e-Boletim de Física

International Centre for Physics
Instituto de Física, Universidade de Brasília
Ano VII, Fevereiro de 2019 • http://periodicos.unb.br/ojs311/index.php/e-bfis/index • eBFIS **7** 7245-1(2019)

Teoria quântica não-comutativa: Da quantização de Weyl ao método da função de Wigner

R.G.G. Amorim*
Instituto de Física, Universidade de Brasília, 70910-900, Brasília, DF, Brazil.
Faculdade Gama, Universidade de Brasília, Setor Leste (Gama), 72444-240, Brasília-DF, Brazil.

R.A.S. Paiva†
Instituto de Física, Universidade de Brasília, 70910-900, Brasília, DF, Brazil

Usualmente, nos cursos de mecânica quântica na graduação ou mesmo em disciplinas avançadas de pós-graduação, a teoria quântica é apresentada numa forma em que a quantização das grandezas clássicas é realizada pelo formalismo canônico, e a teoria fica escrita numa representação específica da posição ou momentum. Neste texto, apresentamos de forma pedagógica uma técnica de quantização não usual, denominada quantização de Weyl, e a partir dela mostraremos como construir uma representação para a mecânica quântica no espaço de fase: a representação de Wigner. Na formulação de Wigner, conforme veremos no texto, os operadores são representados por funções, e a conexão quântico-clássica é obtida por meio do limite $\hbar \to 0$.

I. A QUANTIZAÇÃO DE WEYL

Quando estudamos mecânica quântica nos cursos de graduação de física, a quantização de um sistema clássico é realizada, usualmente, via quantização canônica, a qual corresponde ao estabelecimento de uma correspondência entre as grandezas dinâmicas de um sistema clássico e operadores quânticos que satisfazem a determinadas relações de comutação [1–5]. Nessa regra de quantização, basta trocar as variáveis clássicas dadas no hamiltoniano pelos seus respectivos operadores. Por exemplo, tomemos o hamiltoniano correspondente ao oscilador harmônico clássico

$$H(q,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} q^2.$$

Para quantizá-lo fazemos a substituição $q \to \widehat{q}$ e $p \to \widehat{p}$, em que $[\widehat{q}, \widehat{p}] = i\hbar$; obtendo assim o hamiltoniano

$$\widehat{H}(\widehat{q},\widehat{p}) = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \widehat{q}^2.$$

Com isso, obtemos uma teoria quântica cuja dinâmica do sistema é governada pela equação de Schroedinger, caso escolhamos pela evolução temporal da função de onda. Se a opção for feita pela evolução temporal dos operadores, a dinâmica fica dada na representação de Heisenberg.

Em relação a representação de Schroedinger, usualmente fazemos a escolha dos operadores como $\widehat{q} = q$ e $\widehat{p} = -i\hbar\frac{d}{dq}$. Neste caso, a função de onda que descreve o sistema física ficará dada na representação da posição, isto é, $\psi(q)$. Caso a opção pelos operadores posição e momento tivesse sido $\widehat{q} = i\hbar\frac{q}{dp}$ e $\widehat{p} = p$, a função de onda seria dada na representação do momento, isto é, $\widetilde{\psi}(p)$. Apesar de ambas representações possuírem conexão, a função de onda ora é representada em função de q, ora em função de p [1–3].

A quantização canônica, embora seja extremamente simples para as funções polinomiais que geralmente aparecem na mecânica quântica, apresenta algumas ambiguidades. Por exemplo, suponha que desejássemos quantizar a função $w = q^2p$; de que forma definiríamos o operador correspondente a w? Poderíamos utilizar $\widehat{q}^2\widehat{p}$ ou $\widehat{q}\widehat{p}\widehat{q}$, ou ainda $\widehat{p}\widehat{q}^2$. Assim, percebemos que há uma ambiguidade na definição do operador correspondente a w. Na prática, na regra de quantização canônica, solucionamos essa problemática fazendo o que denominamos de simetrização de w antes de quantizar, ou seja, escrevemos todas as combinações possíveis do produto e dividimos pela quantidade de combinações, o que neste caso específico forneceria

$$w = \frac{1}{3}\left(q^2p + qpq + pq^2\right).$$

Após realizada a simetrização, relaizamos a quantização canônica, qual seja

$$\widehat{w} = \frac{1}{3}\left(\widehat{q}^2\widehat{p} + \widehat{q}\widehat{p}\widehat{q} + \widehat{p}\widehat{q}^2\right).$$

* ronniamorim@gmail.com
† rendisley@gmail.com

Além da problemática da ambiguidade, a quantização canônica não é facilmente aplicável quando se deseja quantizar funções não-polinomiais. Por esse motivo, outras técnicas de quantização foram introduzidas, dentre as quais a quantização de Weyl merece destaque.

Definição 1:(Quantização de Weyl) As variáveis (q,p) de um dado sistema clássico são quantizadas segundo a regra $(q,p) \to (\widehat{q},\widehat{p})$, as funções f definidas sobre essas quantidades são quantizadas segundo o mapa de Weyl; $\mathcal{W}[f] : f \to \widehat{f}$, definido por

$$\mathcal{W}[f] = \widehat{f}(\widehat{q},\widehat{p}) := \frac{1}{(2\pi)^2} \int\int\int\int d\sigma d\tau dq dp f(q,p) e^{i\sigma(\widehat{q}-q)+i\tau(\widehat{p}-p)}. \tag{1}$$

Esta correspondência clássico-quântico é denominada regra de quantização de Weyl [6, 7, 14].

Outra forma para se definir a quantização de Weyl é a seguinte: suponha que desejamos quantizar a função $f(q,p)$. Primeiro calculamos a transformada de Fourier de $f(q,p)$, qual seja,

$$\widetilde{f}(\sigma,\tau) = \frac{1}{2\pi}\int\int dq dp f(q,p) e^{-i(\sigma q+\tau p)}. \tag{2}$$

Em seguida, calculamos a transformada de Fourier operacional de $\widetilde{f}(\sigma,\tau)$, qual seja,

$$\widehat{f}(\widehat{q},\widehat{p}) = \frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma d\tau \widetilde{f}(\sigma,\tau) e^{-i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}. \tag{3}$$

A quantização de Weyl possui inversa, a qual é dada por [6]

$$\mathcal{W}^{-1}[\widehat{f}] = f(q,p) = \int dy \langle q-1/2y|\widehat{f}(\widehat{q},\widehat{p})|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}. \tag{4}$$

Essa forma particular de se escrever a inversa da ransformação de Weyl será bastante útil na sequência deste texto.

Agora, demonstaremos que a equação (4) é de fato a inversa da equação (1).

Demonstração 1:

Substituindo a equação (1) na equação (4), obtemos

$$\mathcal{W}^{-1}[\widehat{f}] = f(q,p) = \int dy \langle q-1/2y|\frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int d\sigma d\tau dq dp f(q,p) e^{i\sigma(\widehat{q}-q)+i\tau(\widehat{p}-p)}|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}.$$

Utilizando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff, temos

$$e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})} = e^{i\tau\widehat{p}/2} e^{i\sigma\widehat{q}} e^{i\tau\widehat{p}/2}.$$

E então,

$$\mathcal{W}^{-1}[\widehat{f}] = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int\int dy d\sigma d\tau d\widetilde{q} d\widetilde{p} f(\widetilde{q},\widetilde{p}) \langle q-1/2y|e^{i\tau\widehat{p}/2} e^{i\sigma\widehat{q}} e^{i\tau\widehat{p}/2}|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}. \tag{5}$$

Porém, sabemos que $\widehat{q}|q'\rangle = q'|q'\rangle$ e $e^{ia\widehat{p}}|q'\rangle = |q'+\hbar a\rangle$. Utilizando essas relações, podemos escrever para o fator $\langle q-1/2y|e^{i\tau\widehat{p}/2} e^{i\sigma\widehat{q}} e^{i\tau\widehat{p}/2}|q+1/2y\rangle$ o seguinte resultado

$$\begin{aligned}
\langle q-1/2y|e^{i\tau\widehat{p}/2} e^{i\sigma\widehat{q}} e^{i\tau\widehat{p}/2}|q+1/2y\rangle &= \langle q-1/2y-\hbar/2\tau|e^{i\sigma\widehat{q}}|q+1/2y+\hbar/2\tau\rangle \\
&= \langle q-1/2y-\hbar/2\tau|q+1/2y+\hbar/2\tau\rangle e^{i\sigma(q+1/2y+\hbar/2\tau)} \\
&= \delta(y+\hbar\tau) e^{i\sigma(q+1/2y+\hbar/2\tau)}.
\end{aligned}$$

Utilizando este último resultado podemos calcular, na equação (5), a integral em y, obtendo

$$\mathcal{W}^{-1}[\widehat{f}] = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int d\sigma d\tau d\widetilde{q}d\widetilde{p}f(\widetilde{q},\widetilde{p})e^{i\sigma(q-\widetilde{q})+i\tau(p-\widetilde{p})}. \tag{6}$$

Identificando na equação (6) as deltas $\delta(q-\widetilde{q}) = \frac{1}{2\pi}\int d\sigma e^{i\sigma(q-\widetilde{q})}$ e $\delta(p-\widetilde{p}) = \frac{1}{2\pi}\int d\tau e^{i\tau(p-\widetilde{p})}$, temos

$$\mathcal{W}^{-1}[\widehat{f}] = \int\int d\widetilde{q}d\widetilde{p}f(\widetilde{q},\widetilde{p})\delta(q-\widetilde{q})\delta(p-\widetilde{p}) = f(q,p). \tag{7}$$

Este resultado prova que de fato a equação (4) é a inversa da equação (1), ou seja, a transformação de Weyl é inversível.

Agora que já conhecemos a regra de quantização de Weyl, bem como a sua inversa, faremos um exemplo para apurar a técnica.

Exemplo 1: Utilizando o mapa de Weyl e a relação $[\widehat{q},\widehat{p}] = i\hbar$, quantize a função $g(q,p) = qp$.

Resolução: Substituindo a função dada na equação (1), temos

$$\mathcal{W}[qp] = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int d\sigma d\tau dqdpqpe^{i\sigma(\widehat{q}-q)+i\tau(\widehat{p}-p)}. \tag{8}$$

Utilizando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff, podemos escrever

$$e^{i\sigma\widehat{q}+i\tau\widehat{p}} = e^{i\sigma\widehat{q}}e^{i\tau\widehat{p}}e^{1/2\sigma\tau}.$$

Inserindo essa relação na equação (8), temos

$$\mathcal{W}[qp] = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int d\sigma d\tau dqdpqpe^{i\sigma q}e^{i\tau p}e^{i\sigma\widehat{q}}e^{i\tau\widehat{p}}e^{1/2\sigma\tau}. \tag{9}$$

Podemos escrever ainda

$$\mathcal{W}[qp] = \frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int d\sigma d\tau dqdpqpe^{i\sigma(\widehat{q}-q)}e^{i\tau(\widehat{p}-p-i/2\sigma)}. \tag{10}$$

E ainda,

$$\mathcal{W}[qp] = \frac{1}{2\pi}\int\int\int d\sigma dqdpqpe^{i\sigma(\widehat{q}-q)}\left(\frac{1}{2\pi}\int d\tau e^{i\tau(\widehat{p}-p-i/2\sigma)}\right). \tag{11}$$

Isso nos fornece

$$\mathcal{W}[qp] = \frac{1}{2\pi}\int\int\int d\sigma dqdpqpe^{i\sigma(\widehat{q}-q)}\delta(p-\widehat{p}+i/2\sigma). \tag{12}$$

Usando a propriedade de integração da delta $\int dxf(x)\delta(x-a) = f(a)$, temos

$$\mathcal{W}[qp] = \frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma dqq(\widehat{p}-i/2\sigma)e^{i\sigma(\widehat{q}-q)}. \tag{13}$$

Podemos escrever a equação (13) da seguinte forma

$$\mathcal{W}[qp] = \left(\frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma dqqe^{i\sigma(\widehat{q}-q)}\right)\widehat{p} - i/2\left(\frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma dqq\sigma e^{i\sigma(\widehat{q}-q)}\right). \tag{14}$$

Ou ainda

$$\mathcal{W}[qp] = \left[\int dqq\left(\frac{1}{2\pi}\int d\sigma e^{i\sigma(\widehat{q}-q)}\right)\right]\widehat{p} - i/2\left[\int dqq\left(-i\frac{d}{dq}\right)\left(\frac{1}{2\pi}\int d\sigma e^{i\sigma(\widehat{q}-q)}\right)\right]. \tag{15}$$

$$\mathcal{W}[qp] = \left[\int dqq\delta(\widehat{q}-q)\right]\widehat{p} - i/2\left[\int dqq\left(-i\frac{d}{dq}\right)\delta(\widehat{q}-q)\right]. \tag{16}$$

Utilizando as relações $\int dx\delta(x-a)f(x) = f(a)$ e $\int dx\frac{d\delta(x-a)}{dx}f(x) = -\frac{df(a)}{dx}$, obtemos

$$\mathcal{W}[qp] = \widehat{q}\widehat{p} - i/2 = \frac{1}{2}(\widehat{q}\widehat{p}+\widehat{p}\widehat{q}). \tag{17}$$

O resultado encontrado é o mesmo que seria encontrado se tivessemos utilizado a quantização canônica após a simetrização. Perceba que no formalismo de Weyl não há ambiguidades na quantização e não há a necessidade de se realizar a simetrização. O leitor interesado em praticar a técnica de quantização apresentada éconvidado a resolver o exercício a seguir.

Exercício: Utilizando o mapa de Weyl e a relação $[\widehat{q},\widehat{p}]=i$, quantize as funções:

- $g(q,p)=q^2p$.
- $h(q,p)=\delta(q-q')\delta(p-p')$

II. O PRODUTO DE WEYL (PRODUTO-ESTRELA)

Agora que já sabemos como quantizar uma função que depende das cordenadas posição e momentum, ou seja, uma função escrita no espaço de fase, estabeleceremos o mapeamento do produto entre duas funções no espaço de fase e seu representante na estrutura quantizada. Neste contexto, a quantização de Weyl do produto de duas funções c-*numbers* induz o produto de Weyl, também denominado produto-estrela, entre os respectivos operadores quantizados. Por esse motivo, a quantização de Weyl também é conhecida como quantização por deformação [6, 7]. Nesse bojo, considere duas funções definidas no espaço de fase, $a(q,p)$ e $b(q,p)$, para as quais podemos associar os operadores via mapa de Weyl,

$$\widetilde{a}(\sigma,\tau)=\frac{1}{2\pi}\int\int dqdpa(q,p)e^{i(\sigma q+\tau p)}, \tag{18}$$

$$\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})=\frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma d\tau\widetilde{a}(\sigma,\tau)e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}. \tag{19}$$

e

$$\widetilde{b}(\sigma,\tau)=\frac{1}{2\pi}\int\int dqdpb(q,p)e^{i(\sigma q+\tau p)}, \tag{20}$$

$$\widehat{b}(\widehat{q},\widehat{p})=\frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma d\tau\widetilde{b}(\sigma,\tau)e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}. \tag{21}$$

Nesse sentido, podemos escrever

$$\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})\widehat{b}(\widehat{q},\widehat{p})=\frac{1}{(2\pi)^2}\int\int\int\int d\sigma d\tau d\sigma' d\tau'\widetilde{a}(\sigma,\tau)e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}\widetilde{b}(\sigma',\tau')e^{i(\sigma'\widehat{q}+\tau'\widehat{p})}. \tag{22}$$

Por outro lado, podemos estabelecer a associação $\widehat{c}(\widehat{q},\widehat{p})=\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})\widehat{b}(\widehat{q},\widehat{p})$. Assim, segue naturalmente que

$$\widehat{c}(\widehat{q},\widehat{p})=\frac{1}{2\pi}\int\int d\sigma d\tau\widetilde{c}(\sigma,\tau)e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}. \tag{23}$$

Utilizando a relação de Baker-Campbell-Hausdorff, temos que

$$e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}=e^{i/2\sigma\tau}e^{i\tau\widehat{p}}e^{i\sigma\widehat{q}}.$$

Também temos que

$$e^{i(\sigma\widehat{q}+\tau\widehat{p})}e^{i(\sigma'\widehat{q}+\tau'\widehat{p})}=e^{i/2(\sigma'\tau-\sigma\tau')}e^{i(\sigma+\sigma')\widehat{q}}e^{i(\tau+\tau')\widehat{p}}.$$

Usando essa última relação na equação (23), podemos escrever

$$\widehat{c}=\widehat{a}\widehat{b}=\int\int\int\int d\sigma d\tau d\sigma' d\tau'\widetilde{a}(\sigma,\tau)\widetilde{b}(\sigma',\tau')e^{i/2(\sigma'\tau-\sigma\tau')}e^{i(\sigma+\sigma')\widehat{q}}e^{i(\tau+\tau')\widehat{p}}. \tag{24}$$

Com a transformação de coordenadas

$$\overline{\sigma}=\sigma+\sigma',$$

$$\overline{\tau}=\tau+\tau',$$

$$\widehat{c}=\widehat{a}\widehat{b}=\int\int\int\int d\overline{\sigma}d\overline{\tau}d\sigma' d\tau'\widetilde{a}(\overline{\sigma}-\sigma',\overline{\tau}-\tau')\widetilde{b}(\sigma',\tau')e^{i/2(\sigma'\overline{\tau}-\overline{\sigma}\tau')}e^{i\overline{\sigma}\widehat{q}}e^{i\overline{\tau}\widehat{p}}. \tag{25}$$

A partir da última expressão podemos identificar

$$\widetilde{c}(\sigma,\tau)=\int\int d\sigma' d\tau'\widetilde{a}(\overline{\sigma}-\sigma',\overline{\tau}-\tau')\widetilde{b}(\sigma',\tau')e^{i/2(\sigma'\overline{\tau}-\overline{\sigma}\tau')}. \tag{26}$$

Tomando a transformação de Fourier inversa, temos

$$c(q,p)=\int\int\int\int d\overline{\tau}d\overline{\sigma}d\sigma' d\tau'\widetilde{a}(\overline{\sigma}-\sigma',\overline{\tau}-\tau')\widetilde{b}(\sigma',\tau')e^{i/2(\sigma'\overline{\tau}-\overline{\sigma}\tau')}e^{-i(\overline{\sigma}q+\overline{\tau}p)} \tag{27}$$

Com a mudança $\overline{\sigma}=\sigma+\sigma'$ e $\overline{\tau}=\tau+\tau'$, obtemos

$$c(q,p)=\int\int d\tau d\sigma d\sigma' d\tau' e^{i/2(\sigma'\tau-\sigma\tau')}\left(\widetilde{a}(\sigma',\tau')e^{-i(\overline{\sigma'}q+\overline{\tau'}p)}\right)\left(\widetilde{b}(\sigma,\tau)e^{-i(\overline{\sigma}q+\overline{\tau}p)}\right). \tag{28}$$

Agora, note que o fator $e^{i/2(\sigma'\tau-\sigma\tau')}$ pode ser visto como a ação do operador $e^{i/2\left(\frac{\partial}{\partial q'}\frac{\partial}{\partial p}-\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p'}\right)}$ sobre os fatores $\left(\widetilde{a}(\sigma',\tau')e^{-i(\overline{\sigma'}q+\overline{\tau'}p)}\right)$ e $\left(\widetilde{b}(\sigma,\tau)e^{-i(\overline{\sigma}q+\overline{\tau}p)}\right)$. Com isso, podemos escrever a equação (28) como

$$c(q,p)=e^{i/2\left(\frac{\partial}{\partial q'}\frac{\partial}{\partial p}-\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p'}\right)}\left(\int\int d\sigma' d\tau'\widetilde{a}(\sigma',\tau')e^{-i(\overline{\sigma'}q+\overline{\tau'}p)}\right)\left(\int\int d\tau d\sigma\widetilde{b}(\sigma,\tau)e^{-i(\overline{\sigma}q+\overline{\tau}p)}\right), \tag{29}$$

o que pode ser escrito como

$$c(q,p)=e^{i/2\left(\frac{\partial}{\partial q'}\frac{\partial}{\partial p}-\frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p'}\right)}a(q',p')b(q,p), \tag{30}$$

ou ainda

$$c(q,p)=a(q,p)e^{i/2\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q}\right)}b(q,p), \tag{31}$$

em que as setas indicam o sentido em que os operadores são aplicados. As equações (30) e 31) são duas formas equivalentes de se escrever o produto de Weyl ou produto-estrela.

$$c(q,p)=a(q,p)e^{i/2\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q}\right)}b(q,p)=a(q,p)\star b(q,p). \tag{32}$$

Esse resultado nos possibilita escrever

$$\mathcal{W}[a\star b]=\mathcal{W}[a]\mathcal{W}[b]=\widehat{A}\widehat{B}. \tag{33}$$

O produto de Weyl goza das seguintes propriedades

1. $a\star b\neq b\star a$,
2. $a\star(b\star c)=(a\star b)\star c$,
3. $(a\star b)^\dagger=b^\dagger\star a^\dagger$,
4. $\int\int dqdpa\star b=\int\int dqdpb\star a$,
5. $ae^{i/2\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\right)}b=be^{-i/2\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\right)}a.$

Tais propriedades são de fácil demonstração. O leitor interessado pode fazê-las como exercício.

A. Parenteses de Moyal

Os parenteses de Moyal são definidos por

$$\{a,b\}_M=a\star b-b\star a. \tag{34}$$

Utilizando a rpropriedade $ae^{i/2\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\right)}b=be^{-i/2\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\right)}a$ e equação $\sin\theta=\frac{e^{i\theta}-e^{-i\theta}}{2i}$, podemos escrever

$$\{a,b\}_M = 2ia\sin\left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p}-\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q}\right)b. \qquad (35)$$

Uma importante observação a ser feita é que no limite $\hbar\to\infty$, o parentese de Moyal se reduz ao comutador usual.

III. FUNÇÃO DE WIGNER

Nesta seção mostraremos como a partir da quantização de Weyl somos induzidos naturalmente à definição da função de Wigner e a formulação da mecânica quântica no espaço de fase.

É conhecido na mecânica estatística que o valor esperado de um observável $\widehat{O}$ pode ser calculado a partir do operador densidade $\widehat{\rho}$ como [4, 5]

$$\langle\widehat{O}\rangle = Tr(\widehat{\rho}\widehat{O}). \qquad (36)$$

Por outro lado, o valor esperado do operador $\widehat{O}$ pode ser escrito usando a base dos autovalores de posição como

$$\langle\widehat{O}\rangle = \int d\alpha\langle\alpha|\widehat{\rho}\widehat{O}|\alpha\rangle = \int\int d\alpha d\beta\langle\alpha|\widehat{\rho}|\beta\rangle\langle\beta|\widehat{O}|\alpha\rangle. \qquad (37)$$

Tomando a mudança de variáveis $\alpha = q+1/2y$ e $\beta = q-1/2y$, temos

$$\langle\widehat{O}\rangle = \int\int dqdy\langle q{+}1/2y|\widehat{\rho}|q{-}1/2y\rangle\langle q{-}1/2y|\widehat{O}|q{+}1/2y\rangle. \qquad (38)$$

A transformação inversa de Weyl é dada por

$$O(q,p) = \int dy\langle q-1/2y|\widehat{O}|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}, \qquad (39)$$

de onde segue que

$$\frac{1}{2\pi\hbar}\int O(q,p)e^{-ipy/\hbar}dp = \langle q-1/2y|\widehat{O}|q+1/2y\rangle, \qquad (40)$$

pois

$$\begin{aligned}\frac{1}{2\pi\hbar}\int O(q,p)e^{-ipy'/\hbar}dp &= \int\int dydp\langle q-1/2y|\widehat{O}|q+1/2y\rangle e^{ip(y-y')/\hbar}\\ &= \int dy\langle q-1/2y|\widehat{O}|q+1/2y\rangle\delta(y-y').\end{aligned}$$

Assim, nos resta que

$$\begin{aligned}\langle\widehat{O}\rangle &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int\int dqdpdy\langle q+1/2y|\widehat{\rho}|q-1/2y\rangle O(q,p)e^{-ipy/\hbar}\\ &= \frac{1}{2\pi\hbar}\int\int\int dqdpdy\left(\langle q-1/2y|\widehat{\rho}|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}\right)^* O(q,p)\\ &= \int\int dqdp\left(\frac{1}{2\pi\hbar}\int dy\left(\langle q-1/2y|\widehat{\rho}|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}\right)^*\right)O(q,p).\end{aligned}$$

Como a integral entre parenteses é simétrica nos limites de integração, seu resultado é um número real. Sendo assim, a conjugação complexa torna-se sem efeito. Com isso, podemos definir a função

$$f_W(q,p) = \frac{1}{2\pi\hbar}\int dy\left(\langle q-1/2y|\widehat{\rho}|q+1/2y\rangle e^{ipy/\hbar}\right), \qquad (41)$$

a qual é denominada função de Wigner [8–13], e constitui uma ferramenta fundamental à mecânica quântica no espaço de fase, conforme veremos na sequência.

Nesse sentido, podemos escrever o valor esperado de um observável $\widehat{O}$ como

$$\langle\widehat{O}\rangle = \int\int dqdpO(q,p)f_W(q,p). \qquad (42)$$

Esse resultado constitui uma das propriedades da função de Wigner.

Originalmente, Wigner introduziu seu formalismo em 1932 partindo da equação 41[8, 9]. Com tal definição, Wigner estudou as propriedades da função definida e estabeleceu a formulação da mecânica quântica no espaço de fase. Na sequência, estudaremos as propriedades da função de Wigner [8–10, 14].

1. Propriedades da Função de Wigner

Conforme vimos anteriormente , a função de Wigner, $f_W(q,p)$, é definida como uma transformada de Fourier dos elementos da matriz densidade, isto é,

$$f_W(q,p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int dy \exp(\frac{ipy}{\hbar}) \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle, \quad (43)$$

ou de forma equivalente,

$$f_W(q,p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int dk \exp(\frac{-iqk}{\hbar}) \langle p - \frac{k}{2}|\rho|p + \frac{k}{2}\rangle. \quad (44)$$

No caso de o sistema quântico ser descrito por um estado puro, a função de Wigner pode ser escrita como,

$$f_W(q,p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int e^{\frac{ipy}{\hbar}} \psi^\dagger(q + \frac{y}{2})\psi(q - \frac{y}{2})dy.$$

Pode-se mostrar que a função de Wigner não representa uma distribuição de probabilidades, pois pode assumir valores positivos e negativos. Este e outros aspectos da função de Wigner são interpretados a partir da análise de suas propriedades.

- Propriedade 1

$$|\psi(q)|^2 = \int f_W(q,p)dp = \langle q|\rho|q\rangle. \quad (45)$$

Essa propriedade mostra que a partir da função de Wigner podemos obter a densidade de probabilidade para se encontrar uma partícula entre q e $q + dq$

Demonstração

Para demonstrar esta propriedade, o ponto de partida será a definição da função de Wigner. Substituindo a eq.43 na 45, obtemos

$$\int dp f_W(q,p) = \frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp dy \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle e^{\frac{ipy}{\hbar}}.$$

Se for realizada a integração em p , tem-se

$$\int dp f_W(q,p) = \int dy \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle (\frac{1}{(2\pi\hbar)} \int dp e^{\frac{ipy}{\hbar}}),$$

onde o termo entre parenteses é a função delta de Dirac, $\delta(y)$. Assim

$$\int dp f_W(q,p) = \int dy \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle \delta(y).$$

Utilizando a propriedade da função delta, $\int f(x)\delta(x)dx = f(0)$, temos

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

- Propriedade 2

Outra propriedade, que é simétrica a anterior, é dada por,

$$|\widetilde{\psi}(p)|^2 = \int f_W(q,p)dq = \langle p|\rho|p\rangle. \quad (46)$$

Essa propriedade expressa a densidade de probabilidade para se encontrar uma partícula entre p e $p + dp$.

Demonstração

Substituindo a equação 44 na 46, temos

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

Se for feita a integração primeiro em q, segue que

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

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

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

o que leva a

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

- Propriedade 3

A função de Wigner normalizada, isto é,

$$\int f_W(q,p)dqdp = Tr\rho = 1. \quad (47)$$

Demonstração

Substituindo a eq. 43 na eq. 47, obtém-se

$$\int f_W(q,p)dqdp = (2\pi\hbar)^{-1} \int dydqdpexp(\frac{ipy}{\hbar}) \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle.$$

Calculando a integral na variável p, obtemos

$$\int f_W(q,p)dqdp = \int dydq \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle ((2\pi\hbar)^{-1} \int dp e^{\frac{ipy}{\hbar}}).$$

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

$$\begin{aligned}\int f_W(q,p)dqdp &= \int dydq \langle q - \frac{y}{2}|\rho|q + \frac{y}{2}\rangle \delta(y) \\ &= \int dq \langle q|\rho|q\rangle = Tr\rho = 1.\end{aligned}$$

- Propriedade 4: A função de Wigner não é positiva definida.

Demonstração

A função de Wigner não representa uma distribuição de probabilidade, pois ela pode assumir valores positivos e negativos, como pode ser observado a partir da argumentação a seguir descrita. Se f_α e f_β são duas funções de Wigner associadas, respectivamente, aos estados $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$, então

$$|\langle\alpha|\beta\rangle|^2 = (2\pi\hbar)^{-1}\int f_\alpha(q,p;t)f_\beta(q,p;t)dqdp.$$

O lado esquerdo dessa equação é positivo ou nulo (se os kets forem ortogonais). No último caso, temos, como consequência, a integral de $f_\alpha f_\beta$ nula. Como f_α e f_β não são necessariamente nulas, resulta que f_α e f_β podem assumir valores negativos e positivos, de tal modo 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 no espaço de fase.

Da mesma forma que definimos a função de Wigner $f_W(q,p)$ como uma espécie de transformada de Fourier do operador densidade $\widehat{\rho}$, podemos definir a função $a_w(q,p)$ correspondente ao operador quântico usual $\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})$ por meio das seguintes expressões,

$$a_w(q,p) = \int dyexp(\frac{ipy}{\hbar})\langle q-\frac{y}{2}|\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})|q+\frac{y}{2}\rangle, \quad (48)$$

ou

$$a_w(q,p) = \int dkexp(\frac{-iqk}{\hbar})\langle p-\frac{k}{2}|\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})|p+\frac{k}{2}\rangle, \quad (49)$$

que são análogas às equações 43 e 44. As funções $a_w(q,p)$ de equivalentes na representação de Wigner de $\widehat{a}(\widehat{q},\widehat{p})$. As funções $a_w(q,p)$ satisfazem propriedades similares as propriedades da funções de Wigner. O leitor interessado poderá estudá-las e demonstrá-las como exercício, vide referências .

2. *Evolução Temporal da Função de Wigner*

Suponha agora que conhecemos a função de Wigner ou qualquer operador na representação de Wigner num dado instante t, e desejamos determinar os correspondentes operadores num instante posterior $t+dt$. Para isso, é preciso que conheçamos uma equação que dê a evolução temporal da função de Wigner. Esta equação é uma equação diferencial de primeira ordem no tempo representada no espaço de fase, conforme deduziremos a seguir.

Tomando então a equação de Liouville von-Neumann

$$i\hbar\frac{\partial\widehat{\rho}}{\partial t} = [\widehat{H},\widehat{\rho}],$$

em que $\widehat{H}$ representa o operador hamiltoniano, e aplicando nela o operador,

$$(2\pi\hbar)^{-1}\int dyexp(\frac{ipy}{\hbar})\langle q-\frac{y}{2}|.|q+\frac{y}{2}\rangle,$$

em ambos os lados, temos que

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\{(2\pi\hbar)^{-1}\int dyexp(\frac{ipy}{\hbar})\langle q-\frac{y}{2}|\widehat{\rho}|q+\frac{y}{2}\rangle\} = \quad & (2\pi\hbar)^{-1}\int dyexp(\frac{ipy}{\hbar})\langle q-\frac{y}{2}|\widehat{H}\widehat{\rho}|q+\frac{y}{2}\rangle \\ & -(2\pi\hbar)^{-1}\int dyexp(\frac{ipy}{\hbar})\langle q-\frac{y}{2}|\widehat{\rho}\widehat{H}|q+\frac{y}{2}\rangle. \end{aligned}$$

O que leva a

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

Utilizando o parêntese de Moyal, $\{a,b\}_M = a\star b - b\star a$, temos

$$i\hbar\frac{\partial f_W(q,p,t)}{\partial t} = \{H_W, f_W\}_M, \quad (50)$$

em que observamos que essa equação dinâmica é análoga à equação de Liouville-von Neumman, notando que o estado do sistema é descrito pela função de Wigner e o comutador foi substituído pelo parêntesis de Moyal.

Podemos ainda notar que o parentese de Moyal pode ser escrito da seguinte forma,

$$\{a(q,p),b(q,p)\} = \frac{2}{\hbar}a(q,p)\sin\left[\frac{\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial_p}\overrightarrow{\partial_q} - \overleftarrow{\partial_q}\overrightarrow{\partial_p})\right]b(q,p), \tag{51}$$

onde foi utilizado $e^{\frac{i\hbar\Lambda}{2}} - e^{\frac{-i\hbar\Lambda}{2}} = 2i\sin(\frac{\hbar\Lambda}{2})$.

Obtemos um resultado interessante se expandirmos em série de potências o seno da última expressão que define o parêntesis de Moyal,

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

No limite em que $\hbar \to 0$, obtemos como resultado que a função de Wigner obedece a equação de Liouville clássica, com H_W no lugar da função hamiltoniana, isto é

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} = \frac{\partial H_W}{\partial q}\frac{\partial f_W}{\partial p} - \frac{\partial H_W}{\partial p}\frac{\partial f_W}{\partial q} = \{H_W, f_W\},$$

e ainda,

$$\frac{\partial H_W}{\partial q} = \dot{p} \quad e \quad \frac{\partial H_W}{\partial p} = \dot{q}.$$

E ainda, há casos em que a hamiltoniana coincide com a sua transformada de Weyl, levando-nos a concluir que o formalismo de Wigner é compatível com o princípio da correspondência. Este fato justifica a aplicação do formalismo de Wigner em estudos de sistemas caóticos semiclássicos, por exemplo.

IV. CÁLCULO DA FUNÇÃO DE WIGNER PARA O OSCILADOR HARMÔNICO

Nesta seção, obteremos a função de Wigner para o oscilador harmônico. Para calcularmos a função de Wigner de um sistema, de acordo com a prescrição apresentada neste texto, precisamos a solução da equação de Schroedinger do respectivo sistema. Para esse fim, considere a equação de Schroedinger para o oscilador harmônico unidimensional na representação da posição

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{m\omega^2}{2}q^2\right)\psi(q) = E\psi(q). \tag{52}$$

A solução da equação 52 é dada por

$$\psi_n(q) = \left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)^{\frac{1}{2}} H_n(\alpha q)e^{-\frac{\alpha^2 q^2}{2}}, \tag{53}$$

em que $\alpha = \sqrt{m\omega/\hbar}$ e $H_n(\alpha q)$ são os polinômios de Hermite. Dessa forma, a função de Wigner do oscilador harmônico pode ser calculdada a partir da integral

$$\begin{aligned} f_w(q,p) &= (2\pi\hbar)^{-1}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)\int dy e^{ipy/\hbar}e^{-\frac{\alpha^2(q-y/2)^2}{2}}H_n(\alpha(q-y/2))e^{-\frac{\alpha^2(q+y/2)^2}{2}}H_n(\alpha(q+y/2)) \\ &= (2\pi\hbar)^{-1}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)\int dy e^{ipy/\hbar}e^{-\alpha^2(q^2+y^2/4)}H_n(\alpha(q-y/2))H_n(\alpha(q+y/2)) \\ &= (2\pi\hbar)^{-1}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)e^{-\alpha^2 q^2}\int dy e^{ipy/\hbar-\alpha^2 y^2/4}H_n(\alpha(q-y/2))H_n(\alpha(q+y/2)). \end{aligned} \tag{54}$$

Se completarmos quadrado na exponencial dentro da integral, obtemos

$$f_W(q,p) = (2\pi\hbar)^{-1}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)e^{-\alpha^2 q^2 - \frac{p^2}{4\alpha^2\hbar^2}}\int dy e^{-\left(-\frac{ip}{2\hbar\alpha}+\alpha y/2\right)^2}H_n(\alpha(q-y/2))H_n(\alpha(q+y/2)). \tag{55}$$

Tomando a mudança de variáveis $z = -\frac{ip}{2\hbar\alpha} + \alpha y/2$, chegamos a

$$f_W(q,p) = (-1)^n\frac{2}{\alpha}(2\pi\hbar)^{-1}\left(\frac{\alpha}{\sqrt{\pi}2^n n!}\right)e^{-\alpha^2 q^2 - \frac{p^2}{4\alpha^2\hbar^2}}\int dz e^{-z^2}H_n(\alpha(z+\frac{ip}{2\hbar\alpha}+q))H_n(\alpha(z+\frac{ip}{2\hbar\alpha}-q). \tag{56}$$

Utilizando a relação

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dz e^{-z^2}H_m(z+a)H_n(z+b) = \sqrt{\pi}2^n m! b^{n-m}L_m^{m-n}(-2ab),$$

em que $L_n^{(m)}$ são os polinômios de Legendre associados.

Com isso, finalmente obtemos a função de Wigner correspondente ao oscilador harmônico unidimensional, a qual é dada por

$$f_W(q,p) = 2(-1)^n(2\pi\hbar)^{-1}e^{-\alpha^2q^2-\frac{p^2}{4\alpha^2\hbar^2}}L_n\left(2\alpha^2q^2+\frac{p^2}{2\hbar^2\alpha^2}\right). \tag{57}$$

Com a função de Wigner encontrada, podemos calcular valores esperados utilizando a equação 42. Sugerimos ao leitor que calcule como exercício o valor esperado da energia.

V. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi apresentado o método de quantização de Weyl, a partir do qual foi obtido um formalismo para a mecânica quântica no espaço de fase. No âmbito da quantização de Weyl, podemos afirmar que trata-se de um procedimento bem definido, a priori válido para qualquer espécie de hamiltoniano, e sem as ambiguidades características do formalismo de quantização canônico. No arcabouço do formalismo de Wigner para a mecânica quântica, percebemos que o princípio de equivalência é obtido de forma trivial, ou seja, a conexão quântico-clássico é obtida tomando $\hbar \to 0$. Além disso, vimos que a função de Wigner não pode ser considerada uma distribuição de probabilidades, pois pode assumir valores negativo; porém, valores esperados podem ser encontrados utilizando esse formalismo para a mecânica quântica no espaço de fase. A função de Wigner possui diversas aplicações, sendo assim, o leitor interessado pode aprofundar os estudos neste tema a partir de literatura disponível.

[1] L.D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantun Mechanics.* Oxford: Pergamon Press(1977).
[2] A. Messiah, *Quantum Mechanics.* New York: Wiley (1961).
[3] E. Merzbacher, *Quantum Mechanics*, 3Ed. New York: Wiley (1977).
[4] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu, F. Laloe, *Quantum Mechanics.* New York: Wiley (1977).
[5] J. J. Sakurai, *Modern Quantum Mechanics.* New York: Addison-Wesley Publishing Company (1994).
[6] H. Weyl, Z. Phys. **46** (1927) 1.
[7] J.E. Moyal, Proc. Camb. Phil. Soc. **45** (1949) 99.
[8] E. P. Wigner, Z. Phys. Chem. **B19** (40) (1932) 749.
[9] M. Hillery, R. F. O Connel, M. O. Scully, E. P. Wigner; Phys.
[10] E. P. Wigner, Ann. Math. **40** (1939) 149. Rep. **106** (1984) 121.
[11] T. Curtright, D. Fairlie, C. Zacos, Phys. Rev. D **58** (1998) 25002.
[12] K. Imre, E. Ozizmir, M. Rosembaum, P. F. Zweifel, J. Math. Phys. **8** (1967) 1097.
[13] T. Curtright, T. Uematsu, C. Zachos,Generating all Wigner Functions, (2001) [hep-th/0011137]
[14] R.G.G. Amorim, *et al*, Rev. Bras. Ens. Fís. **35** (3) (2013) 3604.