bidiferencial, além da implementação de teorias de calibre e efeitos de superposição de estados. Porém, tal função fornece um formalismo alternativo ao da mecânica quântica para a função de onda na representação de Schroedinger e Heisenberg, sendo capaz de identificar importantes propriedades estatísticas de sistemas quânticos, além de fornecer uma base de comparação com a mecânica clássica. Motivações que nos levam a procurar um novo método para abordá-la.

No próximo capítulo, serão definidos alguns operadores-estrela para construirmos uma representação unitária do grupo de Galilei. Isto permite a construção de uma mecânica quântica compatível com o formalismo de Wigner, mas empregando a noção de amplitudes no espaço de fase.

4 *Mecânica Quântica Simplética*

Conforme visto no capítulo 2, no formalismo de Wigner cada operador, representado por A , definido em um espaço de Hilbert H , é associada a uma função $A_w(q, p)$, no espaço de fase Γ . Esta associação consiste em uma aplicação $\Omega_w : A \rightarrow A_w(q, p)$ de tal forma que o produto de operadores em H fica definido em Γ através do produto estrela, ou produto de Moyal. Assim, para dois operadores temos $\Omega_w : AB \rightarrow A_w(q, p) \star B_w(q, p)$. Tal formalismo é vantajoso, por exemplo, no sentido em que estabelece conexões com a mecânica clássica, já que os resultados clássicos são obtidos quando tomamos o limite simbólico $\hbar \rightarrow 0$.

Porém, o estudo de estados quânticos torna-se limitado, pois o formalismo de Wigner não permite a introdução de fases, impossibilitando a construção de teorias de calibre. Teorias de perturbação representam outra dificuldade, já que não aparecem efeitos de superposição na função de Wigner. Uma forma de contornar esses problemas seria a obtenção de uma função de onda no espaço de fase que esteja relacionada com a função de Wigner, além de sua evolução temporal, isto é, uma equação de Schroedinger no espaço de fase. Torres e Vegas [29] e [30] propuseram uma função desse tipo, porém carecia de uma interpretação física consistente. Apesar de os operadores posição e *momentum* propostos respeitarem a relação de Heisenberg, a projeção da função de onda foi realizada em uma base que não expandia todo o espaço. Tal interpretação foi alcançada em trabalhos recentes [17]- [19]. Utilizando a noção de uma estrutura simplética aliada ao produto-estrela, representações unitárias do grupo de Galilei foram estudadas culminando na obtenção da equação de Schroedinger no espaço de fase. Essa abordagem permite um novo procedimento para encontrar a função de Wigner sem o uso da intrincada equação de Liouville-von Neumann, ponto de partida original do método de Wigner. Essa representação foi estendida para o caso relativístico [20], onde utilizando simetrias do grupo de Poincaré, foram obtidas as equações de Klein-Gordon e Dirac no espaço de fase. Uma revisão dessa representação usando a álgebra de Lie pode ser encontrada na referência [31].

Nesse capítulo, será utilizado o grupo de simetria de Galilei para se obter a

equação de Schroedinger no espaço de fase, diferentemente da abordagem realizada nas referências [17] - [20], nas quais o estudo foi realizado mediante a álgebra de Lie. Dessa forma, construído um espaço Γ munido com uma estrutura simplética e dotado de funções de quadrado integrável, cujas coordenadas formarão uma base. Ou seja, será construído um espaço de Hilbert com uma estrutura simplética, denotado por H_Γ . Após a construção de operadores unitários que atuam em H_Γ , encontraremos os operadores que representam os observáveis físicos posição, *momentum* linear, *momentum* angular e energia, esta expressa pelo hamiltoniano. Tais operadores satisfazem a álgebra de Galilei-Lie [19]. Essa representação nos permite deduzir a equação de Schroedinger para funções em Γ , cujas variáveis carregam conteúdo de posição e *momentum* linear que serão associadas a funções de Wigner via o produto estrela, isto é $f_w = \psi \star \psi^\dagger$. Assim, amplitudes no espaço de fase $\psi(q, p)$ e a função de Wigner $f_w(q, p)$ obedecem à mesma equação de autovalores. Dessa maneira, a equação de Schroedinger no espaço de fase representa um fundamental ponto de partida para a descrição de sistemas quânticos no espaço de fase, totalmente compatível com o formalismo de Wigner.

4.1 Estrutura Simplética

A partir do espaço euclidiano R^3 com vetores definidos por $\mathbf{x} = (x^1, x^2, x^3)$ e $\mathbf{y} = (y^1, y^2, y^3)$ é possível construir uma variedade simplética dada por $\Gamma = R^3 \times R^3$, de tal forma que, nesse espaço Γ , um vetor ω fica especificado por $\omega = (\omega^1, \omega^2, \dots, \omega^6)$. Sem perder a generalidade, podemos fazer a associação

$$\omega^1 = q^1, \quad \omega^2 = q^2, \quad \omega^3 = q^3 \quad (4.1)$$

e

$$\omega^4 = p^1, \quad \omega^5 = p^2, \quad \omega^6 = p^3. \quad (4.2)$$

Vamos, então, equipar o espaço Γ com a estrutura simplética

$$\eta^{ab} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

ou, de forma mais compacta,

$$\eta^{ab} = \begin{pmatrix} 0 & I \\ -I & 0 \end{pmatrix},$$

onde I é a matriz identidade 3×3 . Essa métrica induz o parênteses de Poisson de duas funções em Γ , $f(\omega)$ e $g(\omega)$ [32]

$$\{f, g\} = \sum_{a=1}^6 \sum_{b=1}^6 \frac{\partial f}{\partial \omega^a} \frac{\partial g}{\partial \omega^b} = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f}{\partial q^i} \frac{\partial g}{\partial p^i} - \frac{\partial f}{\partial p^i} \frac{\partial g}{\partial q^i},$$

ou

$$\{f, g\} = \eta^{ab} \frac{\partial f}{\partial \omega^a} \frac{\partial g}{\partial \omega^b} = \eta^{ab} \partial_a f \partial_b g.$$

O espaço Γ , assim equipado, é denominado espaço simplético e sua aplicação mais difundida é no espaço de fase da mecânica clássica. Nesse caso, as variáveis q^i e p^i são, respectivamente, as coordenadas generalizadas e os *momenta* canonicamente conjugados.

Se considerarmos o conjunto das funções complexas de quadrado integrável em Γ , $H_\Gamma = \{\phi(\omega), \psi(\omega), \dots\}$, tal que

$$\int \phi(\omega) \psi(\omega) d\omega < \infty,$$

ou, para facilitar a notação, em uma dimensão,

$$\int \phi(q, p) \psi(q, p) dq dp < \infty,$$

tendo como um caso particular $\phi(q, p) = \psi(q, p)$

$$\int dq dp |\psi(q, p)|^2 = 1,$$

concluimos que H_Γ é um espaço de Hilbert. Nesse espaço vetorial complexo com um número infinito de dimensões, cada estado físico de um sistema é representado por um vetor de estado, chamado de *ket* e denotado por $|\psi\rangle$. Assumiremos que $|\psi\rangle$ contém informação completa acerca do estado físico, assim como feito nas referências [33] - [36], porém aqui, os vetores de estado pertencem ao espaço de fase H_Γ .

Partindo desse princípio, pode-se adicionar dois kets, resultando um novo *ket*, isto é, a combinação linear de dois vetores de estado é outro vetor de estado, observando o princípio da superposição,

$$|\varphi_1\rangle + |\varphi_2\rangle = |\psi\rangle.$$

Além disso, o produto de um número complexo c por um *ket* $|\varphi\rangle$ gera, também, outro *ket*.

$$c|\varphi\rangle = |\psi\rangle$$

É importante comentar que nesse caso, os *kets* $c|\varphi\rangle$ e $|\psi\rangle$ representam o mesmo estado físico.

Da mesma forma que esses vetores de estado estão definidos em um espaço vetorial, é possível construir um espaço dual ao dos *kets*: o espaço vetorial dos *bras*. Esse também é um espaço representado por vetores de estado, porém denotados por $\langle\psi|$. Assim, nota-se que o espaço dos *bras* é uma espécie de imagem especular do espaço dos *kets*, existindo, portanto, para cada *ket*, um *bra* correspondente. Essa correspondência é dita anti-linear, pois

$$c_1|\varphi_1\rangle + c_2|\varphi_2\rangle = c_1^*\langle\varphi_1| + c_2^*\langle\varphi_2|,$$

onde c_1 e c_2 são números complexos.

No espaço euclidiano o produto escalar entre dois vetores, $\vec{a} \cdot \vec{b}$, é um número real, não importando a ordem. Já nos espaços dos *bras* e dos *kets*, o produto escalar, ou produto interno, tem a forma

$$(\langle\varphi|) \cdot (|\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle,$$

que, em geral, é um número complexo. Como a correspondência entre os *kets* e *bras* é anti-linear, a ordem do produto interno é relevante, pois

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^*.$$

Imediatamente, nota-se que $\langle\psi|\psi\rangle$ é um número real e postula-se ser positivo. Esse produto somente será zero se $|\psi\rangle$ for um *ket* nulo. Quando se trata do produto entre dois vetores representando o mesmo estado, usa-se a condição de normalização

$$\langle\psi|\psi\rangle = 1.$$

Por último, em analogia ao espaço euclidiano, dois vetores de estado são chamados ortogonais quando

$$\langle\varphi|\psi\rangle = 0.$$

A próxima seção será dedicada ao estudo dos operadores lineares atuando em H_Γ .

4.2 Operadores lineares em H_Γ

A atuação de um operador linear em H_Γ é um mapeamento $\Omega : H_\Gamma \rightarrow H_\Gamma$, tal que, para dois vetores pertencentes a H_Γ , $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$, podemos fazer a seguinte associação

$$\Omega|\phi\rangle = |\psi\rangle.$$

O operador Ω será linear se

$$\Omega(c_1|\psi\rangle + c_2|\phi\rangle) = c_1\Omega|\psi\rangle + c_2\Omega|\phi\rangle.$$

O conjunto de operadores lineares, $\chi = (\Omega, \Theta, \dots)$, atuando em H_Γ , é munido com a estrutura de um espaço vetorial a partir das definições das operações de soma vetorial

$$(\Omega + \Theta)|\psi\rangle = \Omega|\psi\rangle + \Theta|\psi\rangle$$

e de multiplicação de um escalar por um vetor

$$(c\Omega)|\psi\rangle = c(\Omega|\psi\rangle).$$

Em geral, o *ket* $\Omega|\psi\rangle$ e o *bra* $\langle\psi|\Omega$ não são dual um do outro, pois

$$\Omega|\psi\rangle \leftrightarrow \langle\psi|\Omega^\dagger.$$

E, conseqüentemente,

$$(\Omega\Theta)^\dagger = \Theta^\dagger\Omega^\dagger.$$

O operador Ω^\dagger é chamado de adjunto de Ω . Caso seja um operador hermitiano, valerá a relação

$$\Omega = \Omega^\dagger.$$

Se for esse o caso, temos que

$$\langle\psi|\Omega|\varphi\rangle = \langle\varphi|\Omega^\dagger|\psi\rangle^\dagger = \langle\varphi|\Omega|\psi\rangle^\dagger.$$

É possível construir um operador através do produto entre dois vetores de estado. Esse produto é conhecido como produto externo e é definido como

$$A = |\varphi\rangle\langle\psi|$$

e seu adjunto,

$$A^\dagger = |\psi\rangle\langle\varphi|.$$

Quando um operador linear Ω atua em um *ket* $|\omega\rangle$ gerando outro, proporcional a este, dizemos que $|\omega\rangle$ é autovetor, ou autoestado de Ω . Ou seja,

$$\Omega|\omega\rangle = \omega|\omega\rangle,$$

em que ω é o autovalor. Caso o operador Ω seja hermitiano, o autovalor será real, razão pela qual operadores desse tipo quase sempre se revelam como aqueles que representam algum observável físico.

Bases ortonormais em H_{Γ}

Dois estados são ditos ortogonais quando o produto escalar entre eles é nulo. Agora, quando um conjunto de *kets* satisfaz a relação de normalização e a de ortogonalidade concomitantemente, é chamado de ortonormal, satisfazendo a relação de ortonormalidade

$$\langle\psi_{\omega}|\psi_{\omega'}\rangle = \delta(\omega - \omega'). \quad (4.3)$$

Quando temos um conjunto completo de autovetores $|\omega\rangle$ de um operador Ω , um *ket* arbitrário pode ser expandido em termos desses autovetores, da mesma forma que ocorre no espaço euclidiano quando vetores unitários mutuamente ortogonais são usados de base. Portanto, um *ket* arbitrário $|\psi\rangle$ dentro do espaço vetorial gerado pelos autoestados de Ω pode ser expandido na forma

$$|\psi\rangle = \int d\omega c(\omega)|\omega\rangle.$$

Se multiplicarmos os dois lados da expressão acima por $\langle\omega'|$, após usar a relação de ortonormalidade, dada pela Eq. (4.3), veremos facilmente que os coeficientes dessa expansão são dados por

$$c(\omega) = \langle\omega|\psi\rangle.$$

Isso quer dizer que

$$|\psi\rangle = \int d\omega|\omega\rangle\langle\omega|\psi\rangle,$$

e, finalmente

$$\int d\omega|\omega\rangle\langle\omega| = \mathbf{1}, \quad (4.4)$$

onde $\mathbf{1}$ é o operador identidade e essa expressão é conhecida como relação de fechamento ou de completeza.

Utilizando a associação dada nas Eqs. (4.1) e (4.2), é possível identicar que, para

uma dimensão, $\phi(\omega) = \phi(q, p)$ é a projeção do estado $|\phi\rangle$, sobre o espaço de Hilbert, H_Γ , gerado pela base $|q, p\rangle$, isto é,

$$\phi(q, p) = \langle q, p | \phi \rangle,$$

onde $\langle q, p |$ é o vetor dual de $|q, p\rangle$. Como a base $|q, p\rangle$ forma um conjunto completo, vale a relação de fechamento

$$\int dq dp |q, p\rangle \langle q, p| = \mathbf{1},$$

além, também, de serem ortonormais

$$\langle q', p' | q, p \rangle = \delta(q' - q) \delta(p' - p).$$

Agora que o espaço de Hilbert foi construído e sua base, definida, será feita uma representação unitária da mecânica quântica através da variedade simplética dada pelas Eqs. (4.1) e (4.2) com o objetivo de encontrarmos amplitudes em H_Γ .

Operadores unitários

Um operador U é dito unitário se obedecer à seguinte condição

$$UU^\dagger = 1 \quad \text{ou} \quad U^\dagger U = 1,$$

ou seja, seu inverso U^{-1} é igual ao seu adjunto U^\dagger . Assim, dois vetores arbitrários $|\psi_1\rangle$ e $|\psi_2\rangle$ podem ser transformados da seguinte maneira

$$|\psi'_1\rangle = U|\psi_1\rangle \quad e \quad |\psi'_2\rangle = U|\psi_2\rangle.$$

Porém, o produto escalar $\langle \psi'_1 | \psi'_2 \rangle$ leva a

$$\langle \psi'_1 | \psi'_2 \rangle = \langle \psi_1 | U^\dagger U | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle.$$

Assim, concluímos que uma transformação unitária não altera o produto escalar e nem a norma, conseqüentemente.

Operador translação em H_Γ

Agora, vamos construir um operador que desloca o estado espacialmente, mantendo as outras características intocadas. Tal operação é chamada translação infinitesimal. Tal operador deve observar quatro propriedades. Vamos denotá-lo por $T(a^i)$, definido por

$$T(a^i)\psi(q^i, p^i) = e^{i\phi}\psi\left(q^i + \frac{a^i}{2}, p^i\right), \quad (4.5)$$

onde $e^{i\phi}$ é uma fase arbitrária.

A primeira propriedade vem da conservação da probabilidade. Isto é, se o estado $|\psi\rangle$ é normalizado, então o estado transladado $T(a)|\psi\rangle$ também o será. Isso implica que a translação infinitesimal deve ser unitária, pois

$$\langle\psi|\psi\rangle = \langle\psi|T^\dagger(a)T(a)|\psi\rangle.$$

A segunda propriedade é consequência de translações infinitesimais sucessivas não necessariamente na mesma direção. Por exemplo, uma translação infinitesimal a^i seguida por outra b^i pode ser interpretada como uma única translação que seja a soma vetorial $a^i + b^i$, ou seja

$$T(a^i)T(b^i) = T(a^i + b^i).$$

A terceira propriedade vem do fato que uma translação no sentido oposto seja o mesmo que o inverso da translação original, portantoo

$$T(-a^i) = T^{-1}(a^i).$$

Finalmente, a quarta propriedade provém do fato que se $a^i \rightarrow 0$, a operação de translação se reduz ao operador identidade, isto é

$$\lim_{a^i \rightarrow 0} T(a^i) = 1.$$

Um operador que satisfaz essas propriedades pode ser escrito como

$$T(a^i) = e^{ik^i a^i}.$$

O que, através da relação de de Broglie, $\hat{p}^i = \hbar k^i$, fica

$$T(a^i) = e^{\frac{i\hat{p}^i a^i}{\hbar}}.$$

Portanto, nessa representação, o operador *momentum* é gerador de translações, produzindo, também, uma fase. Resta saber qual é a forma desse operador. Utilizando a Eq. (4.5) e o fato que a expansão em primeira ordem do operador translação é dada por

$$T(a^i) = 1 + \frac{i\hat{p}^i a^i}{\hbar},$$

temos

$$\left(1 + \frac{i\hat{p}^i a^i}{\hbar}\right)\psi(q^i, p^i) = e^{i\phi}\psi\left(q^i + \frac{a^i}{2}, p^i\right).$$

Usando $f(x+a) = e^{a\partial_x} f(x)$, chegamos a

$$\hat{p}^i \psi(q^i, p^i) = \frac{\hbar\phi}{a^i} \psi(q^i, p^i) - \frac{i\hbar}{2} \partial_{q^i} \psi(q^i, p^i).$$

Como o termo $\frac{\hbar\phi}{a}$ é um número, podemos escrever que

$$\frac{\hbar\phi}{a} = c.$$

Assim,

$$\phi = \frac{ac}{\hbar},$$

o que nos leva a concluir que c deve ter unidade de *momentum*. Fazendo, então, $c = p$, o operador *momentum* fica dado por

$$\hat{p}^i = p^i - \frac{i\hbar}{2} \partial_{q^i}. \quad (4.6)$$

Note que esse operador é hermitiano, pois $\partial_q = -\partial_q^\dagger$, sendo, portanto um observável. Através da propriedade 3.2.2 podemos facilmente verificar que

$$\hat{p} = p \star.$$

O próximo passo será a construção do operador posição.

Operador posição em H_Γ

O operador posição, assim como o operador *momentum*, deve ser um observável e, além disso, deve respeitar a transformação

$$T(a)\hat{q}T^\dagger(a) = \hat{q} + a. \quad (4.7)$$

E, para que possa ser fisicamente interpretado como posição, deve obedecer à relação de Heisenberg $[\hat{q}^i, \hat{p}^j] = i\hbar\delta_{ij}\mathbf{1}$. Vamos, então, considerar um operador posição arbitrário da forma

$$\hat{q} = Aq + Bp + C\partial_q + D\partial_p,$$

onde A , B , C e D são constantes. Aplicando a relação de Heisenberg, com o operador \hat{p} dado pela Eq. (4.6), temos

$$[Aq + Bp + C\partial_q + D\partial_p, p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q] = i\hbar,$$

que nos leva a

$$\frac{i\hbar A}{2} + D = i\hbar.$$

Portanto, existem diversas formas de se escrever o operador posição, todas elas igualmente válidas. Vamos escolher uma, para a nossa representação, que nos conduza à interpretação física do formalismo. Assim, vamos adotar $A = 1$, que implica $D = \frac{i\hbar}{2}$. Assim, o operador posição será

$$\tilde{q}^i = q^i + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p^i}, \quad (4.8)$$

que pode ser escrito como

$$\hat{q} = q \star.$$

É importante ressaltar que fica satisfeita a Eq. (4.7), pois

$$e^{\frac{i\hat{p}^i a^i}{\hbar}} \tilde{q}^i e^{-\frac{i\hat{p}^i a^i}{\hbar}} = \tilde{q}^i + a^i,$$

em que foi usada a relação de *Baker-Hausdorff*

$$e^A B e^{-A} = \sum_{n=0}^{\infty} [A, B]_n, \quad (4.9)$$

onde

$$[A, B]_0 = B, \quad [A, B]_1 = [A, B], \dots, \quad [A, B]_n = [A, [A, B]_{n-1}], \quad n \geq 2.$$

Observa-se também que tal operador pode gerar translações nos *momenta*, além, também, de uma fase. Para isso, vamos definir o operador unitário

$$S(\kappa^i) = e^{\frac{-i\hat{q}^i \kappa^i}{\hbar}},$$

que, atuando em uma função no espaço de fase $\psi(q, p)$ produz

$$S(\kappa^i)\psi(q^i, p^i) = e^{\frac{-i\hat{q}^i \kappa^i}{\hbar}}\psi(q^i, p^i)$$

e

$$S(\kappa^i)\psi(q^i, p^i) = e^{\frac{-iq^i \kappa^i}{\hbar}}\psi(q^i, p^i + \frac{\kappa^i}{2}).$$

Após definirmos os operadores posição e *momentum*, dados nas Eqs. (4.6) e (4.8), respectivamente, é necessário testar se tais operadores realmente se comportam como posição e *momentum*, o que pode ser feito através de um boost (*transformação pura de Galilei*), isto é, uma mudança no referencial adotado.

Operador *boost* em H_Γ

A transformação de Galilei, classicamente, é feita quando há necessidade de comparar resultados obtidos por observadores situados em diferentes referenciais inerciais.

Sua forma mais geral possível é dada por

$$\begin{aligned} q^{i'} &= Rq^i + v^i t + a^i, \\ t' &= t + \tau, \\ p^{i'} &= p^i + mv^i, \end{aligned} \tag{4.10}$$

onde R representa uma rotação espacial; a^i uma translação espacial; τ uma translação temporal; m , a massa da partícula; e v^i , a velocidade relativa entre os dois referenciais. A transformação pura de Galilei, também conhecida como *boost* é realizada fazendo $R = 1$, $a = 0$ e $\tau = 0$. Ou seja, em uma dimensão,

$$\begin{aligned} q' &= q + vt, \\ t' &= t \end{aligned}$$

e

$$p' = p + mv.$$

Vamos introduzir o operador que realiza essa transformação em H_Γ

$$\widehat{k}^i = m\widehat{q}^i - t\widehat{p}^i,$$

onde m e t representam os parâmetros massa e tempo, respectivamente. Assim, o operador-estrela referente ao *boost* é encontrado fazendo uso das Eqs. (4.6) e (4.8),

$$\widehat{k}^i = k^{i\star} = m(q^i + \frac{i\hbar}{2}\partial_{p^i}) - t(p^i - \frac{i\hbar}{2}\partial_{q^i}). \tag{4.11}$$

Note que esse operador satisfaz as relações de comutação

$$[\widehat{k}^i, \widehat{q}^j] = -t[\widehat{p}^i, \widehat{q}^j] = i\hbar t \delta_{ij} \mathbf{1} \tag{4.12}$$

e

$$[\widehat{k}^i, \widehat{p}^j] = m[\widehat{q}^i, \widehat{p}^j] = i\hbar m \delta_{ij} \mathbf{1}. \tag{4.13}$$

Um operador unitário que realiza o *boost* pode ser definido na forma

$$B(v^i) = e^{\frac{-iv^i \widehat{k}^i}{\hbar}}. \tag{4.14}$$

Portanto, \widehat{q}^i se transforma pelo *boost* de acordo com

$$B(v^i) \widehat{q}^i B(v^i)^\dagger = e^{\frac{-iv^i \widehat{k}^i}{\hbar}} \widehat{q}^i e^{\frac{iv^i \widehat{k}^i}{\hbar}}$$

e, usando novamente a relação de comutação dada pela Eq. (4.9), chegamos a

$$B(v^i)\hat{q}^i B(v^i)^\dagger = \hat{q}^i + v^i t \mathbf{1}, \quad (4.15)$$

o que nos leva a interpretá-lo, realmente, como operador posição. De maneira análoga o operador \hat{p}^i se transforma como *momentum*, através do *boost*

$$B(v^i)\hat{p}^i B(v^i)^\dagger = e^{-\frac{iv^i \hat{k}^i}{\hbar}} \hat{p}^i e^{\frac{iv^i \hat{k}^i}{\hbar}},$$

ou seja,

$$B(v^i)\hat{p}^i B(v^i)^\dagger = \hat{p}^i + mv^i \mathbf{1}, \quad (4.16)$$

além de obedecerem, por consistência, a relação de Heisenberg $[\hat{q}^i, \hat{p}^j] = i\hbar \delta^{ij} \mathbf{1}$.

Vamos analisar o que ocorre com essas variáveis quando aplicamos o gerador de *boost*, dado pela Eq. (4.14), em uma função $\psi(q, p)$, no espaço de fase. Para facilitar a visualização, será utilizada apenas uma dimensão, isto é

$$B(v)\psi(q, p) = e^{-\frac{iv\hat{k}}{\hbar}} \psi(q, p).$$

Usando as Eqs.(4.6), (4.8) em (4.11), chegamos a

$$e^{-\frac{iv\hat{k}}{\hbar}} \psi(q, p) = e^{-\frac{iv}{\hbar}(mq-tp)} e^{\frac{mv}{2}\partial_p} e^{\frac{vt}{2}\partial_q} \psi(q, p),$$

e, finalmente

$$e^{-\frac{iv\hat{k}}{\hbar}} \psi(q, p) = e^{-\frac{iv}{\hbar}(mq-tp)} \psi\left(q + \frac{vt}{2}, p + \frac{mv}{2}\right), \quad (4.17)$$

onde $e^{-\frac{iv}{\hbar}(mq-tp)}$ é uma fase. Nota-se, portanto que mesmo não podendo ser interpretados como posição e momentum, as variáveis $\{q^i, p^i\}$ carregam informação de posição e *momentum*, respectivamente. Dessa forma, a base $|q^i, p^i\rangle$ é usada para construir um referencial no espaço de Hilbert com conteúdo de espaço de fase, com as variáveis $\{q^i, p^i\}$ representando as coordenadas posição e *momentum* da variedade simplética. Com esses operadores construídos, é possível encontrar o operador gerador de rotações.

Operador gerador de rotações em H_Γ

A construção do operador translação deixou claro que o *momentum* é gerador de translações espaciais, exercendo também a mesma função na mecânica clássica. Esse paralelo nos leva a associar o momento angular L^i como gerador de rotações. As rotações espaciais, em R^3 , são representadas por matrizes quadradas, ortogonais, 3×3 , com nove elementos reais, porém, apenas três desses sendo independentes. O conjunto de todas as

operações de multiplicação com matrizes ortogonais possuem estrutura do grupo $SO(3)^1$, satisfazendo, portanto, as propriedades listadas a seguir.

(i) O produto de quaisquer duas matrizes ortogonais é uma matriz ortogonal.

$$(R_1)(R_2)(R_1)(R_1)^T = R_1 R_2 R_2^T R_1^T = \mathbf{1}$$

(ii) O produto é associativo.

$$R_1(R_2 R_3) = (R_1 R_2) R_3$$

(iii) A matriz identidade $\mathbf{1}$ corresponde fisicamente a não rodar.

$$R\mathbf{1} = \mathbf{1}R = R$$

(iv) Uma rotação no sentido contrário é representada pela matriz inversa.

$$RR^{-1} = R^{-1}R = \mathbf{1}$$

O grupo de rotação tem uma estrutura de variedade natural para o qual as operações do grupo são suaves, sendo portanto, um grupo de Lie.

Vamos definir o operador unitário de rotação infinitesimal, que produz uma rotação em torno do k -ésimo eixo da seguinte maneira

$$D_k(\theta) = 1 - \frac{iL^k d\theta}{\hbar}.$$

Uma rotação finita pode ser obtida através da composição de sucessivas rotações infinitesimais em torno de um mesmo eixo, o que nos leva a

$$D_k(\theta) = e^{-\frac{iL^k \theta}{\hbar}}.$$

O momento angular, classicamente, é definido através do produto vetorial entre o vetor posição \vec{q} e o vetor momento linear \vec{p} ,

$$\vec{L} = \vec{q} \times \vec{p}.$$

Assim, vamos introduzir o operador momento angular, em H_Γ , da seguinte maneira

$$\hat{l}^i = \epsilon_{ijk} \hat{q}^j \hat{p}^k,$$

onde ϵ_{ijk} é o símbolo de *Levi-Civita*. Portanto, substituindo as Eqs. (4.6) e (4.8) temos o

¹S significa *special*, O, *orthogonal*, e 3 representa o número de dimensões do espaço.

correspondente operador-estrela

$$\widehat{l}^i = l^{i\star} = \epsilon_{ijk} q^j p^k - \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} q^j \partial_{p^k} + \frac{i\hbar}{2} \epsilon_{ijk} p^k \partial_{q^j} + \frac{\hbar^2}{4} \partial_{q^j} \partial_{p^k}. \quad (4.18)$$

Note que

$$[\widehat{l}^i, \widehat{q}^j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \widehat{q}^k \quad (4.19)$$

e

$$[\widehat{l}^i, \widehat{p}^j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \widehat{p}^k. \quad (4.20)$$

Portanto, o operador rotação, em H_Γ , fica definido por

$$D_k(\theta) = e^{\frac{-i\widehat{l}^k \theta}{\hbar}}. \quad (4.21)$$

Como ilustração, considere uma rotação por um ângulo finito α em torno do eixo q^1 . O operador que realiza tal rotação é dado por

$$D_1(\alpha) = e^{\frac{-i\widehat{l}^1 \alpha}{\hbar}}.$$

O efeito da rotação de q^2 por um ângulo α , em torno de q^1 pode ser entendida através da transformação do operador \widehat{q}^2 ,

$$(\widehat{q}^2)_{R_1} = D_1(\alpha) \widehat{q}^2 D_1^\dagger(\alpha),$$

portanto,

$$(\widehat{q}^2)_{R_1} = e^{\frac{-i\widehat{l}^1 \alpha}{\hbar}} \widehat{q}^2 e^{\frac{i\widehat{l}^1 \alpha}{\hbar}}.$$

Utilizando as Eqs. (4.9) e (4.19), chegamos a

$$(\widehat{q}^2)_{R_1} = \widehat{q}^2 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \dots\right) + \widehat{q}^3 \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \dots\right),$$

e, então, lembrando que os termos entre parênteses correspondem às expansões para as funções cosseno e seno, respectivamente, temos

$$(\widehat{q}^2)_{R_1} = \widehat{q}^2 \cos \alpha + \widehat{q}^3 \sin \alpha.$$

Se considerarmos agora a rotação do eixo q^3 em torno de q^1 , usando os mesmos passos, encontramos

$$(\widehat{q}^3)_{R_1} = e^{\frac{-i\widehat{l}^1 \alpha}{\hbar}} \widehat{q}^3 e^{\frac{i\widehat{l}^1 \alpha}{\hbar}},$$

o que leva a

$$(\widehat{q}^3)_{R_1} = \widehat{q}^3 \left(1 - \frac{\alpha^2}{2!} + \dots\right) - \widehat{q}^2 \left(\alpha - \frac{\alpha^3}{3!} + \dots\right),$$

e, finalmente

$$(\hat{q}^3)_{R_1} = -\hat{q}^2 \sin \alpha + \hat{q}^3 \cos \alpha.$$

Portanto, a rotação de um ângulo α em torno do eixo q^1 pode ser representada matricialmente por

$$(\tilde{q}^i)_{R_1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha & \sin \alpha \\ 0 & -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} (\tilde{q}^i),$$

onde (\tilde{q}^i) corresponde à matriz coluna

$$(\tilde{q}^i) = \begin{pmatrix} \hat{q}^1 \\ \hat{q}^2 \\ \hat{q}^3 \end{pmatrix}.$$

Assim,

$$(\tilde{q}^i)_{R_1} = R_1(\alpha)(\tilde{q}^i),$$

onde $R_1(\alpha)$ corresponde à matriz de rotação de um ângulo α em torno do eixo q^1 . Procedendo da mesma forma, as matrizes de rotação em torno dos eixos q^2 e q^3 , ficam dadas, respectivamente, por

$$R_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix},$$

e,

$$R_3(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

em que as rotações foram parametrizadas por meio dos ângulos α , β e γ , correspondendo à rotações em torno dos eixos q^1 , q^2 e q^3 , respectivamente. Uma rotação espacial genérica pode ser obtida através da aplicação sucessiva dos operadores $R_1(\alpha)$, $R_2(\beta)$ e $R_3(\gamma)$, isto é

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_1(\alpha)R_2(\beta)R_3(\gamma).$$

Portanto, a matriz de rotação R , que aparece na transformação de Galilei genérica, dada na Eq. (4.10) é representada por

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma \cos \beta & \sin \gamma \cos \beta + \cos \gamma \sin \beta \sin \alpha & \sin \gamma \sin \alpha - \cos \gamma \sin \beta \cos \alpha \\ -\sin \gamma \cos \beta & \cos \gamma \cos \beta - \sin \gamma \sin \beta \sin \alpha & \cos \gamma \sin \alpha + \sin \gamma \sin \beta \cos \alpha \\ \sin \beta & -\cos \beta \sin \alpha & \cos \beta \cos \alpha \end{pmatrix}.$$

É importante ressaltar que rotações em torno de diferentes eixos não comutam, pois

$$[\hat{l}^i, \hat{l}^j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}^k. \quad (4.22)$$

Por isso o grupo de rotações em três dimensões é chamado de não-abeliano, ao contrário do grupo das translações, já que $[\hat{p}^i, \hat{p}^j] = 0$. Na próxima seção estudaremos a evolução temporal de uma função $\psi(q, p)$, em H_Γ .

4.3 A equação de Schroedinger no espaço de fase

Operador evolução temporal em H_Γ

Considere $|\psi(t)\rangle$, em H_Γ , como uma representação de um estado específico de um sistema quântico sujeito a mudanças em relação ao parâmetro tempo. Ao projetarmos esse vetor de estado, $|\psi(t)\rangle$, sobre H_Γ gerado pela base $\{|q^i, p^i\rangle\}$, encontramos uma função das variáveis q^i , p^i e t . Isto é

$$\langle q^i, p^i | \psi(t) \rangle = \psi(q^i, p^i; t).$$

Como q e p não representam autovalores dos operadores posição e *momentum*, mas sim coordenadas da variedade simplética, $|\psi(q^i, p^i; t)\rangle$ não pode ser interpretada como uma função de onda com o mesmo conteúdo entendido na mecânica quântica usual. Nosso objetivo agora é estudar a evolução temporal do estado representado pela função $\psi(q^i, p^i; t)$, isto é, como o sistema muda por um deslocamento temporal $t_0 \rightarrow t$.

Assim como no caso da translação e da rotação, vamos definir um operador $U(t, t_0)$, que relaciona o estado inicial com o final, sendo responsável, portanto pela translação temporal

$$\psi(q^i, p^i; t) = U(t, t_0)\psi(q^i, p^i, t_0).$$

É necessário que esse operador de evolução temporal seja unitário, para que haja a conservação da probabilidade, ou seja

$$U(t, t_0)^\dagger U(t, t_0) = \mathbf{1}.$$

A evolução temporal pode ser dada através da composição de várias translações temporais, isto é, se quisermos obter a evolução temporal de t_0 a t_2 , por exemplo, podemos primeiro considerar uma evolução de t_0 a t_1 e depois de t_1 a t_2 da seguinte maneira

$$U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0),$$

com $t_2 > t_1 > t_0$.

Uma translação temporal infinitesimal é escrita como

$$\psi(q^i, p^i; t_0 + dt) = U(t_0 + dt, t_0)\psi(q^i, p^i; t_0),$$

de tal maneira que, devido à continuidade, o operador infinitesimal de evolução temporal deve ser igual ao operador identidade quando dt tende a zero, ou seja

$$\lim_{dt \rightarrow 0} U(t_0 + dt, t_0) = \mathbf{1}.$$

Um operador desse tipo pode ser escrito na forma

$$U(t_0 + dt, t_0) = e^{-i\Omega dt},$$

cuja expansão em primeira ordem é

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - i\Omega dt,$$

onde Ω é um operador hermitiano que tem dimensão de frequência ou inverso de tempo. Fazendo um paralelo com a mecânica clássica, onde o Hamiltoniano H é gerador de evolução temporal, naturalmente surge a relação

$$\Omega = \frac{h(q, p)}{\hbar}.$$

Na representação simplética o operador Hamiltoniano é definido pelo operador-estrela

$$\hat{h} = h\star = \hat{h}(\hat{q}^i, \hat{p}^i) = \frac{\hat{p}^{i2}}{2m} + V(\hat{q}^i). \quad (4.23)$$

Assim, o operador de evolução temporal infinitesimal, em H_Γ , é dado por

$$U(t_0 + dt, t_0) = 1 - \frac{i\hat{h}dt}{\hbar}.$$

Uma equação diferencial fundamental para o operador de evolução temporal $U(t, t_0)$ pode ser deduzida explorando a propriedade de composição, fazendo uma translação temporal de t_0 a t e depois de t a $t + dt$, isto é

$$U(t + dt, t_0) = U(t + dt, t)U(t, t_0) = \left(1 - \frac{i\hat{h}dt}{\hbar}\right)U(t, t_0),$$

e, portanto,

$$U(t + dt, t_0) - U(t, t_0) = -\frac{i\hat{h}}{\hbar}dtU(t, t_0),$$

que, tomando o limite $dt \rightarrow 0$, nos leva a

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0) = \widehat{h}U(t, t_0) = h \star U(t, t_0). \quad (4.24)$$

Como $\widehat{h}(\widehat{q}^i, \widehat{p}^i)$ é independente do tempo, a solução para a equação diferencial acima é dada por

$$U(t, t_0) = e^{\frac{-i\widehat{h}(t-t_0)}{\hbar}},$$

ou, tomando $t_0 = 0$,

$$U(t, t_0) = e^{\frac{-it\widehat{h}}{\hbar}}. \quad (4.25)$$

Se multiplicarmos ambos os lados da Eq. (4.24) pela função $\psi(q^i, p^i; t_0)$, referente ao estado inicial, no espaço de fase, temos

$$i\hbar\partial_t U(t, t_0)\psi(q^i, p^i; t_0) = \widehat{h}U(t, t_0)\psi(q^i, p^i; t_0),$$

e, então

$$i\hbar\partial_t \psi(q^i, p^i; t) = \widehat{h}\psi(q^i, p^i; t) = h \star \psi(q^i, p^i; t). \quad (4.26)$$

Utilizando as Eqs.(4.6), (4.8), (4.23) e (4.26), obtemos, para uma dimensão,

$$i\hbar\partial_t \psi(q, p; t) = \left(\frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar^2}{8m} \partial_q^2 - \frac{i\hbar p}{2m} \partial_q \right) \psi(q, p; t) + V(q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p) \psi(q, p; t), \quad (4.27)$$

que é a equação de Schroedinger representada no espaço de fase.

As relações de comutação dadas pelas Eqs. (4.12), (4.13), (4.19), (4.20) e (4.22) sugerem que tais operadores satisfaçam a álgebra de Galilei-Lie. Adicionando o operador \widehat{h} a essa lista, temos a união do grupo das translações $T(3)$ com o das rotações $SO(3)$, formando, portanto, o grupo de Galilei, como era esperado. Essa representação satisfaz as seguintes relações

$$[\widehat{l}^i, \widehat{l}^j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{l}^k,$$

$$[\widehat{l}^i, \widehat{k}^j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{k}^k,$$

$$[\widehat{l}^i, \widehat{p}^j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\widehat{p}^k,$$

$$[\widehat{k}^i, \widehat{k}^j] = 0,$$

$$[\widehat{k}^i, \widehat{p}^j] = i\hbar m \delta_{ij} \mathbf{1},$$

$$[\widehat{k}^i, \widehat{h}] = i\hbar \widehat{p}^i,$$

$$[\widehat{p}^i, \widehat{p}^j] = 0,$$

$$[\widehat{p}^i, \widehat{h}] = 0,$$

$$[\widehat{l}, \widehat{h}] = 0.$$

Esse resultado foi amplamente discutido e demonstrados na referências [19] e [20].

4.4 *Quasi*-amplitudes de probabilidades

O formalismo de Wigner, apesar de ser vantajoso, possui algumas dificuldades, como já frisamos. Por exemplo, encontrar a função de Wigner que descreve um determinado estado quântico que se altera com o tempo esbarra na dificuldade em encontrar a solução da intrincada equação de evolução temporal dada pela Eq. (3.18), em virtude dos operadores bidiferenciais. Outro problema reside na obtenção de teorias de calibre que, na mecânica quântica, é realizada através da introdução de fases nas funções de onda; e a função de Wigner não possui fase. A necessidade de um espaço vetorial torna-se um problema para estudar teorias de perturbação através do formalismo de Wigner, além de não aparecerem efeitos de superposição. Nas referências [29] e [30] tentou-se a construção de amplitudes no espaço de fase com o objetivo de contornar esses problemas. Porém, tal tentativa carecia de uma interpretação física consistente. No presente trabalho, construímos funções de ondas no espaço de fase, com o intuito de associá-las à função de Wigner de maneira que os resultados físicos sejam obtidos consistentemente. Esta associação é estabelecida através da relação [17] - [20]

$$f_w(q, p, t) = \psi(q, p; t) \star \psi^\dagger(q, p; t). \quad (4.28)$$

Para que esta seja uma relação válida, é necessário que as propriedades da função de Wigner, apresentadas no capítulo 2 sejam satisfeitas.

Primeiro, tomemos a Eq. (4.26) e seu conjugado hermiteano

$$i\hbar\partial_t\psi(q, p; t) = h(q, p) \star \psi(q, p; t) \quad (4.29)$$

e

$$-i\hbar\partial_t\psi(q, p; t)^\dagger = \psi(q, p; t)^\dagger \star h(q, p). \quad (4.30)$$

Multiplicando-se a Eq. (4.29) à direita por $\star\psi(q, p; t)^\dagger$, a Eq. (4.30) à esquerda por $\psi(q, p; t)\star$ e, em seguida subtrair as equações, chegamos a

$$i\hbar\partial_t(\psi(q, p; t)\star\psi(q, p; t)^\dagger) = h(q, p)\star(\psi(q, p; t)\star\psi(q, p; t)^\dagger) - (\psi(q, p; t)\star\psi(q, p; t)^\dagger)\star h(q, p).$$

Utilizando a relação proposta pela Eq. (4.28) temos

$$i\hbar\partial_t f_w(q, p; t) = h(q, p) \star f_w(q, p; t) - f_w(q, p; t) \star h(q, p),$$

e, portanto,

$$i\hbar\partial_t f_w(q, p; t) = \{h(q, p), f_w(q, p; t)\}_M,$$

que é a equação que descreve a evolução temporal da função de Wigner, cujo limite clássico obedece a equação de Liouville.

Foi visto que a função de Wigner é normalizada, fato expresso na propriedade 2.3.3 e concretizado na Eq. (4.28)

$$\int dqdp f_w(q, p) = \int dqdp \psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger = |\psi(q, p)|^2 = 1,$$

motivo pelo qual $\psi(q, p)$ é interpretada como uma *quasi*-amplitude de probabilidades.

O valor esperado de um observável é definido como a média dos valores possíveis, ponderados pelas respectivas probabilidades de ocorrências. O valor médio para o observável \hat{q} , em um estado $|\psi\rangle$, por exemplo, é dado por

$$\langle \hat{q} \rangle = \langle \psi | \hat{q} | \psi \rangle = \int dqdpdq'dp' \langle \psi | q, p \rangle \langle q, p | \hat{q} | q', p' \rangle \langle q', p' | \psi \rangle.$$

Utilizando a Eq. (4.8), vemos que

$$\langle q, p | \hat{q} | q', p' \rangle = (q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p) \langle q, p | q', p' \rangle = \hat{q}(q, p) \delta(q - q') \delta(p - p'),$$

e, portanto,

$$\langle \hat{q} \rangle = \int dqdp \psi(q, p) \hat{q}(q, p) \psi(q, p)^\dagger.$$

As propriedades do produto-estrela nos permite escrever essa média da seguinte forma

$$\langle \hat{q} \rangle = \int dqdp \hat{q} (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger) = \int dqdp \hat{q} f_w(q, p),$$

que é outra propriedade da função de Wigner. Note que

$$\langle \hat{q} \rangle = \int dqdp \hat{q} (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger) = \int dq \hat{q} \sigma(q),$$

onde

$$\sigma(q) = \int dp (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger) = \int dp f_w(q, p)$$

representa a densidade de probabilidade associada à medida do observável \hat{q} , na posição

q . Analogamente, o valor esperado do operador \hat{p} será dado por

$$\langle \hat{p} \rangle = \int dqdp \hat{p} (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger) = \int dq \hat{p} \sigma(p),$$

em que

$$\sigma(p) = \int dq (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger) = \int dq f_w(q, p)$$

corresponde à densidade de probabilidade associada à medida do operador \hat{p} com *momentum* p . Em geral, o valor esperado de um operador-estrela qualquer $\hat{a}(q, p) = a(q, p) \star$ é dado por

$$\langle \hat{a}(q, p) \rangle = \int dqdp \hat{a} (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger) = \int dqdp \hat{a}(q, p) f_w(q, p). \quad (4.31)$$

Além disso, sabe-se que a função de Wigner é real, como garante a Eq. (4.28), pois

$$(\psi \star \psi^\dagger)^\dagger = (\psi^\dagger)^\dagger \star (\psi)^\dagger = \psi \star \psi^\dagger,$$

isto é, $f_w = f_w^\dagger$.

Por último, podemos escrever uma equação de autovalores para o hamiltoniano, em H_Γ ,

$$h(q, p) \star \psi(q, p) = E \psi(q, p), \quad (4.32)$$

e multiplicar à direita por $\star \psi(q, p)^\dagger$, encontrando

$$h(q, p) \star f_w(q, p) = E f_w(q, p).$$

Isso mostra que $\psi(q, p)$ e $f_w(q, p)$ satisfazem a mesma equação de autovalor. Portanto, funções de Wigner podem ser encontradas quando procuramos por soluções reais de $\psi(q, p)$. Conclui-se, dessa forma, que o produto dado pela Eq. (4.28) promove um outro formalismo para a mecânica quântica, com uma interpretação física consistente, adicionando ferramentas matemáticas necessárias para resolver problemas com teorias de calibre, pois fases podem ser introduzidas na solução de ψ , efeitos de interferência, já que podemos ter soluções do tipo $\psi = \phi_1 + \phi_2$.

4.5 Matriz densidade em H_Γ

A matriz densidade relaciona-se com a função de Wigner através da Eq. (3.1)

$$\hat{\rho} = 2\pi\hbar f_w,$$

onde usando a Eq. (4.28) temos

$$\hat{\rho} = 2\pi\hbar\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger.$$

Derivando em relação ao tempo, chegamos a

$$\partial_t \hat{\rho} = 2\pi\hbar\{(\partial_t \psi) \star \psi^\dagger + \psi \star (\partial_t \psi^\dagger)\},$$

e, de acordo com a Eq. (4.26), temos que

$$i\hbar\partial_t \hat{\rho} = h \star (2\pi\hbar\psi \star \psi^\dagger) - (2\pi\hbar\psi \star \psi^\dagger) \star h,$$

isto é,

$$i\hbar\partial_t \hat{\rho} = \hat{h}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{h} = [\hat{h}, \hat{\rho}].$$

Isso mostra que o operador $\hat{\rho}$ satisfaz a equação de Liouville-von Neumann e que, de forma consistente, nos leva a

$$i\hbar\partial_t f_w(q, p; t) = [\hat{h}, f_w(q, p; t)],$$

que é a equação dinâmica da função de Wigner [18].

4.6 Teorema de Ehrenfest

O valor médio de um operador-estrela é calculado pela Eq. (4.31) e, para o operador posição \hat{q} é expresso por

$$\langle \hat{q} \rangle = \int dqdp \hat{q} (\psi(q, p) \star \psi(q, p)^\dagger).$$

Se derivarmos o valor médio da posição em relação ao tempo, lembrando que \hat{q} é independente do tempo, e usarmos a Eq. (4.26), temos

$$\partial_t \langle \hat{q} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int dqdp [\hat{q}, \hat{h}] \psi \star \psi^\dagger. \quad (4.33)$$

Analogamente, para o operador *momentum* \hat{p} , temos

$$\partial_t \langle \hat{p} \rangle = \frac{1}{i\hbar} \int dqdp [\hat{p}, \hat{h}] \psi \star \psi^\dagger. \quad (4.34)$$

Vamos considerar um hamiltoniano do tipo $\hat{h} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{q})$ aliado ao fato que [33]

$$[\hat{q}, F(\hat{p})] = i\hbar \frac{\partial F(\hat{p})}{\partial \hat{p}},$$

e

$$[\hat{p}, F(\hat{q})] = -i\hbar \frac{\partial F(\hat{q})}{\partial \hat{p}},$$

as Eqs.(4.33) e (4.34) ficam na forma

$$\partial_t \langle \hat{q} \rangle = \frac{1}{m} \int dq dp p \hat{p} f_w = \frac{\langle \hat{p} \rangle}{m},$$

e

$$\partial_t \langle \hat{p} \rangle = -\langle \partial_{\hat{q}} V(\hat{q}) \rangle,$$

resultado conhecido como segunda lei de Newton, indicando que os resultados clássicos são obtidos quando considerarmos a constante de Planck suficientemente pequena, isto é $\hbar \rightarrow 0$ [18].

O formalismo descrito nesse capítulo é alternativo a outros existentes na literatura da mecânica quântica, nos quais fora utilizada a álgebra de Lie. Tem como vantagem a construção de *quasi*-amplitudes de probabilidades no espaço de fase com um viés pedagógico e que aspectos físicos de maneira mais clara, permitindo abordagens diferentes daquelas usando somente a função de Wigner. No próximo capítulo este formalismo será aplicado para os casos do oscilador harmônico quântico e o oscilador amortecido quântico.

5 Osciladores Quânticos

Neste capítulo, apresentaremos os resultados da aplicação do método desenvolvido no capítulo anterior. Primeiro, resolveremos o oscilador harmônico quântico, através da equação de autovalores no espaço de fase, utilizando os operadores apresentados no Capítulo 4. Assim, deduziremos a função de onda para seus estados, bem como a função de Wigner respectiva. Em seguida, está o nosso principal objetivo. Através do mesmo procedimento, estudaremos a função de Wigner do oscilador amortecido quântico.

5.1 Oscilador Harmônico Quântico

Na natureza, uma grande quantidade de sistemas físicos, quando estudados em regiões próximas da posição de equilíbrio estável, tomando o limite para pequenas oscilações, são governados pelas equações do oscilador harmônico. Por isso, apesar de simples, seus resultados possuem várias aplicações práticas. O objetivo aqui será resolver o oscilador harmônico com o intuito de exemplificar o método construído nesse trabalho. Esse problema foi resolvido algebricamente no espaço de fase [18]. Aqui utilizaremos o procedimento adotado na referência [19].

O hamiltoniano de um oscilador harmônico simples é dado por

$$H(q, p) = \frac{P^2 + Q^2}{2},$$

onde, para facilitar a computação, adotamos $\hbar = \omega = m = 1$. Portanto, a equação de autovalores no espaço de fase, dada pela Eq. (4.32),

$$h(q, p) \star \psi(q, p) = E\psi(q, p),$$

pode ser escrita na forma

$$\frac{\widehat{p}^2 + \widehat{q}^2}{2}\psi(q, p) = E\psi(q, p).$$

Substituindo os operadores \hat{p} e \hat{q} , dados pelas Eqs.(4.6) e (4.8), respectivamente, temos

$$[(p - \frac{i}{2}\partial_q)^2 + (q + \frac{i}{2}\partial_p)^2]\psi(q, p) = 2E\psi(q, p),$$

que leva a

$$[p^2 - \frac{i}{2}p\partial_q - \frac{1}{4}\partial_q^2 + q^2 + \frac{i}{2}q\partial_p - \frac{1}{4}\partial_p^2]\psi(q, p) = 2E\psi(q, p).$$

Separando a parte real, da imaginária,

$$[p^2 - \frac{1}{4}\partial_q^2 + q^2 - \frac{1}{4}\partial_p^2 - 2E]\psi(q, p) + [-\frac{i}{2}p\partial_q + \frac{i}{2}q\partial_p]\psi(q, p) = 0,$$

conclui-se que

$$[p^2 - \frac{1}{4}\partial_q^2 + q^2 - \frac{1}{4}\partial_p^2 - 2E]\psi(q, p) = 0,$$

e

$$[-p\partial_q + q\partial_p]\psi(q, p) = 0.$$

Uma solução que satisfaz tanto a parte imaginária quanto a real é $\psi(q, p) = \psi(4h)$, onde $h = \frac{p^2+q^2}{2}$. Assim, definindo $z = 4h$, temos

$$\partial_q = \frac{\partial z}{\partial q}\partial_z \rightarrow \partial_q = 4q\partial_z,$$

$$\partial_p = \frac{\partial z}{\partial p}\partial_z \rightarrow \partial_p = 4p\partial_z,$$

e

$$\partial_q^2 = 16q^2\partial_z^2 + 4\partial_z,$$

$$\partial_p^2 = 16p^2\partial_z^2 + 4\partial_z.$$

Assim, chegamos a

$$[\frac{z}{4} - z\partial_z^2 - \partial_z - E]\psi(z) = 0.$$

Se escolhermos o *ansatz* $\psi(z) = e^{-\frac{z}{2}}L(z)$, encontraremos

$$[z\partial_z^2 + (1-z)\partial_z + E - \frac{1}{2}]L(z) = 0.$$

Esse resultado pode ser comparado com a equação diferencial de Laguerre

$$\left(x\frac{d^2}{dx^2} + (m+1-x)\frac{d}{dx} + n\right)L_n^m(x) = 0, \quad (5.1)$$

em que, para o nosso caso,

$$m = 0 \quad e \quad n = E - \frac{1}{2} = 0, 1, 2, \dots$$

com a energia dada por

$$E_n = n + \frac{1}{2}. \quad (5.2)$$

Então, as soluções para o oscilador harmônico dadas por

$$\psi_n(q, p) = e^{-(q^2+p^2)} L_n(2(q^2 + p^2)), \quad (5.3)$$

onde L_n corresponde ao polinômio de Laguerre de ordem n . A forma geral do polinômio de Laguerre é expressa por

$$L_n^m(x) = e^x \frac{x^{-m}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+m}),$$

e, para $m = 0$,

$$L_n = \frac{e^x}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^n).$$

Calculando a solução para o estado fundamental, $n = 0$, temos

$$L_0(x) = 1,$$

então

$$\psi_0(q, p) = e^{-(q^2+p^2)}. \quad (5.4)$$

Para o primeiro estado excitado, $n = 1$,

$$L_1(x) = -x + 1,$$

portanto,

$$\psi_1(q, p) = e^{-(q^2+p^2)} (1 - 2(q^2 + p^2)). \quad (5.5)$$

Note que o resultado dado pela Eq. (5.5) representa uma amplitude de *quasi*-probabilidades no espaço de fase, não sendo, portanto a função de Wigner correspondente ao estado fundamental do oscilador harmônico expressa na Eq. (2.15). Para calcularmos a função de Wigner, basta fazer uso da Eq. (4.28), isto é, para o estado fundamental,

$$f_w^0 = \psi_0(q, p) \star \psi_0(q, p)^\dagger.$$

Como $z = 4h = 2(q^2 + p^2)$, a Eq. (5.4) pode ser escrita como

$$\psi_0(h) = e^{-2h},$$

e então, como as amplitudes são reais,

$$f_w^0 = e^{-2h} \star \psi_0(h).$$

A equação de autovalores, dada pela Eq. (4.32), nos leva a

$$f_w^0 = e^{-2E_0} \psi_0(q, p),$$

e, como $E_0 = 1/2$, temos

$$f_w^0 = e^{-1} e^{-(q^2+p^2)}. \quad (5.6)$$

Para o primeiro estado excitado, $n = 1$, encontramos

$$f_w^1 = -e^{-2E_1} (4E_1 - 1) \psi_1(q, p),$$

e como $E_1 = 3/2$, temos

$$f_w^1 = 5e^{-3} e^{-(q^2+p^2)} (2q^2 + 2p^2 - 1). \quad (5.7)$$

Note que as soluções encontradas para a função de Wigner coincidem, a menos de uma constante, com aquelas do capítulo 2 dadas pelas Eqs.(2.14) e (2.15), quando foi utilizada apenas a definição da função de Wigner. Esse resultado é consistente, já que $\psi(q, p)$ e $f_w(q, p)$ obedecem à mesma equação de autovalores. Note que através desse procedimento, é possível encontrar mais soluções para a função de Wigner do que o usual, já que podemos ter

$$f_w = \psi_1 \star \psi_2.$$

Portanto, agora é possível visualizar os efeitos de interferência.

5.2 Oscilador amortecido no espaço de fase

Sistemas dissipativos na mecânica quântica tem atraído a atenção de vários autores desde a década de 1930 até o presente, por serem irreversíveis temporalmente [37]-[41]. Isso porque praticamente todos os fenômenos físicos experimentados no cotidiano se comportam dessa maneira. Porém, a natureza física de nossos modelos básicos são reversíveis. A dissipação emerge da interação do sistema em questão com suas vizinhanças sendo que esse fluxo energético se dá de maneira irreversível. As leis básicas da dinâmica quântica são do tipo reversíveis, pois tratam de sistemas fechados (universo, por exemplo). Tais sistemas são descritos pela equação de Schroedinger e governados pelo Hamiltoniano, que representa a energia total do sistema sendo, portanto, uma constante de movimento,

por ser independente do tempo. Uma revisão mais abrangente pode ser encontrada na referência [42].

O oscilador harmônico quântico amortecido é o sistema mais simples na natureza que lida com a dissipação de energia. Porém, possui grande importância na física, sendo aplicado especialmente em óptica quântica, por exemplo no decaimento de um estado excitado de um átomo para um estado de energia mais baixa, e no decaimento da radiação de um campo eletromagnético dentro de uma cavidade com espelhos parcialmente transparentes, além de abrir portas para um melhor entendimento das colisões extremamente inelásticas na física nuclear [43] - [48]. Um dos primeiros a investigar o problema foi Bateman [49], em 1931 com a ideia de Hamiltoniano duplo dependente do tempo. Em geral, o amortecimento de um sistema é descrito pela sua interação com um reservatório, com um grande número de graus de liberdade, isto é, formado por vários subsistemas que interagem com o sistema quântico de interesse. Dessa maneira, não é possível realizar medidas sobre cada um e nem ter conhecimento completo da interação entre o sistema e o reservatório, o que nos força a adotar o formalismo do operador densidade. Já que nosso interesse reside apenas na evolução das variáveis do sistema, podemos eliminar as variáveis do reservatório usando o operador densidade reduzido do sistema na representação da interação. Isso pode ser feito considerando um sistema S interagindo com um reservatório R , onde o operador densidade do conjunto é denotado por ρ_{SR} . O operador reduzido do sistema pode ser obtido através do traço sobre as coordenadas do reservatório

$$\rho_S = \text{Tr}_R(\rho_{SR}). \quad (5.8)$$

Podemos assumir que antes da interação, o sistema e o reservatório estão desacoplados de maneira que o operador densidade do conjunto ρ_{SR} , no tempo t_0 , é dado pelo produto direto

$$\rho_{SR} = \rho_S \otimes \rho_R \quad (5.9)$$

do operador densidade do sistema ρ_S e do reservatório ρ_R . Nesse instante t_0 , a energia de interação entre o sistema e o reservatório $H(t_0)$ é zero. Após esse instante, a interação tem início e a evolução temporal de ρ_{SR} é dada por

$$i\hbar \frac{d}{dt} \rho_{SR}(t) = [H(t), \rho_{SR}(t)], \quad (5.10)$$

com

$$\rho_{RS}(t) = e^{\frac{iHt}{\hbar}} \rho_{RS}(t_0) e^{-\frac{iHt}{\hbar}}.$$

A integração da Eq. (5.10) nos leva à equação de evolução de ρ_{SR}

$$\rho_{SR}(t) = \rho_{SR}(t_0) - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [H(t'), \rho_{SR}(t')] dt'. \quad (5.11)$$

Substituindo a Eq. (5.11) na Eq. (5.10), chegamos a

$$\frac{d}{dt} \rho_{SR}(t) = -\frac{i}{\hbar} [H(t), \rho_{SR}(t_0)] - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t [H(t), [H(t'), \rho_{SR}(t')]] dt'. \quad (5.12)$$

Se a energia de interação $H(t)$ for suficientemente pequena, então procuramos uma solução para a Eq. (5.12) na forma

$$\rho_{SR}(t) = \rho_S(t) \otimes \rho_R(t_0) + \rho_c(t), \quad (5.13)$$

na qual o reservatório encontra-se em equilíbrio. Para que a Eq. (5.13) satisfaça a Eq. (5.8), torna-se necessária a imposição

$$Tr_R(\rho_c) = 0.$$

Assim, substituindo a Eq. (5.13) na Eq. (5.12) e usando a Eq. (5.8), temos

$$\frac{d}{dt} \rho_S(t) = -\frac{i}{\hbar} Tr_R[H(t), \rho_S(t_0) \otimes \rho_R(t_0)] - \frac{1}{\hbar^2} Tr_R \int_{t_0}^t [H(t), [H(t'), \rho_S(t') \otimes \rho_R(t_0)]] dt'. \quad (5.14)$$

Claramente, ρ_S determina as propriedades estatísticas do sistema e depende da história temporal, de t_0 a t' como prevê a integração. Como o amortecimento destrói a memória do passado, o estado futuro do sistema depende somente do estado presente, sendo, portanto, independente dos eventos no passado. Processos desse tipo são conhecidos como processos de *Markov*. Além desse, diversos outros formalismos diferentes foram propostos por outros autores no estudo do amortecimento; vide referências [37]- [49].

Em geral, distribuições de *quasi*-probabilidades no espaço de fase, como a função de Wigner, tem se mostrado extremamente úteis no estudo de sistemas quânticos não só como uma ferramenta matemática, mas também porque induz uma conexão entre o comportamento clássico e quântico. Nosso objetivo nesse capítulo é aplicar o método descrito no Capítulo 2 para o caso do oscilador quântico amortecido e encontrar as soluções para as amplitudes no espaço de fase, bem como as funções de Wigner correspondentes.

Vamos considerar o hamiltoniano [50]- [51]

$$\hat{h} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \hat{q}^2) - \frac{\lambda}{2}(\hat{q}\hat{p} - \hat{p}\hat{q}), \quad (5.15)$$

onde $\lambda < 1$ corresponde à frequência de amortecimento e adotamos $\hbar = \omega = m = 1$.

Usando os operadores dados pelas Eqs. (4.6) e (4.8),

$$\hat{p} = p - \frac{i}{2}\partial_q$$

e

$$\hat{q} = q + \frac{i}{2}\partial_p,$$

o hamiltoniano dado na Eq. (5.15) fica escrito na forma

$$\hat{h} = \frac{1}{2}(p^2 + q^2 + iq\partial_p - ip\partial_q - \frac{1}{4}\partial_q^2 - \frac{1}{4}\partial_p^2) - \frac{\lambda}{2}(2qp + ip\partial_p - iq\partial_q + \frac{1}{2}\partial_q\partial_p). \quad (5.16)$$

Assim, a Eq. (4.32) de autovalores,

$$\hat{h}\psi(q, p) = E\psi(q, p),$$

fica na forma

$$\frac{1}{2}(p^2 + q^2 + iq\partial_p - ip\partial_q - \frac{1}{4}\partial_q^2 - \frac{1}{4}\partial_p^2)\psi(q, p) - \frac{\lambda}{2}(2qp + ip\partial_p - iq\partial_q + \frac{1}{2}\partial_q\partial_p)\psi(q, p) = E\psi(q, p).$$

Separando a parte imaginária da real, temos

$$(p^2 + q^2)\psi(q, p) - \frac{1}{4}\partial_q^2\psi(q, p) - \frac{1}{4}\partial_p^2\psi(q, p) - 2\lambda qp\psi(q, p) - \frac{1}{2}\partial_q\partial_p\psi(q, p) - 2E\psi(q, p) = 0 \quad (5.17)$$

e

$$q\partial_p\psi(q, p) - p\partial_q\psi(q, p) + \lambda p\partial_p\psi(q, p) - \lambda q\partial_q\psi(q, p) + \frac{\lambda}{2}(q - p)\psi(q, p) = 0. \quad (5.18)$$

Uma solução que satisfaz ambas as partes é $\psi(q, p) = \psi(h)$. Fazendo então uma mudança de variável na qual

$$z = h = \frac{1}{2}(p^2 + q^2) - \lambda qp,$$

segue que

$$\partial_q = \frac{\partial z}{\partial q} \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \partial_q = (q - \lambda p)\partial_z,$$

$$\partial_p = \frac{\partial z}{\partial p} \frac{\partial}{\partial z} \rightarrow \partial_p = (p - \lambda q)\partial_z,$$

$$\partial_q^2 = \partial_q(q\partial_z - \lambda p\partial_z) \rightarrow \partial_q^2 = \partial_z + (q - \lambda p)^2\partial_z^2,$$

$$\partial_p^2 = \partial_p(p\partial_z - \lambda q\partial_z) \rightarrow \partial_p^2 = \partial_z + (p - \lambda q)^2\partial_z^2,$$

e

$$\partial_q\partial_p = \partial_q(p - \lambda q)\partial_z \rightarrow \partial_q\partial_p = (p - \lambda q)(q - \lambda p)\partial_z^2 - \lambda\partial_z.$$

Substituindo esses resultados na Eq. (5.17) que trata da parte real, temos

$$\left[2z - \frac{1}{4}(\partial_z + (q - \lambda p)^2 \partial_z^2 + \partial_z + (p - \lambda q)^2 \partial_z^2) - \frac{\lambda}{2}((p - \lambda q)(q - \lambda p) \partial_z^2 - \lambda \partial_z) - 2E\right] \psi(z) = 0,$$

que, após algumas manipulações algébricas, se resume a

$$2(z - E)\psi(z) + \frac{\lambda^2 - 1}{2} \partial_z \psi(z) + \frac{\lambda^2 - 1}{2} z \partial_z^2 \psi(z) = 0. \quad (5.19)$$

Adotando

$$a = \frac{1 - \lambda^2}{2}, \quad (5.20)$$

a Eq. (5.19) fica

$$-az \partial_z^2 \psi(z) - a \partial_z \psi(z) + 2(z - E)\psi(z) = 0. \quad (5.21)$$

Vamos propor uma solução do tipo

$$\psi(z) = e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}}\omega(z).$$

Assim, as derivadas são escritas na forma

$$\partial_z \psi(z) = -\sqrt{\frac{2}{a}} e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}}\omega(z) + e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}}\omega'(z),$$

e

$$\partial_z^2 \psi(z) = \frac{2}{a} e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}}\omega(z) - 2\sqrt{\frac{2}{a}} e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}}\omega'(z) + e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}}\omega''(z),$$

onde $\omega'(z) = \partial_z \omega(z)$ e $\omega''(z) = \partial_z^2 \omega(z)$. Substituindo esses resultados na Eq. (5.21), chegamos a

$$\left(\sqrt{\frac{2}{a}} - \frac{2E}{a}\right)\omega(z) + \left(2z\sqrt{\frac{2}{a}} - 1\right)\omega'(z) - z\omega''(z) = 0. \quad (5.22)$$

Fazendo uma nova mudança de variáveis,

$$y = 2z\sqrt{\frac{2}{a}} \rightarrow z = \frac{y}{2}\sqrt{\frac{a}{2}},$$

temos que

$$\partial_z = 2\sqrt{\frac{2}{a}}\partial_y,$$

e

$$\partial_z^2 = \frac{8}{a}\partial_y^2.$$

Substituindo na Eq. (5.22), chegamos a

$$y\partial_y^2 \omega(y) + (1 - y)\partial_y \omega(y) - \left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\sqrt{2a}}\right)\omega(y) = 0. \quad (5.23)$$

Note que a solução para a Eq. (5.23) é uma função hipergeométrica confluyente na forma

$$\omega(z) = F\left(\frac{1}{2} - \frac{E}{\sqrt{2a}}; 1; 2z\sqrt{\frac{2}{a}}\right).$$

Em termos dos polinômios de Laguerre, dado pela Eq. (5.1), em que $m = 0$, e $n = \frac{E}{\sqrt{2a}} - \frac{1}{2}$, usando a Eq. (5.20), a energia do oscilador amortecido é dada por

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) (1 - \lambda^2)^{\frac{1}{2}}, \quad (5.24)$$

onde $n \in \mathbb{Z}$. Note que, caso $\lambda = 0$, teremos o caso do oscilador harmônico simples, dado pela Eq. (5.2). Assim as soluções da Eq. (5.21) são dadas por

$$\psi_n(h) = e^{-z\sqrt{\frac{2}{a}}L_n(h)}. \quad (5.25)$$

As funções de Wigner podem ser encontradas através da Eq. (4.28), inclusive outras soluções que não apareceriam usando o método de Wigner usual, através dos efeitos de interferência. Seguem alguns gráficos da função de Wigner para alguns estados do oscilador quântico amortecido, com $\lambda = 0, 1$. Observa-se que para níveis excitados mais altos, a função de Wigner apresenta uma região negativa maior, indicando a não classicidade do estado.

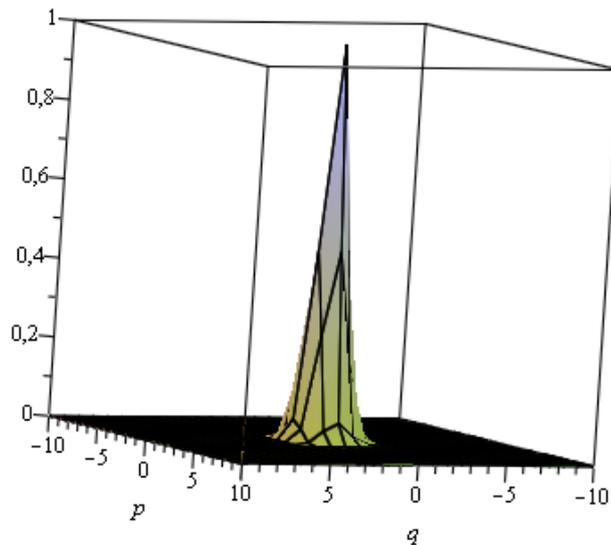


Figura 3: Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 0$

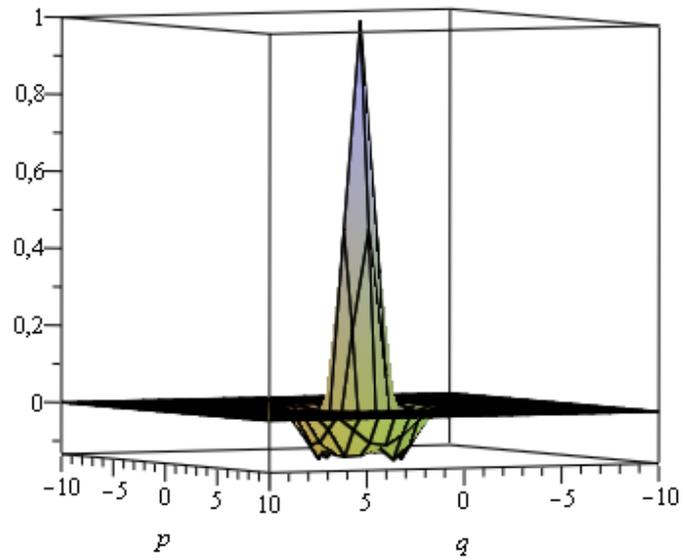


Figura 4: Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 1$

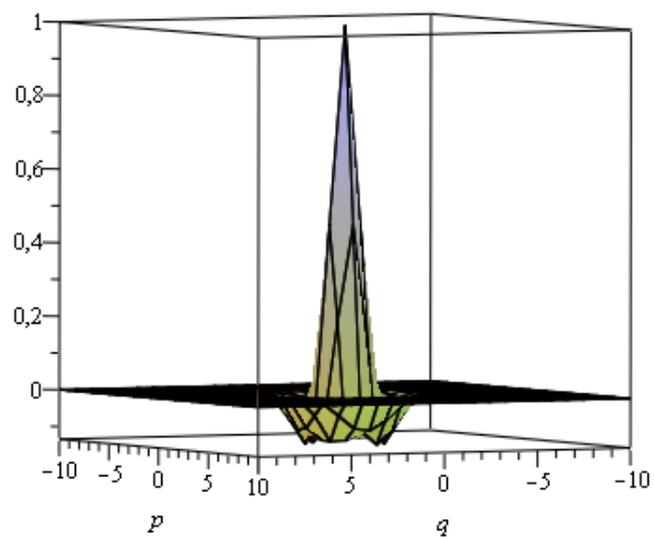


Figura 5: Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 2$

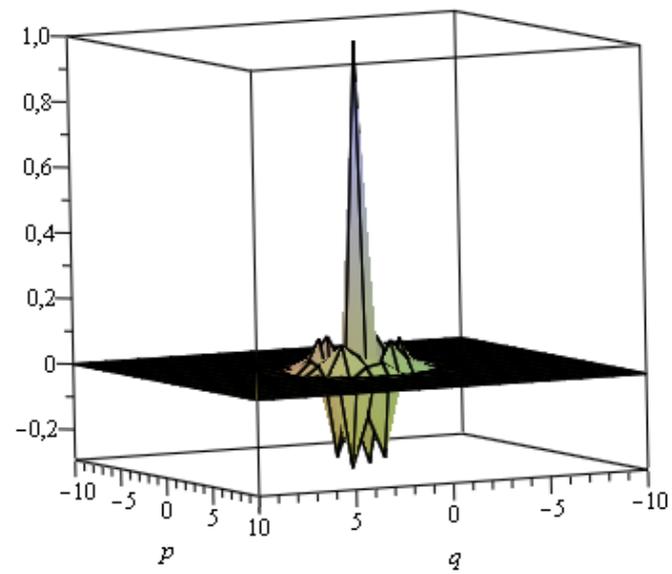


Figura 6: Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 5$

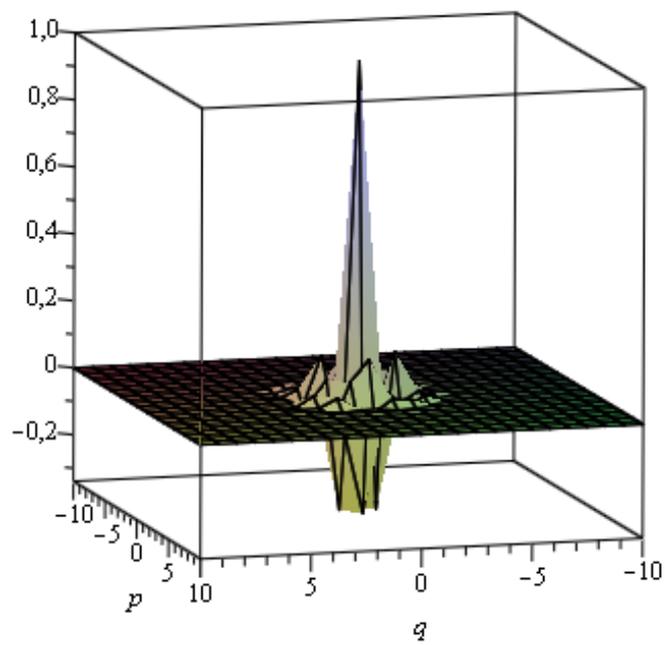


Figura 7: Função de Wigner para o oscilador amortecido, $n = 10$

6 *Conclusão e Perspectivas*

A não-comutatividade de algumas quantidades físicas observáveis é um ingrediente fundamental nas relações da mecânica quântica. Sendo assim, todo formalismo desenvolvido nesse contexto deve respeitar as relações de incerteza de Heisenberg. O objetivo desse trabalho foi construir um formalismo alternativo para a mecânica quântica, tratada no espaço de fase através de uma estrutura simplética de forma que tenha consistência em sua interpretação física, utilizando a noção de grupo de Lie (e não de álgebra de Lie, como já fora explorado). Dessa maneira, cada operador quântico usual é associado a uma função de variáveis q e p , do tipo c -número, e o produto entre dois operadores quânticos usuais é obtido mediante o produto de Moyal, ou estrela, entre as respectivas funções associadas a cada operador, de acordo com o formalismo de Wigner. Assim, a relação de comutação é substituída pelos parênteses do Moyal, $\{a, b\}_M = a \star b - b \star a$. Nota-se, então, que existe uma relação entre o formalismo de Wigner e a geometria não-comutativa.

Uma revisão sobre o método da função de Wigner, de caráter pedagógico, foi realizada, explorando suas propriedades. Apesar de poder assumir valores negativos, quando integrada nas coordenadas do espaço de fase, a função de Wigner fornece densidades de probabilidades. Por isso é interpretada como uma *quasi*-distribuição de probabilidades. Logo após, nos dedicamos ao estudo do produto-estrela e suas propriedades, pois além de estar presente na equação que descreve a evolução temporal da função de Wigner, o produto de Moyal é fundamental para o estudo das relações de incerteza. Apropriando-se desse ferramental matemático, propomos um formalismo no qual o estado de um sistema é descrito por vetores no espaço de Hilbert no espaço de fase, representado por funções de onda, chamadas de *quasi*-amplitude de probabilidades, denotadas por $\psi(q, p, t)$. Nesse espaço de Hilbert, utilizando o grupo de Galilei, construímos operadores que atuam nas funções de onda, resultando em translações, rotações, mudança de referencial (*boost*) e evolução temporal. Esse último nos permite encontrar a equação de Schroedinger no espaço de fase e todos esses operadores estabelecem uma representação da álgebra de Galilei-Lie. A conexão com a função de Wigner é estabelecida tomando o produto-estrela entre uma

função de onda no espaço de fase e sua conjugada, isto é $f_w(q, p, t) = \psi(q, p, t) \star \psi^\dagger(q, p, t)$.

Para exemplificar o formalismo, resolvemos a equação de Schroedinger para o oscilador harmônico simples e o amortecido, encontrando as amplitudes de probabilidades para cada estado, sendo o caso clássico obtido através do teorema de *Ehrenfest*. Nesse método, a informação sobre os sistemas quânticos no espaço de fase é obtida de forma direta, abandonando as dificuldades do formalismo de Wigner e podendo estender para outras análises que não eram bem definidas.

O formalismo construído no presente trabalho pode ser aplicado no estudo de teorias perturbativas, processos de quebra de simetrias no espaço de fase, teorias de espalhamento, o problema de muitos corpos e a discussão acerca dos aspectos da quantização geométrica. Alguns desses assuntos já estão em desenvolvimento, como o estudo da teoria de calibre e sistemas relativísticos.

. .

Referências

- [1] P. A. M. Dirac, Proc. Camb. Phil. Mag. **26**, 376 (1930).
- [2] E. P. Wigner, Phys. Rev. **40** 749 (1932).
- [3] E. P. Wigner, Ann. Math. **40** 149 (1939).
- [4] S. Chountassis, A. Vourdas, Phys. Rev. A **58** 1794 (1998).
- [5] Y. S. Kim, M. S. Noz, *Phase Space Picture on Quantum Mechenics-Group Theoretical Approach* (W. Scientific, Londres,1991).
- [6] T. Curtright, D. Fairlie, C. Zacos, Phys. Rev. D **58** 25002 (1998).
- [7] V. V. Dodonov, J. Phys. A: Math. Gen. **33** 7721 (2000).
- [8] V. V. Dodonov, V. I Manko, Physica A **137** 306 (1986).
- [9] V. V. Dodonov, V. I Manko, O. V. Shakhmistova Phys. Lett. A **102** 295 (1984).
- [10] V. V. Dodonov, V. I Manko, O. V. Manko, Phys. Rev. A **50** 813 (1994).
- [11] V. V. Dodonov, L. A. de Souza, J. Phys. A: Math. Theor. **40** 13955 (2007).
- [12] V. V. Dodonov, V. I Manko, D. L. Ossipov, Physica A **132** 269 (1985).
- [13] V. V. Dodonov, Phys. Lett. A **364** 368 (2007).
- [14] V. V. Dodonov, V. I Manko, O. V. Manko, Phys. Rev. A **49** 2993 (1994).
- [15] L. G. Lutterbach, L. Davidovich, Phys. Rev. Lett. **78** 2547 (1997).
- [16] M. Hillery, R. F. O´Connell, M. O. Scully, E. P. Wigner, Phys.Rep. **106** 121 (1984).
- [17] M. D. Oliveira, M. C. B. Fernandes, F. C. Khanna, A. E. Santana, J. M. D. Vianna, Ann. Phys. (N.Y.) **312** 492 (2004).
- [18] M. D. Oliveira, *Mecânica Quântica no Espaço de Fase*, Dissertação de Mestrado, UFBA, Salvador, 2002.
- [19] R. G. G. Amorim, *Formulação de Teorias Campos via estruturas simpléticas e o produto de Weyl*, Dissertação de Mestrado, IF-UnB, Brasília, 2006.
- [20] R.G.G. Amorim, *Geometria Não-Comutativa e Teoria de Campos Simplética*, Tese de Doutorado, IF-UnB, Brasília, 2009.

- [21] D. Galetti, *Mecânica Quântica no Espaço de Fase*, Notas do Curso Apresentado na III Escola Mário Schonberg de Pós-Graduação, João Pessoa, 1966.
- [22] A. Kenfack. K. Zyczkowski. *J. Opt. B* **6**, 396 (2004).
- [23] W. H. Louisell, *Quantum Statistical Properties of Radiation*, (Jonh Wiley, New York, 1973).
- [24] C. W. Gardiner, P. Zoller, *Quantum noise*, (Springer-Verlag, Berlim, 2000).
- [25] W. P. Schleich, *Quantum Optics in Phase Space*, (Jonh Wiley, Berlim, 2001).
- [26] M. O. Scully, M. S. Zubairy, *Quantum Optics*, (Cambridge University Press, Londres, 1997).
- [27] D. B. Fairlie, *Moyal Brackets, Star Products and generalised Wigner Functions*, (1998) [hep-th/9806198].
- [28] H. Goldstein, *Classical Mechanics*, Second Edition, (Addison-Wesley, New York, 1980).
- [29] G. Torres-Vega, J. H. Frederick, *J. Chem. Phys.* **93**, 8862 (1990).
- [30] G. Torres-Vega, J. H. Frederick, *J. Chem. Phys.* **98**, 3103 (1993).
- [31] R. G. G. Amorim, M. C. Fernandes, A. R. Queiroz, A. E. Santana, J. D. M. Vianna, *Rev. Bras. Ens. Fís.* **35** 3604 (2013).
- [32] E. C. G. Sudarshan e N. Mukunda, *Classical Dinamics: A modern Perspective*, (John Wiley, New York, 1974).
- [33] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantum Mechanics*, (Jonh Wiley, New York, 1977).
- [34] A. Messiah, *Quantum Mechanics*, (Jonh Wiley, New York, 1961).
- [35] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3^aEd., (Jonh Wiley, New York, 1977).
- [36] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*, (Addison-Wesley, New York, 1994).
- [37] R. W. Hasse, *J. Math. Phys.* **16**, 2005 (1975)
- [38] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, New York, 1976)
- [39] H. Spohn, *Rev. Mod. Phys.* **52**, 569 (1980)
- [40] H. Dekker, *Phys. Rep.* **80**, 1 (1981)
- [41] K. H. Li, *Phys. Rep.* **134**, 1 (1986)
- [42] H. Dekker, *Classical and Quantum Mechanics of the Damped Harmonic Oscillator*, (North-Holand Publishing Company, Amsterdam, 1981).
- [43] G. Lindblad, *Commun. Math. Phys.* **48**, 119 (1976)

- [44] G. Lindblad, Rep. Math. Phys. **10**, 393 (1976)
- [45] A. Sandulescu and H. Scutaru, Ann. Phys. (N.Y.) **173**, 277 (1987)
- [46] A. Sandulescu, H. Scutaru and W. Scheid, J. Phys. A - Math. Gen. **20**, 2121 (1987)
- [47] A. Sandulescu and E. Stefanescu, Physica A **161**, 525 (1989)
- [48] A. Isar, A. Sandulescu and W. Scheid, J. Phys. G - Nucl. Part. Phys. **17**, 385 (1991)
- [49] H. Bateman, Phys. Rev. **38**, 815 (1931)
- [50] R. Cordero-Soto, E. Suazo, S. K. Suslov, J. Phys. Math. **1**, 1 (2009).
- [51] A. Isar, A. Sandulescu, W. Scheid, Int. J. Mod. Phys. B **10**, 2767 (1996).