Sitientibus Série Ciências Físicas **07**: 1-12 (2011)

Física Quântica no Espaço de Fase

Quantum Physics in Phase Space

R. G. G. Amorim*
Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia – IFECT
Campus de Luziânia, Goiás – GO – 72811-580

Apresentamos neste trabalho uma revisão bibliográfica sobre Física Quântica no Espaço de Fase. Neste contexto, enfatizamos o método da função de Wigner, que apresenta aplicações em diversas áreas, ao tempo em que demonstramos a importância do mesmo nos estudos das conexões entre a mecânicas quântica e clássica. Nesse sentido, estudamos as propriedades da função de Wigner, definimos o produto-estrela e verificamos algumas de suas propriedades. Ainda no context do espaço de fase, apresentamos outras funções distribuições, destacando o papel da função de Husimi.

Palavras-chaves: Função de Wigner, Produto-Estrela, Espaço de Fase.

In this work we presented a bibliographic review about quantum physics in phase space. In this context, we give emphasize to the formalism of Wigner function which has been applied in several areas, at same time in we present its relevance in the studies of the connections between quantum mechanics and classical mechanics. In this sense, we study the properties of Wigner function, define the star-product and also we verify some properties of the star-product. We also presented other distribution functions, highlighting the role of the Husimi function.

Key-words: Wigner Function, Star-Product, Phase Space.

I. INTRODUÇÃO

Uma abordagem para Mecânica Quântica no espaço de fase parece bastante problemática pelo fato do princípio da incerteza estabelecer a impossibilidade de se conhecer simultaneamente, com precisão arbitrária, as posições q_i e os momentos p_i de uma dada partícula [1, 2]. O princípio da incerteza, cuja relação matemática aparece a seguir [3, 4],

$$\Delta q \Delta p \geq \hbar,$$

traz, de forma condensada, a diferença fundamental entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. É fato que, devido a este princípio, não podemos localizar pontos no espaço de fase, nem trajetórias que representam um sistema físico. Essa proibição é de caráter fundamental em teoria quântica, é uma questão de princípio, diferentemente do caso clássico, onde a impossibilidade de se conhecer as condições iniciais é de ordem prática. Decorre deste fato que na mecânica quântica não se pode utilizar funções $f(q,p)$ como observáveis [4, 5]. Entretanto, o espaço de fase é a variedade natural, onde as equações de transporte são escritas, e nesse sentido, um formalismo que tratasse a mecânica quântica no espaço de fase seria muito útil, tanto do ponto de vista teórico quanto do ponto de vista prático. Nesse panorama, Wigner propõe em 1932 o primeiro formalismo para a mecânica quântica no espaço de fase [6]. O objetivo inicial de Wigner consistia em efetuar correções quânticas à mecânica estatística, sem abandonar o conceito de espaço de fase, tendo em vista que problemas como a superfluidez do hélio não poderiam ser resolvidos a partir de uma teoria clássica. Assim, o formalismo de Wigner se desenvolveu, desde então, e tem demonstrado aplicabilidade em diversas

*Endereço Eletrônico: ronniamorim@gmail.com

áreas, tais como física nuclear, física de plasma, óptica quântica e física da matéria condensada. Apesar de, historicamente, o método da função de Wigner ter surgido dentro do contexto da mecânica estatística, o formalismo mostra-se útil também a sistemas compostos por uma única partícula.

Uma das principais características deste formalismo é que as variáveis dinâmicas são representadas por funções sobre o espaço de fase, e não por operadores [6, 7]. O estado do sistema é descrito pela chamada função de Wigner, $f_W(q,p)$, a qual possui a mesma informação sobre o sistema contida na função de onda e satisfaz uma equação análoga à de Liouville-von Neumann, onde o comutador é substituído pelo parênteses de Moyal. A motivação para a introdução da função de Wigner tem como origem a busca por uma distribuição de probabilidade associada ao espaço de fase, tal como sucede com relação ao formalismo clássico via a equação de Liouville. Porém, $f_W(q,p)$ não pode ser interpretada como uma densidade de probabilidade no sentido usual, porque, embora seja real e normalizada, admite tantos valores positivos quanto negativos, razão pela qual é chamada de uma distribuição de quase probabilidade [7–10]. Por outro lado, conforme veremos neste trabalho, a função de Wigner está estreitamente relacionada com probabilidades associadas às medidas físicas, no sentido que valores esperados podem ser calculados utilizando o método de Wigner [11, 12]. Ainda no contexto do espaço de fase, outras funções de distribuição foram propostas, quais sejam: Husimi (1940) [13], Margenau e Hill (1961) [14], Cohen (1966) [15]. Contudo, o arcabouço das aplicações dessas distribuições alternativas apresentou-se limitado [7]. Um destaque apresentado pela função distribuição de Husimi reside na sua não-negatividade para qualquer valor de q e p, porém, a positividade da função de Husimi traz como consequência a obtenção de valores incorretos nos cálculos de probabilidades [7]. O estudo das funções de distribuição de probabilidades no espaço de fase quântico também são utéis no estabelecimento das conexões entre a mecânica clássica e a macânica quântica, conforme veremos no desenvolvimento do presente trabalho.

Sendo assim, este trabalho possui o objetivo de apresentar, de uma forma didática, o método da função de Wigner para mecânica quântica no espaço de fase a professores e estudantes de física, afim de divulgar essa interessante área da física e ampliar o número de pessoas que possam discutir sobre o assunto. O pré-requisito necessário para uma leitura eficaz deste texto é o conhecimento prévio de mecânica quântica. Dessa forma, o presente artigo é apresentado com os seguintes tópicos: na seção II apresentamos a equação de Liouville-von Neumann; na seção III definimos a função de Wigner; na seção IV demonstramos algumas propriedades da função de Wigner; na seção V estudamos como é realizada a representação dos operadores no formalismo de Wigner, na seção VI destacamos algumas propriedades do produto estrela; na seção VII apresentamos a equação que dita a evolução temporal da função de Wigner, mostrando a conexão do formalismo de Wigner com a mecânica clássica; na seção VIII destacamos a equação de autovalores satisfeita pela função de Wigner; na seção IX estudamos outras distribuições no espaço de fase; na seção X apresentamos nossas considerações finais e perspectivas.

II. A EQUAÇÃO DE LIOUVILLE-VON NEUMANN

Apresentamos nesta seção, uma importante equação que nos será útil no decorrer do trabalho quando formos estudar a função de Wigner. A equação de Liouville-von Neumann, que deduziremos a seguir, é uma das equações fundamentais da mecânica quântica, pois trata da evolução temporal da matriz densidade. Uma de suas importantes características, é o fato de ser totalmente independente da representação utilizada para definir os operadores. Em essência, o objetivo da mecânica estatística quântica é o estudo das soluções desta equação.

O problema de muitos corpos na mecânica quântica usual pode ser estudado via um tratamento estatístico, sendo que o estado macroscópico de um sistema pode ser representado mediante a matriz densidade [16],

$$\rho = \sum_i \omega_i \left|\psi_i(t)\right\rangle \left\langle\psi_i(t)\right| ,$$

onde $\{|\psi_i(t)\rangle\}$ são os estados macroscópicos do ensemble estatístico e $\omega_i = \frac{N_i}{N}$ é o peso estatístico para o estado quântico $|\psi_i(t)\rangle$. A matriz densidade ρ contém todas as informações sobre o sistema. O valor esperado de um operador A na formulação da mecânica estatística quântica é dado por

$$\langle A\rangle = Tr(\rho A).$$

A matriz densidade, ρ, apresenta as seguintes propriedades,

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

(ii) traço unitário: $Tr\rho = 1$.

Uma equação de evolução temporal para a grandeza ρ pode ser deduzida a partir da equação de Schroedinger,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_i(t)\rangle = H(t)|\psi_i(t)\rangle,$$

com $H(t) = K + V$ (K representa a energia cinética e V a energia potencial do sistema). Dado que $\rho(t) = |\psi_i(t)\rangle\langle\psi_i(t)|$ (por simplicidade consideramos um estado puro), temos

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

o que nos fornece

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)], \tag{1}$$

que é a equação de Liouville-von Neumann. Como podemos perceber, estamos trabalhando na representação de Schroedinger, onde a matriz densidade evolui com o tempo.

Mostramos a seguir que a partir de ρ é possível introduzir uma formulação da mecânica quântica no espaço de fase, conhecida como método da função de Wigner.

III. A FUNÇÃO DE WIGNER

O conceito de espaço de fase na mecânica quântica é bastante problemático. Devido ao princípio da incerteza de Heisenberg, que atesta que uma partícula não pode ter simultaneamente posição e momento bem definidos, também não é possível definir uma verdadeira distribuição de probabilidades no espaço de fase. No entanto, funções que possuem um conteúdo de espaço de fase, funções de quase-distribuição de probabilidades, tem demonstrado grande utilidade no estudo de sistemas quânticos. Essas funções não são úteis somente como ferramentas de cálculo, mas também nos fornecem informações que conectam a mecânica quântica com a mecânica clássica.

Nesse sentido, a função de Wigner $f_W(q,p)$ é definida como uma espécie de transformada de Fourier dos elementos da matriz densidade [6, 7], ou seja,

$$\begin{aligned}f_W(q,p) &= (2\pi\hbar)^{-3}\int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\times \\ &\times\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\rho\left|q+\frac{z}{2}\right\rangle,\end{aligned} \tag{2}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}f_W(q,p) &= (2\pi\hbar)^{-3}\int dk \exp\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)\times \\ &\times\left\langle p-\frac{k}{2}\right|\rho\left|p+\frac{k}{2}\right\rangle.\end{aligned} \tag{3}$$

Até aqui a exposição envolve o operador densidade, que pode descrever estados puros e impuros. Contudo, o principal foco deste trabalho não está na mecânica estatística. Assim, podemos considerar o sistema quântico descrito por um estado puro $|\psi\rangle$ e o correspondente operador densidade sendo dado por $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$. Desse modo, a definição da função de Wigner se reduz a

$$\begin{aligned}f_W(q,p) &= (2\pi\hbar)^{-3}\int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\times \\ &\times\psi^\dagger\left(q+\frac{z}{2}\right)\psi\left(q-\frac{z}{2}\right).\end{aligned} \tag{4}$$

O leitor recordará, a partir de bibliografia em teoria de probabilidades, que uma distribuição de probabilidade, por definição, é sempre positiva [17]. Conforme já mencionamos na introdução deste trabalho, a função de Wigner não representa uma distribuição de probabilidade, pelo fato de assumir valores positivos e negativos. De fato, se $f_{W\alpha}$ e $f_{W\beta}$ são duas funções de Wigner associadas, respectivamente, aos estados $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, então

$$\begin{aligned} &|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 \\ &= (2\pi\hbar)^{-3}\int f_{W\alpha}(q,p)f_{W\beta}(q,p)dqdp. \end{aligned} \qquad (5)$$

Percebemos que o lado esquerdo da Eq. (5) é positivo ou nulo (se os kets forem ortogonais). No último caso, temos, como consequência, a integral nula. Como $f_{W\alpha}$ e $f_{W\beta}$ não são necessariamente nulas, em geral, resulta que $f_{W\alpha}$ e $f_{W\beta}$ devem assumir valores negativos e positivos, de tal forma a anular a referida integral. Considerando que qualquer probabilidade deve ser positiva, fica justificada a afirmação de que a função de Wigner não representa uma distribuição de probabilidade nos espaço de fase.

IV. PROPRIEDADES DA FUNÇÃO DE WIGNER

Estudamos nesta seção algumas propriedades da função de Wigner. São essas propriedades que atribuem ao método proposto por Wigner o 'status' de descrição alternativa ao formalismo da função de onda da mecânica quântica. Como vimos nas seções anteriores, embora a função de Wigner não seja classificada como uma distribuição de probabilidades, densidades são obtidas a partir da integração da função de Wigner, como veremos a seguir.

A. Propriedade 1

A densidade de probabilidade associada a posição é obtida mediante a integração, ou projeção, da função de Wigner nos 'momenta',

$$|\psi(q)|^2 = \int f_W(q,p)dp = \langle q|\rho|q\rangle. \qquad (6)$$

Demonstração –

Para demonstrar esta propriedade, o ponto de partida será a definição da função de Wigner. Substituindo a Eq. (2) na Eq. (6), obtemos

$$\begin{aligned} \int f_W(q,p)dp &= (2\pi\hbar)^{-3}\int dpdz\exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\times \\ &\times\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\rho\left|q+\frac{z}{2}\right\rangle. \end{aligned}$$

Realizando a integração em p, resulta

$$\begin{aligned} \int f_W(q,p)dp &= \int dz\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\rho\left|q+\frac{z}{2}\right\rangle\times \\ &\times\left[(2\pi\hbar)^{-3}\int dp\exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\right]. \end{aligned}$$

Notamos que o termo entre colchetes corresponde à delta de Dirac, $\delta(z)$, assim,

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

Utilizando a propriedade da função delta,

$$\int f(x)\delta(x)dx = f(0), \qquad (7)$$

chegamos a

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

como queríamos demonstrar.

B. Propriedade 2

A densidade de probabilidade associada ao *momentum* é obtida mediante a integração, ou projeção, da função de Wigner nas posições. No vocabulário próprio da estatística, os resultados estabelecidos nas propriedades 1 e 2 são denominadas distribuições marginais [17],

$$|\widetilde{\psi}(p)|^2 = \int f_W(q,p)dq = \langle p|\rho|p\rangle. \qquad (8)$$

Demonstração –

Para demonstrar esta propriedade, partimos novamente da definição da função de Wigner. Substituindo a Eq. (3) na Eq. (7), obtemos

$$\int f_W(q,p)dq = (2\pi\hbar)^{-3}\int dqdk \times \times \exp\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)\left\langle p-\frac{k}{2}\right|\rho\left|p+\frac{k}{2}\right\rangle.$$

Com a realização a integração em q, resulta

$$\begin{aligned}\int f_W(q,p)dq &= \int dk\left\langle p-\frac{k}{2}\right|\rho\left|p+\frac{k}{2}\right\rangle \times \\ &\times \left[(2\pi\hbar)^{-3}\int dq\exp\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right)\right].\end{aligned}$$

Notamos que o termo entre colchetes novamente é a delta de Dirac, conforme Eq. (7), portanto,

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

Utilizando a propriedade da função delta em (7), alcançamos

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

como queríamos demonstrar.

C. Propriedade 3

A normalização da função de Wigner. Esta propriedade é equivalente à propriedade (ii) satisfeita pela matriz densidade,

$$\int f_W(q,p)dqdp = Tr\rho = 1. \tag{9}$$

Demonstração –

Para demonstrar esta propriedade, consideramos a definição da função de Wigner. Substituindo a Eq. (2) na Eq. (9), obtemos

$$\int f_W(q,p)dqdp = (2\pi\hbar)^{-3}\int dqdpdz \times \times \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\rho\left|q+\frac{z}{2}\right\rangle.$$

Com a integração em p, temos

$$\int f_W(q,p)dqdp = \int dqdz\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\rho\left|q\frac{z}{2}\right\rangle + \left[(2\pi\hbar)^{-3}\int dp\exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\right].$$

Notamos que o termo entre colchetes corresponde a delta de Dirac, $\delta(z)$. Logo, obtemos

$$\int f_W(q,p)dqdp = \int dzdq\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\rho\left|q+\frac{z}{2}\right\rangle\delta(z).$$

Utilizando novamente a propriedade da função delta em (7) resulta

$$\int f_W(q,p)dqdp = \int dq\langle q|\rho|q\rangle = Tr\rho = 1,$$

como queríamos demonstrar.

Em seus trabalhos, Wigner mostrou também, que qualquer função distribuição que satisfaça as três propriedades destacadas acima, assumem valores negativos para algum ponto no espaço de fase (p,q) [7].

É útil destacar que as três propriedades demonstradas acima, que estabelecem os resultados que obtemos quando projetamos a função de Wigner em alguma direção particular, são interessantes no estudo de inversão tomográfica e nos processos de reconstrução da função de onda. Em particular, o trabalho destacado na referência [18] traz uma algoritmo de inversão tomográfica para reconstruir a função de Wigner e sua respectiva função de onda ou matriz densidade. Esse método fornece importantes aplicações em física atômica e molecular e em óptica quântica.

Outro trabalho com relevância prática é o citado na referência [19], o qual esboça um procedimento de medição da função de Wigner correspondente ao campo eletromagnético aprisionado numa cavidade. Este experimento é interessante no sentido de fornecer o significado físico da distribuição de Wigner.

D. Propriedade 4

A função de Wigner é diferente de zero

numa região cujo volume do espaço de fase é, pelo menos, igual a $\frac{2}{h}$. Dessa forma, percebemos que a função de Wigner traz implícita a informação básica do princípio da incerteza, ou seja, ela não pode ser localizada exatamente tanto em p quanto em q (simultaneamente),

$$|f_W(q,p)| \leq \frac{2}{h}.$$

V. OPERADORES NA REPRESENTAÇÃO DE WIGNER

Até o momento, vimos como obter uma função real no espaço de fase correspondente ao operador densidade ρ. Porém, o método de Wigner nos permite generalizar esse procedimento, ou melhor, dado um operador quântico, $A(Q,P)$, é possível encontrar uma função clássica $A_W(q,p)$ correspondente a $A(Q,P)$. Denominaremos a função A_W de equivalente de Wigner de A. Assim, o equivalente de Wigner do operador quântico A é dado por

$$\begin{aligned} A_W(q,p) &= \int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right) \times \\ &\times \left\langle q - \frac{z}{2} \right| A(Q,P) \left| q + \frac{z}{2} \right\rangle, \quad (10) \end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned} A_W(q,p) &= \int dk \exp\left(\frac{-iqk}{\hbar}\right) \times \\ &\times \left\langle p - \frac{k}{2} \right| A(Q,P) \left| p + \frac{k}{2} \right\rangle. \quad (11) \end{aligned}$$

As funções $A_W(q,p)$ possuem propriedades análogas às satifeitas pela função de Wigner, cujas demonstrações ficarão como um exercício para o leitor. Também é instrutivo salientar que as equações (10) e (11) são equivalentes à regra de Weyl, que define o análogo clássico de um dado operador quântico [11].

A. Propriedades dos Operadores na Representação de Wigner

(iii) O valor esperado de um observável, num estado $|\psi\rangle$ pode ser determinado, no método de Wigner, a partir da equação

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \langle \psi | A | \psi \rangle = \int dq dp A_W(q,p) f_W(q,p) \\ &= Tr(\rho A). \end{aligned}$$

Outras propriedades importantes estão destacadas a seguir

(iv)

$$\int dp A_W(q,p) = (2\pi\hbar)^{-3} \langle q|A|q\rangle,$$

(v)

$$\int dq A_W(q,p) = (2\pi\hbar)^{-3} \langle p|A|p\rangle.$$

Observe que as propriedades (iv) e (v) são análogas às já demonstradas para a função de Wigner, e suas demonstrações ficam como exercício para o leitor.

Uma outra característica interessante do método de Wigner diz respeito à transformada de Weyl do produto de dois observáveis, AB. No método de Wigner, quando queremos representar o produto de dois observáveis, AB, em função dos equivalentes de Wigner de A e B, utilizamos a relação

$$(AB)_W = A_W(q,p) \exp\left(\frac{i\hbar\Lambda}{2}\right) B_W(q,p), \quad (12)$$

com

$$\Lambda = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}.$$

A Eq. (12) foi demonstrada por Groenewold (1946) [20] e também discutida por Imre, Ozizmir, Rosenbaum e Zweifel (1967) [11]. O produto deformado entre os equivalentes de Wigner A_W e B_W, através de $\exp \frac{i\hbar\Lambda}{2}$, tem sido chamado de produto estrela ($\star$) [7–9],

$$\star = \exp\left[\frac{i\hbar}{2}\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}\right)\right].$$

Dessa forma, a Eq. (12) fica escrita como

$$(AB)_W = A_W(q,p) \star B_W(q,p). \quad (13)$$

O produto estrela, também conhecido na literatura como produto de Moyal, introduz um novo campo na matemática denominado de geometria não-comutativa. De um ponto de vista histórico, a geometria não comutativa teve origem nos trabalhos de Weyl e Moyal [21, 22], os quais estudaram procedimentos de quantização no espaço de fase. Contudo, foi Snyder o primeiro a desenvolver uma teoria consistente para coordenadas de espaços não-comutativos [23]. Nas últimas décadas, a geometria não-comutativa tem recebido destaque, devido a alguns resultados da gravitação, da matéria condensada e da teoria de cordas. Nesse sentido, devido a importância que o produto estrela exerce nos trabalhos acerca do método da função de Wigner, estudaremos algumas propriedades satisfeitas por essa álgebra, que terão utilidade na leitura das equações satisfeitas pela função de Wigner. Logo, a Eq. (13) possui uma importância central neste trabalho.

VI. PROPRIEDADES DO PRODUTO ESTRELA

Por uma questão de objetivo, as demonstrações dessas propriedades foram omitidas, mas podem ser visualizadas nas referências [24–27] e suas demonstrações ficam como um exercício para o leitor.

A. Quando um dos fatores é constante

Quando um dos fatores é constante, o produto estrela se trivializa.

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

B. O Operador Estrela

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

$$\begin{aligned} & f(q,p) \star g(q,p) \\ & = f(q + \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial_p}, p - \frac{i\hbar}{2}\overrightarrow{\partial_q}) g(q,p) \\ & = f(q,p) g(q - \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial_p}, p + \frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\partial_q}). \end{aligned}$$

C. Associatividade

O produto estrela é associativo.

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

D. Comutatividade

O produto estrela **não** é comutativo.

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

E. O Produto Estrela e a Conjugação Complexa

A conjugação complexa inverte a ordem do produto estrela.

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

F. A Integração do Produto Estrela

Ao se efetuar uma integração do produto estrela entre duas funções no espaço de fase, esse produto se triaviliza dentro da integral. É evidente que para essa propriedade fazer sentido é necessário a convergência da integral. A condição necessária para que a convergência ocorra é que as funções sejam nulas no infinito. Esta propriedade também é entendida como a ciclicidade do traço no espaço de fase.

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

VII. EVOLUÇÃO TEMPORAL DA FUNÇÃO DE WIGNER

Dada uma função de Wigner num instante inicial, é possível se determinar a função de Wigner correspondente a um instante posterior. Da Eq. (1), resulta

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = H(t)\rho(t) - \rho(t)H(t),$$

e aplicamos o operador

$$(2\pi\hbar)^{-3}\int dz \exp\left(\frac{ipz}{\hbar}\right)\left\langle q-\frac{z}{2}\right|\cdot\left|q+\frac{z}{2}\right\rangle,$$

a ambos os lados da equação. Como resultado, obtemos

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial f_W(q,p,t)}{\partial t} &= H_W(q,p,t)\star f_W(q,p,t) \\ &- f_W(q,p,t)\star H_W(q,p,t). \end{aligned}$$

Definindo o colchete de Moyal,

$$\{a,b\}_M = a\star b - b\star a,$$

podemos escrever

$$i\hbar\frac{\partial f_W(q,p,t)(t)}{\partial t} = \{H_W(t), f_W(q,p,t)\}_M. \tag{14}$$

Esta equação dinâmica, conforme se pode observar, é muito semelhante à equação de Liouville-von Neumann. Vale ressaltar que o referido colchete de Moyal pode ser escrito também como segue

$$\{a(q,p),b(q,p)\}_M = \frac{2}{\hbar}a(q,p)\mathrm{sen}\left[\frac{i\hbar}{2}\Lambda\right]b(q,p),$$

expressão que se encontra diretamente a partir do produto estrela, levando-se em consideração a expansão em série dos operadores exponenciais. É importante mencionar que, no limite no qual a constante de Planck (dividida por 2π), $\hbar$, é considerada pequena, a equação dinâmica para a função de Wigner pode ser escrita

$$i\hbar\frac{\partial f_W(q,p,t)(t)}{\partial t} = \{H_W(t), f_W(q,p,t)\}, \tag{15}$$

onde $\{\ .\ ,\ .\}$ simboliza o tradicional colchete de Poisson. Vemos assim, que a função de Wigner obedece, no limite quando a constante de Planck tende a zero, à equação de Liouville clássica, com H_W substituindo a função hamiltoniana. Contudo, há casos em que H_W coincide com a função hamiltoniana clássica, sugerindo qua a equação dinâmica satisfeita pela função de Wigner seja a equação de Liouville-von Neumann. Nesses casos, percebemos a importância do método de Wigner no estudo do limite clássico e no desenvolvimento de métodos semiclássicos.

Nossa discussão até aqui limitou-se a analisar o método de Wigner baseado na descrição de Schroedinger da mecânica quântica. Contudo, é possível desenvolver um tratamento semelhante ao até aqui exposto em termos de operadores expressos na descrição de Heisenberg. Neste caso, escrevemos a equação de Heisenberg como

$$i\hbar\frac{\partial A(t)}{\partial t} = [H(t), A(t)], \tag{16}$$

e utilizando um procedimento semelhante ao que nos levou à Eq. (14), alcançamos

$$i\hbar\frac{\partial A_W(q,p,t)(t)}{\partial t} = \{A_W(t), H_W(q,p,t)\}_M. \tag{17}$$

Usando novamente a expansão em série de potências e tomando o limite clássico ($\hbar\to 0$), chegamos a

$$\dot{q} = \frac{\partial H_W}{\partial p}, \tag{18}$$

$$\dot{p} = \frac{\partial H_W}{\partial q}. \tag{19}$$

Nos casos em que H_W coincide com a hamiltoniana clássica, o mesmo ocorre com as variáveis q e p. Portanto, nestes casos, as equações (18-19) tornam-se

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p}, \tag{20}$$

$$\dot{p} = \frac{\partial H}{\partial q}, \tag{21}$$

onde q e p agora podem ser identificados como as variáveis dinâmicas clássicas, e a equações (20-21) com as equações canônicas da mecânica clássica. Este fato nos mostra que o método de Wigner é compatível com o Princípio da Correspondência.

VIII. EQUAÇÃO DE AUTOVALORES

Além de todas as semelhanças entre o formalismo usual da mecânica quântica e o formalismo de Wigner que já foram observadas, há ainda uma bastante interessante, que nos permite determinar a função de Wigner sem a necessidade do conhecimento prévio de $\psi(q)$. Dada a equação de autovalores no formalismo usual

$$H(q)\psi(q) = E\psi(q),$$

temos que a função de Wigner obedece a seguinte equação-estrela

$$H(q,p) \star f_W(q,p) = Ef_W(q,p), \qquad (22)$$

onde E é o autovalor de energia de $\psi(q)$.

Para ilustrar o uso da Eq. (22), tomemos o tradicional problema do oscilador harmônico. É útil lembrar que nas referências [7, 28] a função de Wigner para os autoestados do oscilador harmônico foram obtidas mediante o uso da Eq. (4). Entretanto, nesse ponto da discussão, procuraremos a função de Wigner por meio da Eq. (22). Neste caso, temos que $H = \frac{p^2+q^2}{2}$ (com $m = 1$ e $\omega = 1$). Assim a Eq. (22) se torna

$$\left((q + \frac{i\hbar}{2}\partial_p)^2 + (p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q)^2 - 2E\right) f_W(q,p) = 0. \qquad (23)$$

Nosso objetivo é solucionar a Eq. (23). Nesse caminho, separando a parte real da parte imaginária, obtemos para a parte imaginária a seguinte expressão

$$(q\partial_p - p\partial_q)f_W(q,p),$$

que restringe a dependência de $f_W(q,p)$ a apenas uma variável, dada por $z = 4H/\hbar = 2(x^2 + p^2)/\hbar$. Com isto, a parte real da Eq. (23) se torna uma simples equação diferencial, ou seja,

$$(\frac{z}{4} - z\partial_z^2 - \partial_z - \frac{E}{\hbar})f_W(z) = 0. \qquad (24)$$

Tomando $f_W(z) = \exp(-z/2)L(z)$ e substituindo em (24), chegamos à equação

$$\left(z\partial_z^2 + (1-\partial_z) - \frac{E}{\hbar} - \frac{1}{2}\right) L(z) = 0, \qquad (25)$$

que é a equação diferencial de Laguerre, e cuja solução conhecida é:

$$L_n(z) = \frac{e^z\partial_z^n(e^{-z}z^n)}{n!}. \qquad (26)$$

Sendo assim, a função de Wigner torna-se

$$f_W^n(q,p) = \frac{(-1)^n}{\pi}e^{-2H/\hbar}L_n(4H/\hbar), \qquad (27)$$

com $L_0 = 1$, $L_1 = 1 - 4H/\hbar$, ... A função de Wigner representada na Eq. (27) é coincidente com a destacada na literatura [7], obtida com o uso de (4).

IX. OUTRAS DISTRIBUIÇÃO NO ESPAÇO DE FASE

Grande parte das revisões bibliográficas sobre mecânica quântica no espaço de fase se restringem a tratar da função de Wigner. Porém, no intuito de fornecer ao leitor um tratamento diversificado, examinaremos agora outras distribuições no espaço de fase.

Um procedimento para gerar funções distribuição foi proposto por Cohen em 1966 [15], e depois examinado por Summerfield e Zweifel em 1969 [11]. Eles sugeriram a expressão bem geral

$$\begin{aligned} f_g(q,p) &= (2\pi\hbar)^{-2}\int dq' \int dp \times \\ &\times \widetilde{g}(q-q', p-p')f_W(q,p), \end{aligned} \qquad (28)$$

para a função de distribuição do estado puro

$\psi(q)$, com

$$\widetilde{g}(q,p) = \int d\sigma d\tau \exp\left[-(i/\hbar)(\sigma q + \tau p)\right] g(\sigma,\tau).$$

Notamos que f_g é simplesmente a função f_W integrada com outra função g. O requisito básico que leva à Eq. (28) é que f_g se transforma corretamente com relação ao deslocamento espacial $\psi(q) \to \psi(q-a)$, e com relação a mudança de um sistema de coordenadas em movimento uniforme, $\psi(q) \to \exp(imvq)\psi(q)$. Essas propriedades podem ser confirmadas diretamente pelo leitor.

Cohen também apontou que é possível obter distribuições cuja dependência da função de onda do sistema é diferente da simples escolha de $g(\sigma,\tau)$ dependente de $\psi(q)$. Por exemplo, podemos escolher

$$g(\sigma,\tau) = \int dq \psi\left(q - q_0\frac{\sigma\tau}{\hbar}\right)\psi^*\left(q + q_0\frac{\sigma\tau}{\hbar}\right),$$

onde q_0 é um valor arbitrário de q. Essa escolha para $g(\sigma,\tau)$ satisfaz $g(0,\tau) = 1$ e $g(\sigma,0) = 1$ de forma que as distribuições marginais corretas são obtidas.

Um escolha de $\widetilde{g}(q,p)$ muito interessante é dada por

$$\begin{aligned}\widetilde{g}(q,p;\alpha) &= (\pi\hbar)^{-1}\exp\left(-q^2/\alpha\right) \times \\ &\times \exp\left(-\alpha p^2/\hbar^2\right). \end{aligned} \tag{29}$$

O uso dessa função apresentada na Eq. (29) foi proposto por Husimi em 1940 [13] e, desde então, tem sido estudada por um grande número de autores. Esta proposta leva à função distribuição de Husimi, $f_H(q,p)$, que é não-negativa para todo q e p. Podemos confirmar tal propriedade notando que $\widetilde{g}(q-q',p-p';\alpha)$ é a função de Wigner f_{Wpq} obtida a partir da função de onda do estado fundamental do oscilador harmônico deslocado,

$$\begin{aligned}\psi_{q,p}(q';\alpha) &= (\pi\hbar)^{-1/4}\exp\left(-(q'-q)^2/2\alpha\right) \times \\ &\times \exp\left(-i\alpha p q'/\hbar\right).\end{aligned}$$

Se a função de Wigner em questão, $f_{W\phi}$, corresponde a função de onda $\psi(q)$, então

$$\begin{aligned} f_H(q,p) &= \int dq'dp' f_{Wqp}(q',p') f_{W\phi}(q',p') \\ &= (2\pi\hbar)^{-1}\left|\int dq'\psi_{q,p}(q')\psi(q')\right|^2 \geq 0. \end{aligned} \tag{30}$$

É possivel mostrar, utilizando as últimas expressões, que para obtermos uma função distribuição positiva, as propriedades 1, 2 e 3, satisfeitas pela função de Wigner, são violadas. A distribuição de Husimi encontra aplicações em diversos contextos, dentre os quais destacam-se a óptica quântica, computação quântica e problemas da teoria eletromagnética. Em particular, destacam-se as aplicações atuais no campo da computação quântica que aparecem na referência [29] que estabelecem como representar a evolução de um computador quântico e que também determinaram as funções de Wigner e de Husimi para os estados que são relevantes em computação quântica. Ainda no contexto da referência [29], ficaram estabelecidas algumas propriedades dos algoritmos quânticos no espaço de fase e também foi realizada uma análise do algoritimo de busca de Grover no espaço de fase. A referência [30] também merece destaque pelo fato de mostrar a eficência de algoritmos quânticos analisados com o uso das funções de Wigner e de Husimi, além de ser estabelecida uma comparação de tais procedimentos com a computação clássica.

X. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Realizamos neste trabalho uma análise sucinta do método da função de Wigner. Vimos que este método traz uma alternativa para se descrever a mecânica quântica no espaço de fase. No decorrer do trabalho verificamos algumas propriedades da função de Wigner, como por exemplo, as que estabelecem como calcular probabilidades e valores esperados. Porém, ainda no contexto estatístico, vimos que a função de Wigner não pode ser classificada como uma autêntica distribuição de probabilidades, pelo fato de admitir valores negativos. Vimos também que o método proposto por Wigner mostra-se interessante para na análise de questões relacionadas ao limite clássico da mecânica quântica. Também estudamos outras funções distribuição de probabilidades no espaço de fase, como por exemplo a distribuição de Husimi, e visualizamos algumas áreas onde podemos aplicá-las. É útil destacar que formalismos para a mecânica quântica nos espaço de fase estão sendo discutidos em diferentes contextos, dentre os quais se destacam os trabalhos especificados nas referências [31–36], que estabeleceram um formalismo autocontido para se determinar a função de Wigner, mediante a solução da equação de Schroedinger no espaço de fase. Nesse panorama, nossas perspectivas são as seguintes: estudar aplicações da função de Wigner em computação quântica e continuar as pesquisas em andamento que tratam a mecânica quântica no espaço de fase.

Agradecimentos

Agradecemos ao CNPq pelo suporte financeiro.

---

[1] L.D. Landau, E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*. Oxford: Pergamon Press (1977).
[2] A. Messiah, *Quantum Mechanics*. New York: Wiley & Sons (1961).
[3] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics* (3rd Edition). New York: Wiley & Sons (1977).
[4] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Lalöe, *Quantum Mechanics*. New York: Wiley & Sons (1977).
[5] J.J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics*. Massachusetts: Addison-Wesley Publishing Co. (1994).
[6] E.P. Wigner. Z. Phys. Chem. **B19**, (40) 749 (1932).
[7] M. Hillery, R.F. O Connel, M.O. Scully, E.P. Wigner. Phys. Rep. **106**, 121 (1984).
[8] E.P. Wigner. Ann. Math. **40**, 149 (1939).
[9] S. Chountassis, A. Vourdas. Phys. Rev. A **58**, 1794 (1998).
[10] T. Curtright, D. Fairlie, C. Zacos. Phys. Rev. D **58**, 25002 (1998).
[11] K. Imre, E. Ozizmir, M. Rosembaum, P.F. Zweifel. J. Math. Phys. **8**, 1097 (1967).
[12] T. Curtright, T. Uematsu, C. Zachos, *Generating all Wigner Functions* (2001). [arXiv:hep-th/0011137].
[13] K. Husimi. Proc. Phys. Math. Soc. Japan **22**, 264 (1940).
[14] H. Margenau, R.N. Hill. Prog. Theor. Phys. **26**, 772 (1961).
[15] L. Cohen. J. Math. Phys. **7**, 781 (1966).
[16] K. Huang, *Statistical Mechanics*. New York: John Wiley and Sons (1987).
[17] M.R. Spiegel, *Estatística* (3^a Edição). São Paulo: Makron Books (1993).
[18] M.G. Raymer. Contemporary Physics **38**, 343 (1997).
[19] L. Davidovich, L.G. Lutterbach. Phys. Rev. Lett. **78**, 2547 (1997).
[20] H.J. Groennewold, Physica **12**, 405 (1946).
[21] H. Weyl. Z. Phys. **46**, 1 (1927).
[22] J.E. Moyal. Proc. Camb. Phil. Soc. **45**, 99 (1949).
[23] H. Snyder, *Quantized Space-Time*. Phys. Rev. **71**, 38 (1947).
[24] A. Connes, M.R. Douglas, A. Schwarz, *Noncommutative Geometry and Matrix Theory: Compactification on Tory*. JHEP **2**, (1998).
[25] N. Seiberg, E. Witten, *String Theory and Noncommutative Geometry*. JHEP **09**, (1999).
[26] M.R. Douglas, N.A. Nekrasov. Rev. Mod. Phys. **73**, 977 (2001). [arXiv:hep-th/0106048].
[27] E. Akofor, A.P. Balachandran. Phys. Rev. D **80**, 036008 (2009).
[28] M. Novaes. Rev. Bras. Ens. Fis. **24**, (2002).
[29] P. Bianucci *et all.* Physics Letters A **297**, (2001).
[30] M. Terraneo, B. Georgeot, D.L. Shepelyansky. Phys. Rev. E **71**, (2005).
[31] M.D. Oliveira, M.C.B. Fernandes, F.C. Khanna, A.E. Santana, J.D.M. Vianna. Ann. Phys. (N.Y.) **312**, 492 (2004).
[32] R.G.G. Amorim, M.C.B. Fernandes, F.C. Khanna, A.E. Santana, J.D.M. Vianna. Phys. Lett. A **361**, 464 (2007).
[33] R.G.G. Amorim, F.C. Khanna, A.E. Santana, J.D.M. Vianna. Physica A **388**, 3771 (2009).
[34] M.C.B. Fernandes, F.C. Khanna, M.G.R. Martins, A.E. Santana, J.D.M. Vianna, *Nonlinear Liouville and Shrödinger Equations in Phase-Space*. In preparation.
[35] L.M. Abreu, A.E. Santana, A. Ribeiro Filho.

Ann. Phys. (N.Y.) **297**, 396 (2002).

[36] F.C. Khanna, A.P.C. Malbouisson, J.M.C. Malbouisson, A.E. Santana, *Thermal Quantum Field Theory: Algebraic Aspects and Applications*. Singapore: World Scientific (2009).