



Pedro de Siqueira Campos Filho

MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA
E
O POTENCIAL DE COULOMB

Salvador
2018



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA

Instituto de Física

Pedro de Siqueira Campos Filho

MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA
E
O POTENCIAL DE COULOMB

Tese apresentada ao Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Doutor em Física.

Orientador: José David Mangueira Vianna

ESTE EXEMPLAR CORRESPONDE À VERSÃO FINAL DA TESE DEFENDIDA PELO ALUNO *Pedro de Siqueira Campos Filho*, E ORIENTADA PELO PROF. DR. JOSÉ DAVID MANGUEIRA VIANNA.

Assinatura do Orientador

SALVADOR

2018

MECÂNICA QUÂNTICA SIMPLÉTICA E O POTENCIAL DE COULOMB

Por

Pedro de Siqueira Campos Filho

Tese submetida ao Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia (IF-UFBA) como parte dos requisitos para obtenção do grau de Doutor em Física

Aprovada por:

Prof. Dr. José David Manguiera Vianna
(Orientador - IF UnB e IF UFBA)

Prof. Dr. Marco Cezar Barbosa Fernandes
IF-UnB

Prof. Dr. Ronni Geraldo Gomes de Amorin
Faculdade Gama-UnB

Prof^a. Dr^a. Maria des Graças Reis Martins
IF-UFBA

Prof. Dr. Alexandre Leite Gadelha
IF-UFBA

Salvador, 19 de dezembro de 2019

Prof. Dr. Frederico Prudente Vasconcelos
Coordenador de Pós-Graduação
IF-UFBA

Abstract

The Wigner quasi-distribution function, introduced almost 85 years ago, is one of the most beautiful example of mathematical creativity in quantum mechanics. Owing to its peculiar properties, it has attracted attention of numerous researches during decades. The phase space formulations of quantum mechanics are based on Wigner's quasi-distribution function and Weyl's correspondence between ordinary c-number functions in phase space and quantum-mechanical operators in Hilbert space. The interpretation of phase space representation of quantum mechanics is given by considering the Wigner function $f_W(q, p)$, which both the position and momentum variables are c-numbers. Thus the variables in this formulation are c-number functions in phase space instead of operators, with the same interpretation as their classical counterparts, but they are compounded together into new algebraic forms. In one of the formulations, the quantum mechanics symplectic[1, 2], one uses the unitary representations of the Galilei group and obtains the Schrödinger equation in phase space; This formulation allows to obtain Wigner functions without using the Liouville-von Neumann equation. In this formulation the operators \hat{q} and \hat{p} are given by: $\hat{q} = q + \frac{i\hbar}{2}\partial_p$ and $\hat{p} = p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q$. Consequently the solution of the Schrödinger equation for potentials depending on $1/\hat{q}$ requires special treatment. In this work we present a method to solve such problem and consider with our procedure the case of hydrogen atom in 2D(two-dimensional) and 3D(three-dimensional). We use the Kustaanheimo-Stiefel(KS) transformation which is applied in the case of the phase space Schrödinger equation to the hydrogen atom. Amplitudes of probability in phase space and the correspondent Wigner quasi-distributions are derived and discussed. An analysis of the results is presented and its extension to the treatment of other fundamental physical problems with our formulation is discussed.

Keywords: Symplectic quantum mechanics, Wigner function, Coulomb potential, Kustaanheimo-Stiefel transformation.

Resumo

A quasi-distribuição função de Wigner, introduzida há 85 anos, é um dos mais belos exemplos da criatividade matemática na mecânica quântica. Devido às suas propriedades peculiares, atraiu a atenção de inúmeras pesquisas durante décadas. As formulações da mecânica quântica no espaço de fase baseiam-se na quasi-distribuição função de Wigner e na correspondência de Weyl entre as c-números funções ordinárias no espaço de fase e os operadores da mecânica quântica no espaço de Hilbert. A interpretação da representação da mecânica quântica no espaço de fase é dada pela função de Wigner $f_W(q, p)$, onde ambas variáveis de posição e de momentum são c-números. Assim, as variáveis são c-números funções no espaço de fase em vez de operadores, com a mesma interpretação que as suas correspondentes clássicas, mas são combinadas em novas formas algébricas. Em uma das formulações da mecânica quântica simplética [1, 2] usa-se as representações unitárias do grupo de Galilei e se obtém a equação de Schrödinger no espaço de fase; esta formulação permite obter as funções de Wigner sem utilizar a equação de Liouville-von Neumann. Nessa formulação, os operadores \hat{q} e \hat{p} são dados por $\hat{q} = q + \frac{i\hbar}{2}\partial_p$ e $\hat{p} = p - \frac{i\hbar}{2}\partial_q$. Consequentemente, a solução da equação de Schrödinger para potenciais dependendo de $1/\hat{q}$ requer um tratamento especial. Neste trabalho, apresentamos um método para resolver esse problema e consideramos o caso do átomo de Hidrogênio em 2D(bidimensional) e 3D(tridimensional). A transformação Kustaanheimo-Stiefel(KS) é aplicada ao caso da equação de Schrödinger do átomo de hidrogênio no espaço de fase. As amplitudes de probabilidade no espaço de fase e as quasi-distribuições funções de Wigner correspondentes são derivadas e discutidas. Uma análise dos resultados é apresentada e a extensão para o tratamento de outros problemas físicos fundamentais com a nossa formulação é discutida.

Palavras-chave: Mecânica quântica simplética, função de Wigner, potencial de Coulomb, transformação Kustaanheimo-Stiefel.

Sumário

Dedicatória	xi
Agradecimentos	xiii
1 Introdução	1
2 Função de Wigner e o produto de Weyl	7
2.1 A Equação de Liouville-von Neumann	8
2.2 Definição da Função de Wigner	12
2.2.1 Propriedades da Função de Wigner	15
2.3 Propriedades dos Operadores na Descrição de Wigner	18
2.3.1 Produto de Operadores Quânticos na Descrição de Wigner	20
2.4 Evolução Temporal da Função de Wigner	26
2.4.1 Equação-estrela de Autovalores e a Função de Wigner	29
2.4.2 Evolução Temporal do Valor Esperado de um Observável	31
3 Mecânica Quântica Simplética	33
3.1 Espaço de Hilbert e a Estrutura Simplética	34
3.2 Representação do Grupo de Galilei sobre o Espaço de Hilbert Simplético	35
3.3 Evolução Temporal de um Observável no Espaço de Hilbert Simplético	39
3.4 A Equação de Schrödinger no Espaço de Hilbert Simplético	41
3.5 Conexão com a Formalização de Wigner	42
3.6 Matriz Densidade no Espaço de Hilbert Simplético	44
3.7 Espaço de Hilbert Relativístico e a Estrutura Simplética	45
3.8 A Álgebra de Poincaré-Lie no Espaço de Fase	46

3.9	A Equação de Klein-Gordon no Espaço de Fase	48
3.10	A Equação de Dirac no Espaço de Fase	49
4	Átomo de Hidrogênio Unidimensional	51
4.1	Hamiltoniano do Átomo Hidrogênio Unidimensional	52
5	Átomo de Hidrogênio Bidimensional	58
5.1	Hamiltoniano do Átomo de Hidrogênio Bidimensional	58
6	Átomo de Hidrogênio Tridimensional	68
6.1	Hamiltoniano do Átomo Hidrogênio Tridimensional	69
7	Conclusões e Perspectivas	79
	Referências	82

*A memória dos meus pais, Pedro de Siqueira Campos e
Maria Dolores de Hollanda de Siqueira Campos, que
sempre me apoiaram e incentivaram nos meus estudos.*

Agradecimentos

- Ao Prof. José David Manguiera Vianna e a Prof. Maria das Graças Reis Martins pelo apoio, confiança e total liberdade (gr. *ἐλευθερία*; lat. *Libertas*; in. *Freedom, Liberty*; fr. *Liberté*; al. *Freiheit*; it. *Libertà*) concedida a mim na realização deste trabalho. Eu aprendi que: Liberdade não é uma escolha, mas "uma possibilidade de escolha", ou seja, uma escolha que, se feita, poderá ser sempre repetida em determinada situação. Assim, pode-se dizer que a Liberdade está presente em todas as atividades humanas organizadas e eficazes, notadamente nos procedimentos científicos.
- A todos Professores, Estudantes e Funcionários pelo convívio no Instituto de Física da Universidade Federal da Bahia (UFUFBA), o qual foi para mim um local onde reinou a liberdade e responsabilidade.
- Ao Instituto Federal do Sertão Pernambucano pelo apoio institucional.
- Ao Professor e amigo Bruno Gomes, pelo incentivo com seu exemplo de dedicação e perseverança.
- À minha esposa Martha Maria, aos meus queridos filhos do coração: Iasmin, Iara, Íris e Gabriel pelo apoio, carinho e amor.
- Fundamentalmente, agradeço a Deus e toda minha família que sempre estiveram presentes ao longo da minha vida.

*A vida só pode ser compreendida, olhando para trás,
mas só pode ser vivida, olhando-se para frente.*

(Søren Kierkegaard)

O segredo da sabedoria, do poder e do conhecimento é a humildade.

(Ernest Hemingway)

*As obras são grandes ou pequenas, boas ou ruins, novas ou velhas,
dependendo do referencial com que as comparamos. Quem cultiva o dom da
Ciência em sua vida sempre descobre uma flor brotando do manguê, pois a
vida concorre para realizar a sutileza que lhe dispomos.*

Capítulo 1

Introdução

Homem, conhece-te a ti próprio na verdadeira proporção.
Oráculo de Delfos

*Todas as coisas estão cheias de sinais, e é sábio aquele
que consegue aprender uma coisa a partir de outra.*
Plotino (205-270), Filósofo Romano

Existem vários caminhos alternativos para quantizar um micro sistema físico. Um deles refere-se à revolução quântica dos anos vinte do século passado, realizada por Schrödinger, Heisenberg, Dirac e outros; nessa formulação padrão da mecânica quântica fazemos uso de operadores no espaço de Hilbert. Outra formulação é a integral de trajetória, que foi concebida por Dirac[54]¹ e formulada por Feynman em 1948[66, 67, 149]. Um terceiro caminho é a formulação da mecânica quântica no espaço de fase (também conhecida como quantização Moyal ou quantização de deformação) que é baseada na função quasi-distribuição de Wigner[155] e na correspondência de Weyl entre as funções ordinárias de c-números no espaço de fase e os operadores da mecânica quântica no espaço de Hilbert[152, 153]. No final da década de 1970, Bayen e colaboradores[16, 17] lançaram as bases para uma descrição alternativa da formulação da mecânica quântica no espaço de fase. As raízes desse trabalho são encontradas em trabalhos anteriores publicados por Weyl[152, 153], Wigner[155], Groenewold[81], Moyal[123] e Berezin[19, 20, 21] no lado da física, e de Gerstenhaber e Schack[70, 71, 72, 73, 74] no lado da matemática. Desde então, muitos esforços foram feitos para

¹As referências desta Tese de Doutorado estão em ordem alfabética e numeradas.

desenvolver a mecânica quântica no espaço de fase; para um tratamento abrangente do assunto o leitor pode consultar as Refs.[59, 85, 101]. Uma extensa coleção de artigos importantes e lista de referências pode ser encontrada nas Refs.[43, 159].

A representação da mecânica quântica no espaço de fase é menos conhecida, mas é útil em muitos ramos da física, por exemplo, em óptica quântica[135], física nuclear[18], física atômica[49, 106, 143], matéria condensada[52, 53, 127], teoria de campo[7, 55, 56, 57, 58, 158], M-teoria[10, 63, 131], geometria não-comutativa[5, 37] e os modelos de teoria de campo não-comutativos[9, 38, 92, 93, 94, 141]. O conceito de espaço de fase vem naturalmente da formulação hamiltoniana da mecânica clássica e desempenha um papel importante na relação entre mecânica quântica e clássica, ou seja, na transição da quântica para clássica. A mecânica quântica no espaço de fase pode ser analisada como resultado de uma generalização da mecânica hamiltoniana clássica, de tal maneira que sua formulação deve reduzir-se suavemente à formulação da mecânica clássica hamiltoniana quando a constante de Planck \hbar vai para 0, já que \hbar parametriza a conexão entre a mecânica clássica e a mecânica quântica. A interpretação da representação da mecânica quântica no espaço de fase é dada considerando-se a função de Wigner $f_w(q, p)$, onde ambas variáveis, posição e *momentum*, são c-números. Uma vantagem básica dessa representação é que podemos realizar transformações canônicas, assim como na mecânica clássica hamiltoniana[101].

No desenvolvimento usual, a função de distribuição de Wigner estacionária no espaço de fase $f_w(q, p)$ é escrita em termos de uma "espécie" de transformada de Fourier da função de onda $\psi(q)$, que é solução da equação de Schrödinger independente do tempo na representação usual, isto é $\hat{H}(\hat{q}, \hat{p})\psi(q) = E\psi(q)$; ela é definida através da seguinte expressão [85, 155]:

$$f_w(q, p) = \int e^{\frac{ip\xi}{\hbar}} \psi^\dagger\left(q + \frac{\xi}{2}\right) \psi\left(q - \frac{\xi}{2}\right) d\xi, \quad (1.0.1)$$

onde todas as integrais são efetuadas de $-\infty$ a $+\infty$. A função de Wigner é identificada como uma quasi-distribuição, no sentido de que $f_w(q, p)$ é uma função real, mas não é uma função positiva definida de modo que não podemos interpretá-la como uma distribuição de probabilidade. Entretanto, as integrais $\rho(q) = \int f_w(q, p) dp$ e $\rho(p) = \int f_w(q, p) dq$ são funções de distribuição verdadeiras. No formalismo de Wigner cada operador, digamos A , definido no espaço de Hilbert, \mathbf{H} , está associado a uma função, digamos $a_w(q, p)$ no espaço de fase Γ . Então, há um aplicação $\Omega_w : A \mapsto a_w(q, p)$ tal que, a álgebra associativa de operadores definidos em \mathbf{H} , corresponde a uma álgebra associativa, porém não comutativa. Isso é uma consequência direta da aplicação Ω_w sobre o produto de operadores, ou seja, $\Omega_w : AB \mapsto a_w \star b_w$ em Γ , onde o produto estrela \star é

definido por

$$a_w \star b_w = a_w(q, p) \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right) \right] b_w(q, p). \quad (1.0.2)$$

As setas indicam o sentido em que os operadores diferenciais são aplicados. Esse produto, também chamado de *produto de Weyl*, é explorado no espaço de fase de várias maneiras, em particular, operadores unitários podem ser introduzidos pela definição[128]:

$$a_w(q, p) \star := a_w(q, p) \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\overleftarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial p}} - \overleftarrow{\frac{\partial}{\partial p}} \overrightarrow{\frac{\partial}{\partial q}} \right) \right]. \quad (1.0.3)$$

Assim, podemos estudar representações unitárias de grupos cinemáticos considerando operadores do tipo $a_w \star$. Estudos da representação do grupo de Galileu em uma variedade com conteúdo de espaço de fase veem sendo desenvolvidos desde algum tempo [65, 103, 112, 114, 116, 138, 139, 140]. Este tipo de representação, chamada representação unitária simplética, tem sido usada por vários autores[85, 101, 123, 152]; em particular, com o intuito de explorar a estrutura algébrica do formalismo de Wigner, Oliveira et al[128] consideraram representações unitárias para o grupo de Galileu baseadas em operadores do tipo $a_w \star$ e mostraram como reescrever a equação de Schrödinger no espaço de fase. Isso fornece uma versão alternativa para a mecânica quântica. Seguindo essa formulação, que é chamada de Mecânica Quântica Simplética(MQS), a equação de Schrödinger independente do tempo no espaço de fase é escrita da seguinte forma

$$H(\widehat{Q}, \widehat{P}) \Psi(q, p) = E \Psi(q, p), \quad (1.0.4)$$

onde

$$H(\widehat{Q}, \widehat{P}) = \frac{\widehat{P}^2}{2m} + V(\widehat{Q}) \quad (1.0.5)$$

com

$$\widehat{P} = p \star = p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q, \quad (1.0.6)$$

$$\widehat{Q} = q \star = q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p, \quad (1.0.7)$$

e a função de Wigner é definida por

$$\mathbf{f}_w = \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p). \quad (1.0.8)$$

A equação de Schrödinger (1.0.4) é covariante simpleticamente[77, 78] e para compreensão da origem dessa equação, o leitor pode consultar a Refs.[77, 78, 128, 147, 148]. Essa abordagem

fornece uma interpretação satisfatória de vários aspectos da mecânica quântica no espaço de fase e, embora seja associada ao formalismo de Wigner, tem como gerador de translação temporal o operador hamiltoniano e não o operador Liouvilliano; da Eq.(1.0.4) segue, por exemplo, que

$$H(\hat{P}, \hat{Q}) \Psi \star \Psi^\dagger = E \Psi \star \Psi^\dagger \quad (1.0.9)$$

ou

$$H(\hat{P}, \hat{Q}) f_w = E f_w. \quad (1.0.10)$$

A MQS foi aplicada a alguns sistemas quânticos, como, por exemplo o oscilador harmônico simples e perturbado[128], e o átomo de hidrogênio unidimensional[42]. Para estes sistemas, os estados foram obtidos em termos das amplitudes de probabilidade no espaço de fase $\Psi(q, p)$. No entanto, para o átomo de hidrogênio com potencial de Coulomb, em duas e três dimensões, existem algumas dificuldades específicas que impediu até o presente trabalho de conhecer as amplitudes de probabilidade $\Psi(q, p)$ correspondentes.

Um ambicioso programa da física quântica no espaço de fase é verificar se a função de Wigner pode revelar os aspectos básicos da mecânica quântica que não são vistos na representação de Schrödinger ou Heisenberg. Têm sido feitos esforços nessa direção e, no momento presente, por meio da representação da mecânica quântica no espaço de fase pode-se interpretar o princípio de incerteza com mais precisão do que na representação de Schrödinger ou na de Heisenberg[101]. Os valores esperados das grandezas observáveis, medidas no laboratório, são computados na representação do espaço de fase da mecânica quântica tomando simplesmente a integral envolvendo os observáveis e a *quasi densidade de probabilidade de Wigner* - essencialmente a matriz de densidade. Essa densidade, como já dito anteriormente, pode assumir valores negativos e, de fato, pode ser reconstruída a partir das medições de laboratório[43, 108]. A preparação, manipulação e caracterização de sistemas quânticos são tarefas essenciais para a computação quântica. Em tomografia de estados quânticos o objetivo é encontrar uma estimativa para a matriz densidade associada a um *ensemble* de estados quânticos identicamente preparados. Com efeito, com o desenvolvimento dessa tomografia quântica no espaço de fase, as funções de Wigner foram experimentalmente reconstruídas para estados quânticos da luz, modos vibracionais de moléculas e superposições de átomos frios difratados por uma fenda dupla[109, 132]. Em consequência, a visualização do estado quântico pode ser usada para revelar propriedades quânticas, tais como, o entrelaçamento de sistemas correlacionados [62] ou subestruturas de Planck no espaço de fase e sua relevância

para a decoerência quântica[75, 161]. Também é possível formular problemas de potenciais de espalhamentos não relativísticos em termos da função de Wigner e, portanto, calcular as seções de choque a partir da função de Wigner[31]. Devido a isso, a quasi-distribuição no espaço de fase é também uma ferramenta teórica efetiva na Física Atômica[46, 49, 106, 137, 143]. Dentro desse contexto teórico e experimental é importante calcular a forma analítica das amplitudes $\Psi(q, p)$ e da função de Wigner $\mathbf{f}_w = \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p)$ de sistemas físicos fundamentais, como, por exemplo, o átomo de hidrogênio, o que pode ser útil para tomografia quântica simplética e o diagnóstico de estados quânticos[132]. A MQS, como já exposto, foi aplicada ao oscilador harmônico simples, e suas funções de Wigner, bem como o espectro discreto, foram cuidadosamente estudados[43, 128]. No entanto, para o potencial de Coulomb, na MQS, é conhecida somente a função de Wigner para o caso do átomo de Hidrogênio unidimensional(1D)[42, 113], havendo portanto necessidade de se determinar as correspondentes $\Psi(q, p)$ e a função de Wigner \mathbf{f}_w para o caso bidimensional(2D) e tridimensional(3D). Neste contexto, devemos observar que, apesar da existência das expressões analíticas das autofunções do átomo de hidrogênio nas representações usuais de posição e *momentum*[22], uma forma analítica fechada das funções de quasi-distribuição de Wigner do átomo de hidrogênio é pelo melhor de nosso conhecimento desconhecida. Além disso, o papel da função de Wigner para o átomo de hidrogênio na mecânica quântica no espaço de fase ainda não foi totalmente explorado. Em 1982, Dahl e Springborg[49] iniciaram um tratamento do átomo de hidrogênio 3D e outros átomos simples no espaço de fase, mas o referido tratamento não é a partir de primeiros princípios, ou seja, as funções de Wigner foram avaliadas em termos de transformações das autofunções da equação de Schrödinger usual. Na literatura há um número limitado de estudos sobre o assunto, que se baseiam em métodos aproximados; o leitor pode consultar as seguintes referências[16, 17, 34, 47, 48, 49, 80, 143]. Uma forma analítica quase fechada para a função Wigner é dada nas Refs.[126, 132].

Por essas razões, consideramos ser essencial encontrar uma fórmula analítica exata para a função de Wigner do átomo de hidrogênio 1D, 2D e 3D. Assim, o objetivo deste trabalho é utilizar a mecânica quântica no espaço de fase, conforme desenvolvido por Oliveira et al., para derivar a função de Wigner do átomo de hidrogênio. Nosso procedimento é baseado na transformação de Levi-Civita (ou Bohlin)[23, 110, 111] e sua generalização, isto é, a transformação Kustaanheimo-Stiefel(KS). Aplicamos essa transformação para o caso do átomo de hidrogênio 2D[27] e a estendemos para o caso 3D[28]. A transformação KS[144, 145] foi originalmente introduzida para o

problema de Kepler, a fim de remover a singularidade do problema de colisão de dois corpos da mecânica clássica celeste. Essa também foi adaptada para o átomo de hidrogênio na descrição tradicional da mecânica quântica, e estudada por alguns autores[14, 24, 25, 26, 32, 33, 39, 40, 69, 100]. A conexão entre o potencial de Coulomb e o potencial do oscilador harmônico é um tema que tem atraído um interesse considerável, particularmente porque envolve conceitos como degenerescência acidental[119, 122], simetria dinâmica[13], e também devido ao aspecto prático, como por exemplo, na derivação da integral de trajetória para o potencial de Coulomb[89] e na construção de estados coerentes[69, 89]. No presente trabalho, mostraremos que a transformação KS pode naturalmente ser aplicada para transformar a equação de Schrödinger no espaço de fase (1.0.4) do átomo de hidrogênio 2D e 3D na equação do oscilador harmônico 2D e 4D, respectivamente. Em consequência, obteremos as soluções $\Psi(q, p)$ e as funções de Wigner correspondentes $\mathbf{f}_w = \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p)$ sem que para isto precisemos usar a transformação (1.0.1).

A apresentação desta tese está organizado da seguinte forma. O segundo capítulo trata da definição usual da função de Wigner, assim como da transformada de Weyl para um operador. As propriedades da função de Wigner e a formulação de Weyl-Wigner para a mecânica quântica no espaço de fase são apresentadas. No capítulo 3, seguindo as referências [2, 128], apresentamos a Mecânica Quântica Simplética e veremos, então, as representações do grupo de Galilei e Poincaré num espaço de Hilbert associado ao espaço de fase. Essas representações nos permitem escrever as equações de Schrödinger, Klein-Gordon e Dirac no espaço de fase. Nos Capítulos 4, 5 e 6 trataremos do átomo de Hidrogênio em 1D, 2D e 3D, respectivamente. As nossas perspectivas e conclusões finais são apresentadas no Capítulo 7.

Capítulo 2

Função de Wigner e o produto de Weyl

Podemos dizer que a mecânica quântica é uma deformação da mecânica clássica. A constante de Planck h é o parâmetro de deformação correspondente. Esta é para mim a formulação mais concisa do princípio da correspondência e explica o que se entende por quantização.

Ludwig Faddeev

Assim como a função de onda desempenha o papel central na descrição de Schrödinger da Mecânica Quântica, a função de distribuição no espaço de fase, introduzida por Wigner em 1932[155], é o ponto de partida da descrição no espaço de fase da Mecânica Quântica. Wigner introduziu essa função com o objetivo de proporcionar correções quânticas à mecânica estatística sem perder a natureza de espaço de fase. A função de Wigner é construída da função de onda de Schrödinger por via da matriz densidade. Neste capítulo iniciaremos com a introdução da matriz densidade e da **equação diferencial de Liouville-von Neumann** usando a noção de *ensemble*. Nas seções seguintes apresentaremos: a função de Wigner e suas propriedades, as propriedades dos operadores e seus produtos na representação de Wigner, a evolução temporal da função de Wigner e do valor esperado de um observável, e a equação-estrela de autovalores. Essa apresentação é baseada principalmente nas referências [5, 6, 68, 117, 128].

2.1 A Equação de Liouville-von Neumann

O formalismo da mecânica quântica usual pode ser usado para fazer previsões estatísticas sobre um *ensemble* - isto é, uma coleção - de sistemas físicos preparados de maneira idêntica[134]. Contudo, um *ensemble* pode ser classificado como completamente aleatório, puro e misto; os dois primeiros tipos podem ser vistos como os extremos do terceiro. Um *ensemble* puro é, por definição, uma coleção de sistemas físicos tal que cada um dos membros da coleção é caracterizado pelo mesmo *ket* $|\psi\rangle$. Em um *ensemble* misto, ao contrário, uma fração de membros com população relativa ω_1 é caracterizada por $|\psi^1\rangle$; uma outra fração com ω_2 é caracterizada por $|\psi^2\rangle$, e assim por diante. As populações fracionárias devem satisfazer uma condição de normalização,

$$\sum_i \omega_i = 1, \quad \omega_i \geq 0. \quad (2.1.1)$$

A Mecânica Quântica é uma teoria baseada na probabilidade o que se torna mais evidente quando o nosso conhecimento sobre o sistema não é completo, e então somos levados a usar o conceito estatístico de probabilidade para obtermos informações sobre seu comportamento dinâmico. Vamos, assim, apresentar o formalismo do operador densidade, que descreve quantitativamente situações físicas com *ensembles* mistos tanto quanto com *ensembles* puros. Esse formalismo foi inicialmente realizado por von Neumann em 1927[124] e também, independentemente, por Landau e Bloch¹. Assim, consideremos um conjunto de estados que representa o *ensemble*; tais estados são denotados por $|\psi^i\rangle$, $i = 1, 2, \dots$, onde cada um deles satisfaz a equação de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi^i(t)\rangle = H |\psi^i(t)\rangle. \quad (2.1.2)$$

O valor esperado de um observável O no estado $|\psi_i\rangle$ é dado por

$$\langle O \rangle^i = \langle \psi^i | O | \psi^i \rangle, \quad (2.1.3)$$

com $\langle \psi^i | \psi^i \rangle = 1$. Podemos nos perguntar qual o valor médio de O , obtido quando um número grande de medidas tenha sido realizado. A resposta é dada pela média sobre o *ensemble* do observável O , que é definida por

$$\langle O \rangle = \sum_i \omega_i \langle O \rangle^i = \sum_i \omega_i \langle \psi^i | O | \psi^i \rangle, \quad (2.1.4)$$

¹Mencionado na literatura pelo próprio Landau em L. D. Landau, Zeits. für Physik, (1927)

onde ω_i é o peso estatístico para cada estado quântico $|\psi_i\rangle$ do *ensemble*, com a condição de normalização $\sum_i \omega_i = 1$. Sendo $\{|o'\rangle\}$ o conjunto de autovetores do operador O , podemos escrever a (2.1.4) da seguinte maneira:

$$\langle O \rangle = \sum_i \sum_{o'} \omega_i |\langle o' | \psi^i \rangle|^2 o'. \quad (2.1.5)$$

Lembramos que $\langle \psi^i | O | \psi^i \rangle$ é o valor esperado usual de O na mecânica quântica, avaliado em relação a um estado $|\psi^i\rangle$. A equação (2.1.5) nos informa que estes valores esperados precisam ser ponderados pelas correspondentes populações fracionárias ω_i . Notamos que os conceitos probabilísticos aparecem duas vezes: primeiro, em $|\langle o' | \psi^i \rangle|^2$ para a probabilidade quântica de um estado $|\psi_i\rangle$ ser encontrado em um autoestado $|o'\rangle$ de O e, segundo, no fator de probabilidade ω_i de encontrarmos no *ensemble* um estado quântico caracterizado por $|\psi^i\rangle$. Podemos agora reescrever a média sobre o *ensemble* (2.1.5) usando uma base $\{|n\rangle\}$ mais geral do espaço de Hilbert, isto é:

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \sum_i \omega_i \sum_n \sum_m \langle \psi^i | n \rangle \langle n | O | m \rangle \langle m | \psi^i \rangle \\ &= \sum_n \sum_m \left(\sum_i \omega_i \langle m | \psi^i \rangle \langle \psi^i | n \rangle \right) \langle n | O | m \rangle. \end{aligned} \quad (2.1.6)$$

O número de termos na soma dos $n(m)$ é simplesmente a dimensionalidade do espaço de *kets*, ao passo que o número de termos na soma em i depende de como o *ensemble* misto é visto em termos de uma mistura de *ensembles* puros. A equação (2.1.6) nos leva a definir o operador densidade ρ da seguinte forma:

$$\rho \equiv \sum_i \omega_i |\psi^i\rangle \langle \psi^i|. \quad (2.1.7)$$

Os elementos da matriz densidade correspondente têm a seguinte forma:

$$\rho_{mn} = \langle m | \rho | n \rangle = \sum_i \omega_i \langle m | \psi^i \rangle \langle \psi^i | n \rangle. \quad (2.1.8)$$

O operador densidade contém toda a informação fisicamente relevante que podemos possivelmente obter a respeito do *ensemble*. Da equação (2.1.6), podemos concluir que a média sobre o *ensemble* pode ser escrita como

$$\langle O \rangle = \sum_n \sum_m \langle m | \rho | n \rangle \langle n | O | m \rangle = \text{tr}(\rho O) = \text{tr}(O\rho). \quad (2.1.9)$$

Sendo o traço independente da representação da matriz, temos que $\text{tr}(\rho O)$ pode ser calculado usando qualquer base conveniente. Assim, como consequência, temos que a expressão (2.1.9)

é extremamente poderosa. Existem duas propriedades do operador densidade que vale a pena salientar. Primeiramente, o operador densidade é hermitiano, como pode ser visto por (2.1.7). Em segundo lugar, o operador densidade satisfaz a condição de normalização. Em resumo, temos:

$$\rho^\dagger = \rho \quad e \quad \text{tr} \rho = 1. \quad (2.1.10)$$

Um *ensemble* puro é especificado por $\omega_i = 1$ para algum $|\psi^i\rangle$ - com $i = n$, por exemplo, e $\omega_i = 0$ para todos os outros *kets* de estado concebíveis, de tal modo que o operador densidade, a ele correspondente, é dado por $\rho = |\psi^n\rangle\langle\psi^n|$ sem a somatória. Nesse caso, o operador densidade é idempotente, ou seja, $\rho^2 = \rho$. Portanto, somente para um *ensemble* puro nós temos $\text{tr}(\rho^2) = \text{tr}(\rho) = 1$. Agora, o que podemos perguntar sobre a evolução temporal dos *ensembles*, ou seja, como o operador densidade ρ varia com o tempo? Suponhamos que, para um certo tempo t_0 , o operador densidade seja dado por

$$\rho(t_0) = \sum_i \omega_i |\psi^i\rangle\langle\psi^i|. \quad (2.1.11)$$

Se temos o poder de não perturbar o *ensemble*, deixando-o com a mesma distribuição de estados, não podemos mudar o peso estatístico ω_i . Assim, supondo que a mudança de ρ é governada unicamente pela evolução temporal dos *kets* de estado $|\psi^i\rangle$, temos que:

$$t_0, |\psi^i\rangle \rightarrow t, |\psi^i, t_0; t\rangle. \quad (2.1.12)$$

Porém, o estado $|\psi^i, t_0; t\rangle$ satisfaz a equação de Schrödinger e, assim, tomando a derivada temporal de $\rho(t)$ podemos deduzir que

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\rho(t) &= \sum_i \omega_i \left[(i\hbar\partial_t |\psi^i\rangle) \langle\psi^i| + |\psi^i\rangle (\langle\psi^i| i\hbar\partial_t) \right] \\ &= \sum_i \omega_i \left[(H |\psi^i\rangle) \langle\psi^i| - |\psi^i\rangle (\langle\psi^i| H) \right] \\ &= H\rho(t) - \rho(t)H. \end{aligned} \quad (2.1.13)$$

Portanto,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho(t) = [H, \rho(t)], \quad (2.1.14)$$

essa é a **equação diferencial de Liouville-von Neumann**, que é de fundamental importância em cálculos de sistemas quânticos dinâmicos. Essa equação nos faz lembrar a equação de movimento de Heisenberg para um observável com o sinal trocado! Contudo, isso não é incoerente, pois

ρ não é observável dinâmico na formulação de Heisenberg. Como vimos, ρ é construído a partir de *kets* e *bras* de estado da descrição de Schrödinger, que evoluem segundo a equação de Schrödinger. A equação de Liouville-von Neumann pode ser escrita na seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = L\rho(t), \quad (2.1.15)$$

onde $L = [H, \cdot]$ é o **operador de Liouville**. A solução formal dessa equação é dada por

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)L} \rho(t_0). \quad (2.1.16)$$

Um aspecto importante da matriz densidade é quando temos um *ensemble* puro, isto é, quando temos $\omega_i = \delta_{i,r}$ na equação (2.1.7). Neste caso, obtemos $\rho = \sum_i \omega_i |\psi^i\rangle\langle\psi^i| = |\psi^r\rangle\langle\psi^r|$ que é o **operador projeção** para o estado $|\psi^r\rangle$. Para esse estado puro, temos

$$\langle O \rangle = \text{tr}(\rho O) = \langle \psi^r | O | \psi^r \rangle \quad (2.1.17)$$

que é a definição do valor esperado de um observável associado ao operador O , como era de se imaginar. Portanto, a equação de Liouville-von Neumann fornece as mesmas informações da equação de Schrödinger. Neste caso, $\rho(t)$ descreve um **estado puro**. Para um *ensemble* não trivial, $\rho(t)$ descreve um **estado de mistura**. Notamos que a equação (2.1.14) pode ser tomada como o análogo quântico de teorema de Liouville da mecânica estatística clássica

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho_{clássica} = - [\rho_{clássica}, H]_{clássica} = - \{ \rho_{clássica}, H \}, \quad (2.1.18)$$

onde $\rho_{clássica}$ representa a densidade de pontos representativos no espaço de fase. Lembramos que um estado clássico puro é aquele representado por um único ponto movendo-se no espaço de fase $(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n)$ para cada instante de tempo. Por outro lado, um estado estatístico clássico é descrito pela função densidade $\rho_{clássica}(q_1, \dots, q_n, p_1, \dots, p_n, t)$ não negativa, de tal modo que a probabilidade do sistema se encontrar no intervalo dq_1, \dots, dp_n , no instante de tempo t , é dada por $\rho_{clássica} dq_1, \dots, dp_n$. O análogo clássico para a média sobre o *ensemble* de um observável O , Eq. (2.1.9), é dado por

$$O_{médio} = \frac{\int \rho_{clássica} O(q, p) d\Gamma_{q,p}}{\int \rho_{clássica} d\Gamma_{q,p}}, \quad (2.1.19)$$

onde $\Gamma_{q,p}$ representa o elemento de volume no espaço de fase. Portanto, o nome **operador densidade** dado para ρ , Eq.(2.1.7), é bastante apropriado.

Na próxima seção, mostraremos que a partir de ρ é possível introduzir a **formulação de Weyl-Wigner da Mecânica Quântica no espaço de fase** e definir a função de Wigner. Essa função pode ser vista como uma transformada de Fourier dos elementos da matriz densidade.

2.2 Definição da Função de Wigner

Primeiramente vamos caracterizar a cinemática quântica do sistema físico constituído de uma única partícula de massa m em um movimento unidimensional. Sejam Q e P os respectivos operadores posição e *momentum*, e consideremos que o sistema seja destituído de *spin*. A caracterização se dá por intermédio das relações de comutação associadas ao conjunto de operadores $\{Q, P, 1\}$, ou seja,

$$[Q, Q] = [P, P] = [Q, 1] = [P, 1] = 0 \quad e \quad [Q, P] = i\hbar 1. \quad (2.2.1)$$

Assim, esses operadores obedecem à **álgebra de Weyl-Heisenberg**, onde seus correspondentes autovetores são definidos pelas seguintes equações de autovalores

$$P | p \rangle = p | p \rangle, \quad Q | q \rangle = q | q \rangle, \quad 1 | p \rangle = | p \rangle, \quad 1 | q \rangle = | q \rangle. \quad (2.2.2)$$

Os autovetores de posição $\{| q \rangle\}$ geram o espaço de *kets* da mesma maneira que os autovetores de *momentum* $\{| p \rangle\}$, isto é, as bases $\{| q \rangle\}$ e $\{| p \rangle\}$ satisfazem as relações de completeza e ortogonalização as quais são dadas, respectivamente, por²

$$\int | q \rangle \langle q | dq = 1, \quad \int | p \rangle \langle p | dp = 1, \quad (2.2.3)$$

e

$$\langle q | q' \rangle = \delta(q - q'), \quad \langle p | p' \rangle = \delta(p - p'), \quad (2.2.4)$$

onde $\delta(z)$ é a função delta de Dirac. Além disso, também conhecemos o produto escalar dado por

$$\langle q | p \rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pq\right). \quad (2.2.5)$$

Essa expressão nos permite conectar os diferentes espaços dos *kets* $| p \rangle$ e $| q \rangle$ mediante a transformada de Fourier

$$| p \rangle = \int \frac{dq}{(2\pi\hbar)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pq\right) | q \rangle. \quad (2.2.6)$$

Assim, qualquer estado do sistema mencionado pode ser representado como uma combinação linear desses *kets*. De posse dessas informações (e só essas) podemos começar então a descrever a formulação de Weyl-Wigner da Mecânica Quântica no espaço de fase. Utilizando as relações

²As integrais apresentadas aqui são avaliadas entre $-\infty$ e $+\infty$.

de completeza (2.2.3) e o produto escalar (2.2.5) podemos escrever a seguinte identidade para um operador arbitrário O , o qual atua nos vetores de estado do espaço de Hilbert:

$$\begin{aligned} O &\equiv \int dp' dp'' dq' dq'' |q''\rangle \langle q''| p''\rangle \langle p''| O | p'\rangle \langle p'| q'\rangle \langle q'| | \\ &= \int \frac{dp' dp'' dq' dq''}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}(p''q'' - p'q')\right] \langle p''| O | p'\rangle |q''\rangle \langle q'|. \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

Essa identidade pode ser escrita de uma maneira mais conveniente, por meio da transformação de variáveis,

$$\begin{pmatrix} 2p \\ u \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p' \\ p'' \end{pmatrix} \quad (2.2.8)$$

e

$$\begin{pmatrix} 2q \\ v \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q' \\ q'' \end{pmatrix}. \quad (2.2.9)$$

Sendo o Jacobiano da transformação igual a 1(um), temos $dp' dp'' dq' dq'' = dp dq du dv$; então, a identidade (2.2.7) torna-se:

$$O = \int \frac{dq dp}{2\pi\hbar} o_W(q, p) \Delta(q, p), \quad (2.2.10)$$

onde a função $o_W(q, p)$ é denominada **transformada de Weyl** do operador O com respeito aos operadores de *momentum* P e posição Q , a qual é dada por [153, 105]

$$o_W(q, p) = \int du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \left\langle p + \frac{u}{2} \middle| O \middle| p - \frac{u}{2} \right\rangle, \quad (2.2.11)$$

e $\Delta(q, p)$ representa uma base de operadores no espaço de fase e cuja expressão tem a seguinte forma:

$$\Delta(q, p) = \int dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \left| q + \frac{v}{2} \right\rangle \left\langle q - \frac{v}{2} \middle|. \quad (2.2.12)$$

Observe que, se o operador O for hermitiano, então a função $o_W(q, p)$ é uma função real. Note também que $\Delta(q, p)$ é um operador hermitiano. A Eq.(2.2.10) é a representação integral do operador O e pode ser interpretada como sendo a decomposição do operador O em uma base de operadores, sendo $\Delta(q, p)$ os elementos dessa base. Além disso, vemos de Eq. (2.2.10) que se for conhecida a transformada de Weyl de um dado operador, este pode ser automaticamente determinado e, ao contrário, ou seja, se for conhecido o operador O , a correspondente transformada de Weyl é obtida por meio de Eq.(2.2.10). Existem outras bases estudadas na literatura que apresentam diferentes virtudes para o mapeamento e que podem ser discutidas de maneira análoga de como fizemos aqui;

um estudo detalhado dessas bases é apresentado na referência [11], no qual é feita uma comparação entre as bases. O procedimento matemático apresentado nesta seção para mapear o operador O não é único, ou seja, na expressão (2.2.7) pode-se trocar as posições em que são aplicadas as relações de completeza, ou melhor, pode-se trocar os símbolos q por p e vice-versa, e dar um tratamento algébrico semelhante ao apresentado aqui. Assim, obtemos uma outra representação integral equivalente à Eq.(2.2.10), onde o_W e Δ podem ser expressos nas seguintes formas

$$o_W(q, p) = \int dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \left\langle q + \frac{v}{2} \middle| O \middle| q - \frac{v}{2} \right\rangle \quad (2.2.13)$$

e

$$\Delta(q, p) = \int du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \left| q + \frac{u}{2} \right\rangle \left\langle p - \frac{u}{2} \right|. \quad (2.2.14)$$

O conjunto de Eqs.(2.2.11)-(2.2.14) permite demonstrar que os projetores de posição e *momentum* podem ser escritos, respectivamente, como

$$|q\rangle\langle q| = \int \frac{du}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}u(q-Q)\right] = \delta(q-Q), \quad (2.2.15)$$

$$|p\rangle\langle p| = \int \frac{dv}{2\pi\hbar} \exp\left[\frac{i}{\hbar}v(p-P)\right] = \delta(p-P). \quad (2.2.16)$$

Vemos que as integrações nas variáveis u e v nos levam a obter distribuições delta de Dirac formais, cujo significado está associado com a ação da distribuição delta de Dirac e a substituição do argumento por um operador, não uma variável. Finalmente, de posse desses resultados e usando a **relação de Baker-Hausdorff**³, temos que a forma simétrica para Δ é dada por

$$\Delta(q, p) = \int \frac{du dv}{2\pi\hbar} \exp\left\{\frac{i}{\hbar}[u(q-Q) + v(p-P)]\right\}. \quad (2.2.17)$$

Portanto, torna-se fácil verificar que a transformada de Weyl admite a forma compacta[68, 117]

$$o_W(q, p) = tr [O\Delta(q, p)]. \quad (2.2.18)$$

Esse formalismo foi introduzido por Weyl-Wigner, a função de Wigner é um caso particular desse formalismo. De fato, ao considerarmos $O = \rho$, obtemos formalmente a definição da função

³Se A e B são dois operadores que não comutam e satisfazem as condições $[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$, então $e^{A+B} = e^A e^B e^{-\frac{1}{2}[A, B]}$. Esse resultado é uma forma simplificada da **fórmula de Baker-Campbell-Hausdorff** que é dada por $e^{A+B} = e^{A+B+\frac{1}{2}[A, B]+\frac{1}{2}[A, [A, B]]+\frac{1}{2}[B, [B, A]]+\dots}$. A série dentro da exponencial no lado direito da última equação é um tanto complexa, mas envolve apenas comutadores múltiplos de A e B .

de Wigner[68]

$$f_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \rho_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int dv \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle, \quad (2.2.19)$$

ou ainda

$$f_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \rho_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \int du \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \left\langle p + \frac{u}{2} \middle| \rho \middle| p - \frac{u}{2} \right\rangle. \quad (2.2.20)$$

Como vimos, o operador densidade ρ , associado ao sistema físico, pode descrever estados puros e misturas. Se considerarmos o sistema quântico descrito por um estado puro, de tal modo que $\rho = |\Psi\rangle\langle\Psi|$, a função de Wigner pode ser escrita da seguinte maneira

$$\begin{aligned} f_W(q, p) &= \int \frac{dv}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \Psi\left(q - \frac{v}{2}\right) \Psi^*\left(q + \frac{v}{2}\right) \\ &= \int \frac{du}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \Phi\left(p + \frac{u}{2}\right) \Phi^*\left(p - \frac{u}{2}\right). \end{aligned} \quad (2.2.21)$$

Apresentaremos na subseção adiante algumas propriedades da função de Wigner[2, 6, 128] e com essas vamos estabelecer o seu significado físico.

2.2.1 Propriedades da Função de Wigner

• **Propriedade 2.2.1** A densidade de probabilidade para encontrar uma partícula entre as posições q e $q + dq$ é dada por

$$|\Psi(q)|^2 = \int f_W(q, p) dp = \langle q | \rho | q \rangle. \quad (2.2.22)$$

Demonstração. Introduzindo (2.2.19) em (2.2.22) e integrando na variável p , temos

$$\begin{aligned} \int f_W(q, p) dp &= \int \frac{dpdv}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle \\ &= \int dv \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle \left(\int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \right) \\ &= \int dv \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle \delta(v), \end{aligned}$$

onde $\delta(v)$ representa o delta de Dirac. Utilizando a propriedade da distribuição delta de Dirac, isto é, $\int f(x) \delta(x) dx = f(0)$, obtemos

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

como queríamos demonstrar. □

• **Propriedade 2.2.2** Analogamente, a densidade de probabilidade para encontrar uma partícula com os *momenta* entre p e $p + dp$, é dada por

$$|\Phi(p)|^2 = \int f_W(q, p) dq = \langle p | \rho | p \rangle. \quad (2.2.23)$$

Demonstração. De modo similar à anterior, substituindo (2.2.20) em (2.2.23), integrando na variável q e utilizando a propriedade da distribuição delta de Dirac, temos

$$\begin{aligned} \int f_W(q, p) dq &= \int \frac{dq du}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \left\langle p + \frac{u}{2} \middle| \rho \middle| p - \frac{u}{2} \right\rangle \\ &= \int du \left\langle p + \frac{u}{2} \middle| \rho \middle| p - \frac{u}{2} \right\rangle \left(\int \frac{dq}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}qu\right) \right) \\ &= \int \left\langle p + \frac{u}{2} \middle| \rho \middle| p - \frac{u}{2} \right\rangle \delta(u) du \\ &= \langle p | \rho | p \rangle = |\Phi(p)|^2, \end{aligned}$$

como queríamos demonstrar. □

• **Propriedade 2.2.3** A função de Wigner satisfaz a condição de normalização, isto é

$$\int f_W(q, p) dq dp = \text{tr} \rho = 1. \quad (2.2.24)$$

Demonstração. Primeiramente, introduzindo (2.2.19) em (2.2.24) e integrando na variável p , temos

$$\begin{aligned} \int f_W(q, p) dq dp &= \int \frac{dq dp dv}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle \\ &= \int dq dv \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle \left(\int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pv\right) \right) \\ &= \int dq dv \left\langle q - \frac{v}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{v}{2} \right\rangle \delta(v) \end{aligned}$$

onde, mais uma vez, $\delta(v)$ é a distribuição delta de Dirac. Integrando em dv e depois em dq , obtemos

$$\int f_W(q, p) dq dp = \int dq \langle q | \rho | q \rangle = \text{tr} \rho = 1,$$

como queríamos demonstrar. □

• **Propriedade 2.2.4** A função de Wigner não é positiva definida, ou seja, pode assumir valores positivos e negativos.

Demonstração. Considere que $f_{W_\varphi}(q, p)$ e $f_{W_\phi}(q, p)$ sejam duas funções de Wigner associadas, respectivamente, aos estados $|\varphi\rangle$ e $|\phi\rangle$; então

$$|\langle\varphi|\phi\rangle|^2 = \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} f_{W_\varphi} f_{W_\phi}. \quad (2.2.25)$$

Temos que o lado esquerdo dessa expressão é:

$$|\langle\varphi|\phi\rangle|^2 \geq 0,$$

em que a igualdade ocorre quando os *kets* forem ortogonais. Nesse caso, temos como consequência que a integral de $f_{W_\varphi} f_{W_\phi}$ é nula. Como f_{W_φ} e f_{W_ϕ} não são necessariamente nulas, conclui-se que: f_{W_φ} e f_{W_ϕ} podem assumir valores negativos e positivos, de tal modo a anular o lado direito da referida expressão. \square

• **Propriedade 2.2.5** A função de Wigner satisfaz a seguinte desigualdade:

$$|f_W(q, p)| \leq \frac{2}{h}. \quad (2.2.26)$$

Demonstração. Esta propriedade decorre da desigualdade de Cauchy-Schwarz, isto é,

$$|f_W(q, p)|^2 \leq \int \frac{dv}{2\pi\hbar} \left| \Psi\left(q - \frac{v}{2}\right) \right|^2 \int \frac{du}{2\pi\hbar} \left| \Psi\left(q + \frac{u}{2}\right) \right|^2 = \frac{1}{(\pi\hbar)^2},$$

e, sendo $\hbar = \frac{h}{2\pi}$, obtemos a desigualdade (2.2.26). \square

A expressão (2.2.26) implica que a função de Wigner é diferente de zero numa região cuja área do espaço do espaço de fase é menor ou igual a $\frac{h}{2}$ [135]. Consequentemente, tal função traz embutida a informação básica do princípio de incerteza, e não pode ser localizada tanto em p como em q , como ocorre no caso clássico. Assim, podemos concluir que as distribuições delta de Dirac são descartadas nesse contexto. De fato, este espaço de fase não é somente uma outra representação do espaço de fase clássico, mas sim um representante legítimo de um espaço de estados com sua estrutura "celulada" devido ao princípio de incerteza. Contudo, por algum processo, pode-se procurar obter um limite tal que recupera-se daí o espaço clássico[68, 117]. Como qualquer distribuição de probabilidade deve ser positiva, temos que a função de Wigner não representa uma distribuição de probabilidade no espaço de fase, sendo, devido às Propriedades 1 a 3, denominada de **quasi densidade de probabilidade**. No caso em que a função de Wigner tenha uma parte

negativa, essa parte pode ser interpretada como indicador da natureza quântica do sistema físico, ou seja, podemos definir o indicador de negatividade da seguinte forma[98]

$$\begin{aligned}\eta(\varphi) &= \int [|f_{W_\varphi}(q, p)| - f_{W_\varphi}(q, p)] dqdp \\ &= \int |f_{W_\varphi}(q, p)| dqdp - 1.\end{aligned}\tag{2.2.27}$$

Esse indicador representa a integral do dobro do volume da parte negativa da função de Wigner. Esse parâmetro η caracteriza as propriedades do estado sob consideração e é usado para descrever os efeitos de interferência. Ele determina o afastamento do comportamento clássico do estado[98, 135].

2.3 Propriedades dos Operadores na Descrição de Wigner

Tal como definimos a transformada de Weyl de um operador, equações (2.2.11) e (2.2.13), temos por analogia que: no formalismo de Wigner qualquer operador quântico O , definido no espaço de Hilbert \mathbb{H} , pode ser associado a uma função no espaço de fase Γ . Considere um operador $O = O(Q, P)$, tal que Q e P são os operadores de posição e *momentum*, respectivamente. Então existe uma aplicação

$$\Omega_W : O(Q, P) \rightarrow o_w(q, p)$$

dada por

$$o_w(q, p) = \int dz \exp\left(\frac{i}{\hbar}pz\right) \left\langle q - \frac{z}{2} \middle| O(Q, P) \middle| q + \frac{z}{2} \right\rangle\tag{2.3.1}$$

ou

$$o_w(q, p) = \int dk \exp\left(\frac{i}{\hbar}qk\right) \left\langle p + \frac{k}{2} \middle| O(Q, P) \middle| p - \frac{k}{2} \right\rangle.\tag{2.3.2}$$

Vamos chamar o conjunto de operadores expressos dessa forma de descrição de Wigner. Com estas definições podemos escrever o valor esperado de um observável, O , em um estado $|\psi\rangle$ da seguinte forma:

$$\langle O \rangle = \langle \psi | O | \psi \rangle = \int dqdp o_w(q, p) f_W(q, p) = tr(\rho O).\tag{2.3.3}$$

Demonstração. Substituindo as expressões para o_w e f_W , ou seja, as Eqs. (2.3.1) e (2.2.19) na (2.3.3), temos

$$\langle O \rangle = \int \frac{dqdpdz'dz''}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar}pz'\right) \left\langle q - \frac{z'}{2} \middle| O(Q, P) \middle| q + \frac{z'}{2} \right\rangle \exp\left(\frac{i}{\hbar}pz''\right) \left\langle q - \frac{z''}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{z''}{2} \right\rangle.$$

Integrando na variável p , obtemos

$$\begin{aligned}
\langle O \rangle &= \int dqdz' dz'' \left\langle q - \frac{z'}{2} \middle| O(Q, P) \middle| q + \frac{z'}{2} \right\rangle \left\langle q - \frac{z''}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{z''}{2} \right\rangle \left(\int \frac{dp}{2\pi\hbar} \exp\left(\frac{i}{\hbar} p(z' + z'')\right) \right) \\
&= \int dqdz' dz'' \left\langle q - \frac{z'}{2} \middle| O(Q, P) \middle| q + \frac{z'}{2} \right\rangle \left\langle q - \frac{z''}{2} \middle| \rho \middle| q + \frac{z''}{2} \right\rangle \delta(z' + z'') \\
&= \int dqdz' \left\langle q - \frac{z'}{2} \middle| O(Q, P) \middle| q + \frac{z'}{2} \right\rangle \left\langle q + \frac{z'}{2} \middle| \rho \middle| q - \frac{z'}{2} \right\rangle,
\end{aligned}$$

onde usamos as propriedades da distribuição delta de Dirac. Fazendo a mudança de variáveis

$$\begin{pmatrix} \bar{q} \\ \bar{z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{2} \\ 1 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q \\ z \end{pmatrix},$$

obtemos

$$\langle O \rangle = \int d\bar{q}d\bar{z} \langle \bar{q} \middle| O(Q, P) \middle| \bar{z} \rangle \langle \bar{z} \middle| \rho \middle| \bar{q} \rangle = \text{tr}(\rho O) = \langle O \rangle,$$

como queríamos demonstrar. □

Outras propriedades que os operadores na descrição de Wigner satisfazem e que podem ser demonstradas, são as seguintes:

- $\int dq o_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \langle p \middle| O \middle| p \rangle.$
- $\int dp o_W(q, p) = (2\pi\hbar)^{-1} \langle q \middle| O \middle| q \rangle.$
- $\text{tr}(O) = \int dqdp o_W(q, p).$
- Se $O = O(P)$, então $o_W = O(p).$
- Se $O = O(Q)$, então $o_W = O(q).$
- Se $O = \text{constante}$, então $o_W = O.$

2.3.1 Produto de Operadores Quânticos na Descrição de Wigner

As expressões analíticas para a transformada de Weyl de um produto de dois operadores quânticos, $A(Q, P)B(Q, P) = AB$, e suas relações de comutação e anticomutação são estabelecidas a partir das propriedades da aplicação $\Omega_W : AB \rightarrow (AB)_W$, que nos conduz a[128, 117]:

$$(AB)_W = a_W(q, p) \exp\left(\frac{i\hbar \overleftarrow{\Lambda}}{2}\right) b_W(q, p) = b_W(q, p) \exp\left(\frac{-i\hbar \overleftarrow{\Lambda}}{2}\right) a_W(q, p), \quad (2.3.4)$$

onde Λ é dado por

$$\overleftarrow{\Lambda} = \frac{\overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial}}{\partial q \partial p} - \frac{\overleftarrow{\partial} \overrightarrow{\partial}}{\partial p \partial q}. \quad (2.3.5)$$

Defini-se, então, a operação chamada **produto estrela** ou **produto de Weyl** como

$$(AB)_W = a_W(q, p) \exp\left(\frac{i\hbar \overleftarrow{\Lambda}}{2}\right) b_W(q, p) \equiv a_W(q, p) \star b_W(q, p), \quad (2.3.6)$$

cujos símbolo \star foi introduzido por Groenwold[81]. Esse resultado nos leva a observar que a transformada de Weyl do produto de operadores AB não é igual ao produto das transformadas $a_W b_W$, mas sim uma função mais complicada que depende de todas as ordem em \hbar do operador pseudo-diferencial localizado entre as funções $a_W(q, p)$ e $b_W(q, p)$. O operador \star representa uma deformação pseudo-diferencial associativa do produto ordinário $a_W(q, p)b_W(q, p)$. De fato, o produto estrela pode ser expandido em uma série de potências em \hbar , onde o termo independente tem um vínculo com a função clássica correspondente; isso será visto adiante. Assim, o produto estrela induz uma geometria não-comutativa e relaciona o formalismo proposto por Wigner com o formalismo de quantização proposto por Weyl[6, 117].

Concluindo esta seção notamos que o operador \star , Eq.(2.3.6), pode ser apresentado sob uma forma em que os operadores diferenciais atuam somente à direita. Explicitamente, sejam f e g funções que dependem das variáveis q e p , e colocando $\partial_q := \frac{\partial}{\partial q}$ e $\partial_p := \frac{\partial}{\partial p}$, temos que

$$f(q, p) \star g(q, p) = \sum_{m, n=0}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{m+n} \frac{(-1)^m}{m! n!} \left(\partial_p^m \partial_q^n f\right) \left(\partial_p^n \partial_q^m g\right), \quad (2.3.7)$$

que é entendido como uma série de potências com respeito à variável \hbar . O produto estrela possui várias propriedades[6, 128]; entre elas apresentaremos na sequência as mais importantes.

- **Propriedade 2.3.1** Seja a função $f(q, p) = \text{constante} = c$, $c \in \mathbb{C}$. Então

$$c \star f(q, p) = f(q, p) \star c = cf(q, p). \quad (2.3.8)$$

Demonstração. Expandindo o produto estrela em série de potências, obtemos

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

Os operadores diferenciais que atuam no sentido da esquerda, atuarão em uma função constante c e, portanto, se anularão, restando somente o termo independente de \hbar , ou seja, $cf(q, p)$. O mesmo ocorre se c estiver do lado direito do produto estrela. \square

• **Propriedade 2.3.2** O produto estrela é anti-comutativo, ou seja,

$$f(q, p) \star g(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p). \quad (2.3.9)$$

Demonstração. Notando que quando trocamos as posições das funções o sinal da exponencial muda, isto é,

$$f(q, p) \star g(q, p) = f(q, p) e^{+\frac{i\hbar\Lambda}{2}} g(q, p) = g(q, p) e^{-\frac{i\hbar\Lambda}{2}} f(q, p) \neq g(q, p) \star f(q, p).$$

\square

Essa é uma propriedade básica em geometrias não-comutativas.

• **Propriedade 2.3.3** O princípio da correspondência: para toda $f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$, temos

$$f(q, p) \star g(q, p) = fg + \frac{i\hbar}{2} \{f, g\} + O(\hbar^2), \quad \hbar \rightarrow 0, \quad (2.3.10)$$

onde $\{f, g\} := \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial g}{\partial q} \frac{\partial f}{\partial p}$ é o parênteses de Poisson.

Demonstração. Isso é uma consequência direta da expressão (2.3.7). \square

Portanto, o produto estrela $f \star g$ representa uma deformação do produto clássico fg . Essa deformação depende da constante de Planck \hbar . Fisicamente, a diferença $f \star g - fg$ descreve as flutuações quânticas as quais dependem de \hbar . Para o caso particular em que escolhermos $f(q, p) := q$ e $g(q, p) := p$, temos os seguintes resultados:

$$q \star p = \left(q + \frac{i\hbar}{2} \partial_p \right) p = qp + \frac{i\hbar}{2}, \quad (2.3.11)$$

$$p \star q = \left(p - \frac{i\hbar}{2} \partial_q \right) q = pq - \frac{i\hbar}{2} \quad (2.3.12)$$

e, portanto,

$$q \star p - p \star q = qp - pq + i\hbar = i\hbar. \quad (2.3.13)$$

Essa regra de comutação corresponde à relação de comutação de Born-Heisenberg-Jordan $QP - PQ = i\hbar I$ (na formulação teórica de operadores da mecânica quântica nos espaços de Hilbert).

• **Propriedade 2.3.4** O produto estrela, realizado entre duas c-funções no espaço de fase, transforma uma delas em operador, isto é

$$\begin{aligned} f(q, p) \star g(q, p) &= f\left(q + \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_p, p - \frac{i\hbar}{2} \overrightarrow{\partial}_q\right) g(q, p) \\ &= f(q, p) g\left(q - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p, p + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q\right). \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Demonstração. Considere $a \doteq \overrightarrow{\partial}_p$ e $b \doteq \overrightarrow{\partial}_q$, então

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

Lembrando que $e^{a\partial_x} f(x) = f(x + a)$, obtemos

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

De modo análogo podemos demonstrar a segunda igualdade da Eq.(2.3.1). □

Então, podemos definir o operador \hat{f} no espaço de fase por

$$\hat{f} := f(q, p) \star. \quad (2.3.15)$$

• **Propriedade 2.3.5** A conjugação complexa do produto estrela de duas c-funções no espaço de fase inverte a ordem do produto, isto é

$$(f \star g)^\dagger = g^\dagger \star f^\dagger. \quad (2.3.16)$$

Demonstração. Considerando a expansão em série de potências (2.3.7) e tomando o seu complexo

conjugado, temos

$$\begin{aligned}
(f(q, p) \star g(q, p))^\dagger &= \sum_{m, n=0}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{m+n} \frac{(-1)^{m+n} (-1)^m}{m! n!} (\partial_p^m \partial_q^n f^\dagger) (\partial_p^n \partial_q^m g^\dagger) \\
&= \sum_{m, n=0}^{\infty} \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^{m+n} \frac{(-1)^n}{n! m!} (\partial_p^n \partial_q^m g^\dagger) (\partial_p^m \partial_q^n f^\dagger) \\
&= g(q, p)^\dagger \star f(q, p)^\dagger,
\end{aligned}$$

□

como queríamos demonstrar.

• **Propriedade 2.3.6** O produto estrela é associativo, isto é, para todas funções $f, g, h \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$, temos

$$(f(q, p) \star g(q, p)) \star h(q, p) = f(q, p) \star (g(q, p) \star h(q, p)). \quad (2.3.17)$$

Demonstração. Considerando a propriedade (2.3.4), temos

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

Por outro lado, vemos que

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

Como os operadores diferenciais aqui considerados são associativos, podemos concluir que o produto estrela também é associativo. □

• **Propriedade 2.3.7** A forma integral do produto estrela é

$$f(q, p) \star g(q, p) = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int e^{\frac{2\varrho i}{\hbar}} f(q', p') g(q'', p'') dq' dp' dq'' dp'', \quad (2.3.18)$$

para todos $q, p \in \mathbb{R}$, onde a função $\varrho = \varrho(q, p, q', p', q'', p'')$ é definida por:

$$\varrho := \det \begin{vmatrix} q & p & 1 \\ q' & p' & 1 \\ q'' & p'' & 1 \end{vmatrix} = q(p' - p'') + p(q'' - q') + (q'p'' - p'q''). \quad (2.3.19)$$

Demonstração. O primeiro passo é escrever a função no espaço de fase na seguinte forma:

$$f(q, p) = \int dq' dp' f(q', p') \delta(q' - q) \delta(p' - p). \quad (2.3.20)$$

Agora, consideremos as representações das deltas de Dirac na forma integral, isto é:

$$\delta(q' - q) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar}u(q'-q)} du \quad (2.3.21)$$

e

$$\delta(p' - p) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int e^{-\frac{i}{\hbar}v(p'-p)} dv. \quad (2.3.22)$$

Substituindo as expressões (2.3.21) e (2.3.22) em (2.3.20), obtemos

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

Utilizando essa última equação e empregando a propriedade (2.3.4), o produto estrela pode ser escrito na seguinte forma

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

Lembrando que

$$e^{\frac{1}{2}(v\partial_q - u\partial_p)} g(q, p) = g\left(q + \frac{v}{2}, p - \frac{u}{2}\right),$$

e com o auxílio da transformação de variáveis

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

obtemos o seguinte resultado

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

Reorganizando essa expressão, temos

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

onde a função ϱ é dada por (2.3.19). Essa expressão é justamente a forma integral do produto estrela. \square

• **Propriedade 2.3.8** A integral do produto estrela entre duas funções $f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$ no espaço de fase apresenta a seguinte propriedade

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dqdp = \int g(q, p) \star f(q, p) dqdp = \int f(q, p) g(q, p) dqdp. \quad (2.3.23)$$

Demonstração. Notamos que ao realizar a integral entre as duas funções ocorre uma trivialização entre esse produto estrela e o produto associativo de funções. Claramente vemos que para que essa propriedade seja satisfeita é necessário a convergência da integral. Essa condição é satisfeita se as funções $f(q, p)$ e $g(q, p)$ se anulam no infinito, ou seja, $f, g \in C^\infty(\mathbb{R}^2)$. O produto estrela pode ser representado na forma integral, de tal forma que podemos escrever o lado direito da Eq.(2.3.23) da seguinte maneira:

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dqdp = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \int e^{\frac{2qi}{\hbar}} f(q', p') g(q'', p'') dqdq'dq''dpdp'dp'',$$

onde ϱ é dado por (2.3.19). Reorganizando os termos dessa equação e usando a forma integral da distribuição delta de Dirac,

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

obtemos

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

Integrando em dq' , temos

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

Mais uma vez, reorganizando os termos e usando a distribuição delta de Dirac, vemos que

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

e integrando na variável p' , obtemos

$$\int f(q, p) \star g(q, p) dqdp = \int f(q'', p'') g(q'', p'') dq''dp''. \quad (2.3.24)$$

Como a variável p'' é muda, obtemos finalmente que:

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

como queríamos demonstrar. \square

2.4 Evolução Temporal da Função de Wigner

A evolução temporal da função de Wigner é uma consequência imediata da equação diferencial de Liouville-von Neumann para o operador densidade, ou seja,

$$i\hbar \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = [H(t), \rho(t)]. \quad (2.4.1)$$

no qual H é o hamiltoniano do sistema. De fato, realizando-se a transformada de Weyl dessa equação, isto é aplicando o operador,

$$(2\pi\hbar)^{-1} \int dz e^{-\frac{i}{\hbar}pz} \left\langle q - \frac{z}{2} \left| \cdot \right| q + \frac{z}{2} \right\rangle, \quad (2.4.2)$$

em ambos lados da Eq.(2.4.1), obtemos

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

Essa equação pode ser reescrita na seguinte forma

$$i\hbar \frac{\partial f_W(q, p, t)}{\partial t} = H_W(q, p, t) \star f_W(q, p, t) - f_W(q, p, t) \star H_W(q, p, t), \quad (2.4.3)$$

onde consideramos a relação (2.3.6). Agora, definindo o **parêntesis de Moyal**[123] de duas funções f e g no espaço de fase como

$$\{f, g\}_M := \frac{1}{i\hbar} (f \star g - g \star f). \quad (2.4.4)$$

Segue que podemos escrever a Eq.(2.4.3) na seguinte maneira

$$\frac{\partial f_W(q, p, t)}{\partial t} = \{H_W, f_W\}_M. \quad (2.4.5)$$

Porém, o parêntesis de Moyal (2.4.4) pode ser também escrito na seguinte forma,

$$\{f(q, p), g(q, p)\}_M = \frac{2}{\hbar} f(q, p) \sin \left[\frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right] g(q, p), \quad (2.4.6)$$

onde utilizamos a relação

$$e^{\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}} - e^{-\frac{i\hbar}{2} \overleftrightarrow{\Lambda}} = 2i \sin \left(\frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right),$$

de tal forma que podemos escrever (2.4.5) como

$$\frac{\partial f_W}{\partial t} = \{H_W, f_W\}_M = \frac{2}{\hbar} H_W \sin \left[\frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right] f_W. \quad (2.4.7)$$

Esta equação da dinâmica quântica no espaço de fase é análoga à equação de Liouville da mecânica estatística clássica, Eq.(2.1.18), onde em vez de termos o parênteses de Poisson, temos o parênteses de Moyal. O estado do sistema é descrito pela função de Wigner f_W . Para resolver essa equação, definimos o **operador Liouvilliano quântico**

$$L(q, p) := \frac{2i}{\hbar} H_W \sin \left[\frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right], \quad (2.4.8)$$

Com essa definição podemos reescrever a Eq.(2.4.7) da seguinte maneira:

$$\frac{\partial}{\partial t} f_W(q, p; t) = -iL(q, p) f_W(q, p; t). \quad (2.4.9)$$

O que nos possibilita encontrar a solução formal dessa equação, que é dada por

$$f_W(q, p; t) = e^{-iL(q, p)(t-t_0)} f_W(q, p; t_0). \quad (2.4.10)$$

Analisando essa solução, notamos que a dependência da função de Wigner em \hbar é proveniente de duas fontes, ou seja, de $f(q, p, t_0)$ e de $L(q, p)$. Vamos, então, investigar o limite $\hbar \rightarrow 0$ do operador Liouvilliano quântico $L(q, p)$. Para tal objetivo, introduzimos um parâmetro adimensional α no Liouvilliano quântico de tal forma que podemos reescrevê-lo da seguinte forma:

$$L_\alpha(q, p) = \frac{2i}{\hbar\alpha} H_W \sin \left(\frac{\hbar\alpha \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} \right).$$

Supondo que a função $H_W(q, p)$ não dependa de \hbar , a expansão em série de potências do operador Liouvilliano é dada por

$$L_\alpha(q, p) = \frac{2i}{\hbar\alpha} H_W(q, p) \left[\frac{\hbar\alpha \overleftrightarrow{\Lambda}}{2} - \frac{1}{3!} \left(\frac{\hbar\alpha}{2} \right)^3 \left(\overleftrightarrow{\Lambda} \right)^3 + \right],$$

o que nos permite realizar o limite $\alpha \rightarrow 0$; assim, temos

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} L_\alpha(q, p) = iH_W(q, p) \overleftrightarrow{\Lambda} = L_0(q, p),$$

onde $L_0(q, p)$ é um operador Liouvilliano, limite de $L_\alpha(q, p)$. Considerando esse procedimento, temos das expressões (2.4.9) e (2.4.10), que:

$$\frac{\partial f_{W_0}}{\partial t} = \frac{\partial H_W}{\partial q} \frac{\partial f_{W_0}}{\partial p} - \frac{\partial H_W}{\partial p} \frac{\partial f_{W_0}}{\partial q} = \{H_w, f_{W_0}\}, \quad (2.4.11)$$

com

$$f_{W_0}(q, p; t) = e^{-iL_0(q,p)(t-t_0)} f_W(q, p; t_0) \quad (2.4.12)$$

e ainda,

$$\dot{p} = -\frac{\partial H_W}{\partial q} \quad e \quad \dot{q} = \frac{\partial H_W}{\partial p}. \quad (2.4.13)$$

Em resumo, a introdução do parâmetro α nos conduz a tratar de forma independente os limites $\hbar \rightarrow 0$ na função de Wigner e na sua evolução temporal[117, 146].

É interessante observar que existem casos em que a transformada de Weyl do operador hamiltoniano, H_W , coincide com a hamiltoniana clássica. Por exemplo, é o que ocorre para sistemas conservativos em que o potencial depende apenas da posição, ou seja, hamiltonianos da forma

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q). \quad (2.4.14)$$

Tal resultado justifica a aplicação do formalismo Weyl-Wigner em estudos de sistemas caóticos semiclássicos[82, 1] e, dizer que essa descrição da Mecânica Quântica é uma deformação da Mecânica Clássica, sendo a **constante de Planck** $\hbar(2\pi\hbar)$ o parâmetro de deformação correspondente.

A Eq.(2.4.7) é também denominada de **equação de Moyal** e nos dá a evolução temporal da função de Wigner. Efetivamente, essa equação é a extensão quântica do teorema de Liouville da Mecânica Clássica para um hamiltoniano clássico $H(q, p)$, isto é $\partial_t f + \{f, H\} = 0$. Concluindo esta seção, notemos que outra forma de escrever a solução da Eq.(2.4.7) é a seguinte:

$$f_W(q, p, t) = e_{\star}^{-\frac{itH(q,p)}{\hbar}} \star f_W(q, p; 0) \star e_{\star}^{\frac{itH(q,p)}{\hbar}} = U_{\star}^{-1}(q, p, t) \star f_W(q, p; 0) \star U_{\star}(q, p, t), \quad (2.4.15)$$

onde U_{\star} é o **operador unitário de evolução-estrela**, que é definido, usando a **exponencial-estrela**, da seguinte forma[88, 16, 17]:

$$U_{\star}(q, p; t) = e_{\star}^{\frac{itH(q,p)}{\hbar}} := 1 + \left(\frac{it}{\hbar}\right) H + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 H \star H + \frac{1}{3!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^3 H \star H \star H + \dots \quad (2.4.16)$$

Para provar que (2.4.15) é solução da equação de Moyal, consideremos primeiro o caso em que temos um intervalo temporal δt , tal que,

$$U_{\star}(\delta t) = 1 + \frac{i\delta t}{\hbar} H \quad (2.4.17)$$

e

$$U_{\star}^{-1}(\delta t) = 1 - \frac{i\delta t}{\hbar} H, \quad (2.4.18)$$

onde desprezamos os termos de segunda ordem em δt . Segue então que

$$U_{\star}^{-1}(\delta t) \star f_W(0) \star U_{\star}(\delta t) = f_W(0) + \frac{i\delta t}{\hbar} (f_W(0) \star H - H \star f_W(0)), \quad (2.4.19)$$

onde, por simplicidade de notação, omitimos a dependência de f_W e H em q e p . Por outro lado, podemos expandir $f_W(\delta t)$ em série de potências em δt até primeira ordem, e com o auxílio da Eq.(2.4.15), obtemos que

$$f_W(\delta t) = f_W(0) + \frac{i\delta t}{\hbar} (f_W(0) \star H - H \star f_W(0)) = U_{\star}^{-1}(\delta t) \star f_W(0) \star U_{\star}(\delta t) \quad (2.4.20)$$

Esse procedimento pode ser repetido N vezes, de tal modo que obtemos

$$f_W(N\delta t) = U_{\star}^{-1}(N\delta t) \star f_W(0) \star U_{\star}(N\delta t), \quad (2.4.21)$$

onde usamos o fato de que $[U_{\star}(\delta t)]^N = U_{\star}(N\delta t)$. Em consequência, tomando o limite $N\delta t \rightarrow t$ quando $N \rightarrow \infty$, a Eq.(2.4.21) transforma-se na Eq.(2.4.15).

2.4.1 Equação-estrela de Autovalores e a Função de Wigner

Notamos que a correspondência entre os observáveis da Mecânica Quântica e suas transformadas de Weyl é de tal forma que o produto de dois operadores hermitianos(observáveis) corresponde ao produto estrela das correspondentes transformadas de Weyl. Como consequência temos que a equação de Moyal (2.4.7) é uma equação formalmente idêntica à equação de Liouville-von Neumann. Podemos, neste contexto, analisar o formalismo de Weyl-Wigner como preservando a estrutura algébrica do formalismo usual da Mecânica Quântica, onde nesse os parênteses de Lie são os comutadores e naquele são os parênteses de Moyal[45]. É conhecido que na formulação convencional da Mecânica Quântica temos a equação de autovalores

$$H\psi(q) = E\psi(q). \quad (2.4.22)$$

A pergunta é: existe uma equação equivalente no formalismo de Weyl-Wigner? A resposta é sim, de fato, existe uma equação-estrela equivalente à equação (2.4.22) da seguinte forma[44, 128]

$$H_W(q, p) \star f_W(q, p) = f_W(q, p) \star H_W(q, p) = E f_W(q, p), \quad (2.4.23)$$

onde E é um autovalor do hamiltoniano H .

Demonstração. Tomemos o hamiltoniano da seguinte forma

$$H(Q, P) = \frac{1}{2m}P^2 + V(Q),$$

e suponhamos que $f_W(q, p)$ seja a função de Wigner associada à autofunção $\psi(q)$ do hamiltoniano H . Assim, a função de Wigner é dada por

$$f_W(q, p) = \int \frac{dz}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}z} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right). \quad (2.4.24)$$

Tomando o produto-estrela entre a função de Wigner e o hamiltoniano na descrição Weyl-Wigner, obtemos

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

Integrando por partes duas vezes essa equação, temos que

$$H_W(q, p) \star f_W(q, p) = \int \frac{dz}{2\pi\hbar} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_z - \frac{1}{2} \partial_q \right)^2 + V\left(q - \frac{z}{2}\right) \right] e^{\frac{ip}{\hbar}z} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right). \quad (2.4.25)$$

Notando que os operadores diferenciais quando aplicados a ψ^\dagger resultam em

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

onde o ponto sobre ψ^\dagger indica a derivada com relação ao argumento. Temos que ψ^\dagger pode passar para o lado esquerdo dos operadores diferenciais. Além disso, podemos escrever a equação de Schrödinger independente do tempo, $H(Q, P)\psi(q) = E\psi(q)$, na seguinte forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\partial_z - \frac{1}{2} \partial_q \right)^2 + V\left(q - \frac{z}{2}\right) \right] \psi\left(q - \frac{z}{2}\right) = E\psi\left(q - \frac{z}{2}\right),$$

onde fizemos a mudança de variáveis $q \rightarrow q - \frac{z}{2}$. Com isso, a Eq.(2.4.25) pode ser escrita da seguinte maneira

$$H_W(q, p) \star f_W(q, p) = E \left\{ \int \frac{dz}{2\pi\hbar} e^{\frac{ip}{\hbar}z} \psi^\dagger\left(q + \frac{z}{2}\right) \psi\left(q - \frac{z}{2}\right) \right\} = E f_W(q, p).$$

Logo, simetricamente, temos

$$f_W(q, p) \star H_W(q, p) = E f_W(q, p) = H_W(q, p) \star f_W(q, p).$$

Em suma, a função de Wigner, $f_W(q, p)$, correspondente a uma autofunção $\psi(q)$ do hamiltoniano $H(Q, P)$, satisfará necessariamente a equação-estrela de autovalor dada pela Eq.(2.4.23) e f_W será uma solução real desta equação. \square

2.4.2 Evolução Temporal do Valor Esperado de um Observável

De interesse para a teoria é encontrar uma expressão associada à derivada temporal do valor esperado de um observável O qualquer; para isto basta recordarmos a Eq.(2.3.3) no caso em que f_W depende explicitamente do tempo. Assim, temos

$$\frac{d}{dt} \langle O \rangle_t = \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} o_W(q, p) \frac{\partial}{\partial t} f_W(q, p; t),$$

onde supomos que o_W não depende explicitamente do tempo. Utilizando a Eq.(2.4.9) e integrando por partes, obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle O \rangle_t &= i \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} f_W(q, p; t) [L(q, p) o_W(q, p)] \\ &= -\frac{2}{\hbar} \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} \left[H_W(q, p) \sin\left(\frac{\hbar \overleftrightarrow{\Lambda}}{2}\right) o_W(q, p) \right] f_W(q, p; t), \end{aligned} \quad (2.4.26)$$

onde assumimos que a função de Wigner se anula nos limites $q(p) \rightarrow \pm\infty$. Em particular, quando os observáveis forem os *momentum* e posição, obtemos que

$$\frac{d}{dt} \langle P \rangle_t = - \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} \frac{\partial H_W}{\partial q} f_W(q, p; t) \quad (2.4.27)$$

e

$$\frac{d}{dt} \langle Q \rangle_t = \int \frac{dqdp}{2\pi\hbar} \frac{\partial H_W}{\partial p} f_W(q, p; t). \quad (2.4.28)$$

Essas duas expressões representam a transformada de Weyl das equações de Ehrenfest da formulação usual da Mecânica Quântica. Notamos que, no limite $\hbar \rightarrow 0$, a função de Wigner é equivalente ao produto de duas distribuições delta de Dirac, ou seja, $\delta(q - q_0) \delta(p - p_0)$ e, assim, as últimas expressões recuperam as formas das equações clássicas de Hamilton para $H_{cl}(q_0, p_0)$,

$$\frac{dp_0}{dt} = -\frac{\partial H_{cl}}{\partial q_0} \quad e \quad \frac{dq_0}{dt} = \frac{\partial H_{cl}}{\partial p_0}. \quad (2.4.29)$$

Até o momento, o nosso estudo sobre a descrição de Weyl-Wigner da Mecânica Quântica foi baseado na **descrição de Schrödinger**, onde os *kets* de estado evoluem no tempo e os operadores(observáveis) são fixos no tempo. Contudo, é possível desenvolver um tratamento análogo ao que foi usado até aqui considerando a **descrição de Heisenberg**, onde os operadores evoluem no tempo e os *kets* permanecem inalterados. Neste procedimento, temos que a **equação de movimento de Heisenberg** para um operador $O(t)$, é dada por

$$i\hbar \frac{\partial O(t)}{\partial t} = [O(t), H(t)]. \quad (2.4.30)$$

Aplicando um procedimento análogo ao que nos conduziu à equação de Liouville-von Neumann na descrição de Weyl-Wigner, isto é, aplicando a transformada de Weyl em ambos lados da equação de Heisenberg[88], encontraremos

$$i\hbar \frac{\partial O_W(q, p, t)}{\partial t} = O_W(q, p, t) \star H_W(q, p, t) - H_W(q, p, t) \star O_W(q, p, t) \quad (2.4.31)$$

e, escrevendo em termos do parênteses de Moyal, obtemos

$$\frac{\partial O_W(q, p, t)}{\partial t} = \{O_W(q, p, t), H_W(q, p, t)\}_M. \quad (2.4.32)$$

Novamente, utilizando a expansão em série de potências para o produto estrela, obtemos no limite quando $\hbar \rightarrow 0$,

$$\dot{q} = \frac{\partial H_W}{\partial p} \quad e \quad \dot{p} = -\frac{\partial H_W}{\partial q}, \quad (2.4.33)$$

que é o limite clássico. Nos casos em que H_W coincide com a hamiltoniana clássica, temos que essas equações coincidem com as equações canônicas da mecânica clássica.

No próximo capítulo, apresentaremos a mecânica quântica no espaço de fase por meio de uma representação unitária do grupo de Galilei compatível com o formalismo de Weyl-Wigner, obteremos a equação de Schrödinger no espaço de fase e introduziremos a noção de quasi-amplitudes no espaço de fase. Em sequência, estenderemos nossa apresentação para representação unitária do grupo de Poincaré.

Capítulo 3

Mecânica Quântica Simplética

Se o universo físico não incorporasse ou refletisse de alguma maneira as formas matemáticas, ele seria simplesmente ininteligível e a física nem mesmo existiria. Portanto, ele de fato incorpora ou reflete formas matemáticas e, na verdade, ele é constituído por essas mesmas formas: por sua "estrutura matemática", precisamente.

Wolfgang Smith

A principal característica do formalismo de Wigner da Mecânica Quântica é que as variáveis dinâmicas são representadas por funções, em vez de operadores. Como vimos, os produtos envolvendo variáveis dinâmicas e transformadas de Weyl dos operadores são deformados segundo as regras do produto estrela. Em outras palavras, o formalismo associa cada operador, A , definido no espaço de Hilbert uma função, $A_W(q, p)$, definida no espaço de fase Γ . Por meio do produto estrela podemos definir um operador estrela $\hat{A} = A_W(q, p) \star$ tal que, atuando em uma função $B_W(q, p)$, resulta em $\hat{A}(B_W) = A_W \star B_W$. Assim, os operadores estrelas das funções no espaço de fase podem ser utilizados para estudar representações unitárias de grupos cinemáticos. Neste capítulo será apresentada uma formulação da Mecânica Quântica no espaço de fase baseada na representação de grupo de simetria. Seguiremos as idéias propostas por Oliveira et al.[128]. Construiremos o espaço de Hilbert com uma estrutura simplética e aliado ao produto estrela. Exporemos as representações unitárias para os grupos de Galilei e Poincaré que serão consideradas para os casos

não relativísticos e relativísticos, respectivamente. Identificaremos os geradores do grupo com os observáveis físicos e dentro desse formalismo obteremos as equações de Schrödinger, Klein-Gordon e Dirac no espaço de fase. Associaremos as soluções destas equações com a função de Wigner via produto estrela. A apresentação é baseada nas seguintes Refs.[2, 5, 6, 41, 99, 120, 128].

3.1 Espaço de Hilbert e a Estrutura Simplética

Seja \mathbb{Q} uma variedade diferencial n -dimensional, onde cada ponto é representado por coordenadas $q = (q^1, \dots, q^n)$. No espaço cotangente, $T^*\mathbb{Q}$, as coordenadas de cada ponto são dadas por $(q, p) = (q^1, \dots, q^n, p_1, \dots, p_n)$. O espaço cotangente pode então ser equipado com uma estrutura simplética, dada pela 2-forma

$$\omega = dp_i \wedge dq^i = dp \wedge dq.$$

Essa 2-forma é conhecida como forma simplética sobre o espaço cotangente $T^*\mathbb{Q}$. Considerando essa forma simplética ω , o operador bidiferencial

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

induz o parênteses de Poisson de duas funções da seguinte maneira

$$\omega \left(f \overleftrightarrow{\Lambda}, g \overleftrightarrow{\Lambda} \right) = f \overleftrightarrow{\Lambda} g = \{f, g\},$$

onde $\{f, g\} := \left(\frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial g}{\partial q} \right)$ e as funções $f = f(q, p)$ e $g = g(q, p)$ são de classes C^∞ . O espaço $T^*\mathbb{Q}$ equipado com ω é denominado espaço de fase Γ . Assim, um campo vetorial em Γ é determinado por

$$f \overleftrightarrow{\Lambda} = X_f = \frac{\partial f}{\partial q} \frac{\partial}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial}{\partial q}.$$

Para associar o espaço de Hilbert com o espaço de fase Γ , consideramos o conjunto de todas as funções complexas de quadrado integrável em Γ , $\{\Psi(q, p; t)\}$, tais que:

$$\int dqdp \Psi^\dagger(q, p; t) \star \Psi(q, p; t) = \int dqdp \Psi^\dagger(q, p; t) \Psi(q, p; t) < \infty. \quad (3.1.1)$$

Esse conjunto de funções satisfaz os axiomas do espaço de Hilbert com o produto interno, definido por meio de:

$$(\Psi_m, \Psi_n)_\Gamma = \int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \star \Psi_n(q, p; t) = \int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \Psi_n(q, p; t), \quad m, n = 0, 1, 2, \dots \quad (3.1.2)$$

Como as funções Ψ_m são de quadrado integrável em Γ , adotaremos que elas satisfazem a condição de normalização

$$\int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \star \Psi_m(q, p; t) = \int dqdp \Psi_m^\dagger(q, p; t) \Psi_m(q, p; t) = 1. \quad (3.1.3)$$

A relação (3.1.1) é uma forma bilinear real. Assim, nesse caso, podemos escrever $\Psi(q, p) = \langle q, p | \Psi \rangle$, com

$$\int dqdp |q, p\rangle \langle q, p| = 1,$$

sendo $\langle \Psi |$ o vetor dual de $| \Psi \rangle$.

A relação (3.1.1), juntamente com (3.1.3), define o espaço de Hilbert sobre o espaço de fase Γ ; tal espaço chamaremos de **espaço de Hilbert simplético** e denotaremos por H_Γ .

3.2 Representação do Grupo de Galilei sobre o Espaço de Hilbert Simplético

O grupo de Galilei[90] é o primeiro de dois grupos de transformações no espaço e tempo que será abordado nesta tese. Este grupo(G) expressa as propriedades de invariância geométrica das equações de movimento de um sistema dinâmico clássico não-relativístico quando o sistema é isolado de influências externas. Se a dinâmica do sistema pode ser transportada via um princípio de ação, de modo que uma descrição lagrangiana e, portanto, uma descrição hamiltoniana seja possível, então o sistema é descrito por uma realização canônica clássica do grupo de Galilei. Lembramos que um elemento no grupo de Galilei pode ser escrito como

$$[b, a_j, v_j, R], \text{ com } j = 1, 2, 3;$$

onde: R denota uma matriz de rotação ortogonal 3×3 , \mathbf{v} é o vetor velocidade relativa entre dois referenciais inerciais(*Galilei boost*), \mathbf{a} e b são translações espaciais e temporais, respectivamente. A lei de composição é dada por:

$$[b', a'_j, v'_j, R'] \circ [b, a_j, v_j, R] = [b' + b, a'_j + a_j + R'_{jk} a_k + b v'_j, v'_j + R'_{jk} v'_k, R' R].$$

Assim, o grupo de Galilei é especificado por dez parâmetros: três para rotações espaciais dadas pelos três ângulos de Euler; três para os *Galilei boosts* (\mathbf{v}); três para as translações espaciais (\mathbf{a});

e finalmente um parâmetro b para a translação temporal. A álgebra de Lie do Grupo de Galilei, com uma extensão central caracterizada por m , é formada pelos geradores $\hat{P}_i, \hat{G}_i, \hat{J}_i$ e \hat{H}_i , onde:

$$\begin{aligned}\hat{H} &\rightarrow \text{gerador do subgrupo das translações temporais, } T = \{[b, 0, 0, 1]\}; \\ \hat{P} &\rightarrow \text{gerador do subgrupo das translações espaciais, } S = \{[0, a_j, 0, 1]\}; \\ \hat{G} &\rightarrow \text{gerador do subgrupo dos boosts, } B = \{[0, 0, v_j, 1]\}; \\ \hat{J} &\rightarrow \text{gerador do subgrupo das rotações, } R = \{[0, 0, 0, R]\}.\end{aligned}$$

O subgrupo $T \times S$ forma um subgrupo abeliano invariante, e $G/(T \times S)$ é isomórfico a $B \times R$, o chamado **grupo de Galilei homogêneo**. As relações de comutação entre esses geradores definem a álgebra de Lie do grupo de Galilei e são dadas pelas seguintes formas:

$$\begin{aligned}[\hat{J}_i, \hat{J}_j] &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{J}_k, & [\hat{J}_i, \hat{P}_j] &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{P}_k, & [\hat{J}_i, \hat{G}_j] &= i\hbar\varepsilon_{ijk}\hat{G}_k, \\ [\hat{G}_i, \hat{P}_j] &= i\hbar m\hat{\delta}_{ij}, & [\hat{G}_i, \hat{H}] &= i\hbar\hat{P}_i, & [\hat{P}_i, \hat{H}] &= 0, \\ [\hat{J}_i, \hat{H}] &= 0, & [\hat{P}_i, \hat{P}_j] &= 0, & [\hat{G}_i, \hat{G}_j] &= 0,\end{aligned}\tag{3.2.1}$$

onde ε_{ijk} é o símbolo de Levi-Civita. Essa álgebra pode ser representada em diferentes espaços vetoriais. Uma primeira representação é a que corresponde ao espaço de Hilbert constituído pelas funções $\psi(q, t)$ de quadrado integrável no espaço de posição em que os geradores \hat{P} e \hat{Q} são representados por operadores hermitianos tais que

$$\hat{P}_i\psi(q) = -i\hbar\frac{\partial\psi(q)}{\partial q_i} \quad e \quad \hat{Q}_i\psi(q) = q_i\psi(q),$$

onde $q = (q_1, q_2, q_3)$ são coordenadas retangulares, e $i = 1, 2, 3$. Uma segunda representação é obtida no espaço de Hilbert formado pelas funções $\phi(p, t)$ de quadrado integrável no *espaço de momentum*, isto é, as transformadas de Fourier das funções $\psi(q, t)$. Nesse espaço os geradores \hat{P} e \hat{Q} são representados por operadores hermitianos, de tal forma que temos

$$\hat{P}_i\phi(p) = p_i\phi(p)$$

e

$$\hat{Q}_i\phi(p) = i\hbar\frac{\partial\phi(p)}{\partial p_i},$$

com $i = 1, 2, 3$. Existem outras representações possíveis; em particular, estamos interessados no caso do espaço de Hilbert simplético¹ H_Γ . Para tanto, vamos considerar transformações unitárias $U : H_\Gamma \rightarrow H_\Gamma$ tal que $\langle\Psi_1 | \Psi_2\rangle$ seja invariante. Utilizando o operador $\overleftrightarrow{\Lambda}$, definimos um

¹Por uma questão de simplicidade consideremos o sistema de uma partícula no espaço tridimensional, $n = 3$.

mapeamento $e^{\frac{i\hbar}{2}\overleftarrow{\Lambda}} := \star : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \Gamma$ conhecido como produto estrela, ou seja,

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

Nesse espaço, lembrando da Propriedade 2.3.4 do produto estrela, temos que os operadores \widehat{P} e \widehat{Q} são tais que:

$$\widehat{P}_i \Psi(q, p; t) := p_i \star \Psi(q, p; t) = \left(p_i - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \right) \Psi(q, p; t), \quad (3.2.2)$$

$$\widehat{Q}_i \Psi(q, p; t) := q_i \star \Psi(q, p; t) = \left(q_i + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \Psi(q, p; t). \quad (3.2.3)$$

onde, $i = 1, 2, 3$. Segue dessas expressões que:

$$\widehat{G}_i \Psi(q, p; t) := g_i(q \star, p \star) \Psi(q, p; t) = (mq_i \star - tp_i \star) \Psi(q, p; t), \quad (3.2.4)$$

$$\begin{aligned} \widehat{J}_i \Psi(q, p; t) &:= j_i(q \star, p \star) \Psi(q, p; t) = \varepsilon_{ijk} (q_j \star) (p_k \star) \Psi(q, p; t) \\ &= \left(\varepsilon_{ijk} q_j p_k - \frac{i\hbar}{2} \varepsilon_{ijk} q_j \frac{\partial}{\partial p_k} + \frac{i\hbar}{2} \varepsilon_{ijk} p_j \frac{\partial}{\partial q_k} + \frac{\hbar^2}{4} \varepsilon_{ijk} \frac{\partial^2}{\partial q_j \partial p_k} \right) \Psi(q, p; t) \end{aligned} \quad (3.2.5)$$

e

$$\begin{aligned} \widehat{H} \Psi(q, p; t) &:= h(q \star, p \star) \Psi(q, p; t) = \frac{1}{2m} \left[(p_1 \star)^2 + (p_2 \star)^2 + (p_3 \star)^2 \right] \Psi(q, p; t) \\ &= \frac{1}{2m} \left[\left(p_1 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_1} \right)^2 + \left(p_2 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_2} \right)^2 + \left(p_3 - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_3} \right)^2 \right] \Psi(q, p; t). \end{aligned} \quad (3.2.6)$$

Esses operadores satisfazem a **álgebra de Galilei-Lie** dada pelas relações de comutação (3.2.1), sendo que \widehat{P} , \widehat{G} , \widehat{J} e \widehat{H} representam os geradores de translação, *boost*, rotação e translação temporal, respectivamente. Notamos que esses geradores foram obtidos pela combinações das variáveis q_i e p_i com o produto estrela [6, 128]. A partir dos *boosts*, ou seja, das transformações puras de Galilei, temos que

$$e^{-\frac{i}{\hbar} v \cdot \widehat{G}} \widehat{Q}_j e^{\frac{i}{\hbar} v \cdot \widehat{G}} = \widehat{Q}_j + v_j t \quad (3.2.7)$$

e

$$e^{-\frac{i}{\hbar} v \cdot \widehat{G}} \widehat{P}_j e^{\frac{i}{\hbar} v \cdot \widehat{G}} = \widehat{P}_j + mv_j. \quad (3.2.8)$$

Além disso, temos as relações de comutação de Heisenberg:

$$[\widehat{Q}_i, \widehat{P}_j] = i\hbar \delta_{ij}, \quad [\widehat{Q}_i, \widehat{Q}_j] = 0 \quad e \quad [\widehat{P}_i, \widehat{P}_j] = 0. \quad (3.2.9)$$

Assim, os operadores \hat{Q} e \hat{P} podem ser considerados como as observáveis físicas de posição e *momentum*, respectivamente. Os geradores \hat{J}_i e \hat{H} são interpretados como os observáveis: *momentum* angular e Hamiltoniano, respectivamente. Os invariantes de Casimir da álgebra de Lie do grupo de Galilei são dados nessa representação por:

$$\hat{I}_1 = \hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{P}^2 \quad e \quad \hat{I}_2 = \left(\hat{J} - \frac{1}{m}\hat{G} \times \hat{P} \right)^2,$$

sendo \hat{J} o *momentum* angular total do sistema, onde podemos incluir o grau de liberdade de *Spin*, ou seja, $\hat{J} = \hat{L} + \hat{S}$. No caso de inclusão temos:

$$[\hat{S}, \hat{P}] = 0, \quad [\hat{S}, \hat{G}] = 0, \quad e \quad [\hat{S}, \hat{H}] = 0.$$

É a representação descrita nesta seção que constitui a base da Mecânica Quântica Simplética. Note que podemos construir uma base em H_Γ . Assim, com intuito de construir tal base, observamos que nessa representação da álgebra de Lie os operadores \hat{Q} e \hat{P} podem ser reescritos na seguinte forma:

$$\hat{Q}_j = \frac{1}{2} (\bar{Q}_j + i\hbar\partial_{p_j}), \quad e \quad \hat{P}_j = \frac{1}{2} (\bar{P}_j - i\hbar\partial_{q_j}),$$

onde introduzimos os operadores proporcionais à identidade dados por

$$\bar{Q}_j = 2q_j 1 \quad e \quad \bar{P}_j = 2p_j 1. \quad (3.2.10)$$

Os operadores \bar{Q}_j e \bar{P}_j são hermitianos e, quando submetidos ao *boost* de Galilei, transformam-se como posição e *momentum*, respectivamente, isto é:

$$e^{-\frac{i}{\hbar}v \cdot \hat{G}} \bar{Q}_j e^{\frac{i}{\hbar}v \cdot \hat{G}} = \bar{Q}_j + v_j t 1 \quad (3.2.11)$$

e

$$e^{-\frac{i}{\hbar}v \cdot \hat{G}} \bar{P}_k e^{\frac{i}{\hbar}v \cdot \hat{G}} = \bar{P}_k + mv_k 1. \quad (3.2.12)$$

Entretanto, \bar{Q}_j e \bar{P}_k obedecem as seguintes relações de comutação

$$[\bar{Q}_j, \bar{P}_k] = 0, \quad \forall \quad j, k = 1, 2, 3. \quad (3.2.13)$$

Isso nos impede de considerar os operadores \bar{Q}_j e \bar{P}_j como observáveis quânticos associados à posição e *momentum*. Apesar disso, no entanto, podemos usá-los para definir uma base de autovetores $\{|q, p\rangle\}$, com

$$\bar{Q}_j |q, p\rangle = q_j |q, p\rangle \quad e \quad \bar{P}_k |q, p\rangle = p_k |q, p\rangle. \quad (3.2.14)$$

Sendo os operadores \overline{Q}_j e \overline{P} hermitianos, temos pelo teorema espectral que a base $\{|q, p\rangle\}$ é completa e ortogonal, ou seja,

$$\int dqdp |q, p\rangle\langle q, p| = 1 \quad e \quad \langle q, p | q', p'\rangle = \delta(q - q') \delta(p - p'). \quad (3.2.15)$$

Como consequência, dado um vetor arbitrário $|\Psi(t)\rangle \in H$, podemos escrever

$$\Psi_n(q, p; t) = \langle q, p | \Psi_n(t)\rangle \quad e \quad \Psi_n^\dagger(q, p; t) = \langle q, p | \Psi_n(t)\rangle^\dagger = \langle \Psi_n(t) | q, p\rangle, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (3.2.16)$$

Além disso, se $\langle \Psi_n(t) | \Psi_m(t)\rangle = \delta_{nm}$, temos

$$\langle \Psi_n(t) | \Psi_m(t)\rangle = \int dqdp \langle \Psi_n(t) | q, p\rangle \langle q, p | \Psi_m(t)\rangle = \int dqdp \Psi_n^\dagger(q, p; t) \Psi_m(q, p; t) = \delta_{nm},$$

que em termos do produto estrela resulta em

$$\langle \Psi_n(t) | \Psi_m(t)\rangle = \int dqdp \Psi_n^\dagger(q, p; t) \star \Psi_m(q, p; t) = \delta_{nm}. \quad (3.2.17)$$

Em resumo, vemos que os operadores \overline{Q}_j e \overline{P}_k possuem autovalores q_j e p_k , respectivamente, os quais consideramos como coordenadas de um espaço de fase Γ e nos possibilitam uma construção da mecânica quântica em termos dos operadores-estrelas, $\widehat{f} := f\star$, e sua álgebra. A descrição de um estado de um sistema quântico é dada pela função de onda $\Psi(q, p; t)$, mas sua interpretação não pode se dar da mesma maneira como na mecânica quântica usual. Na realidade, a interpretação desse objeto matemático será estabelecida posteriormente, quando mostrarmos sua conexão com a função de Wigner.

3.3 Evolução Temporal de um Observável no Espaço de Hilbert Simplético

Sendo $\widehat{H} = h(q, p)\star$ a representação do gerador da translação temporal do grupo de Galilei no espaço de Hilbert simplético H_Γ , temos que a evolução temporal de um observável, $\widehat{O} := o(q, p)\star$, será dada da seguinte maneira:

$$\widehat{O}(t) = e^{\frac{it}{\hbar}\widehat{H}} \widehat{O} e^{-\frac{it}{\hbar}\widehat{H}}. \quad (3.3.1)$$

Dessa expressão obtemos então:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \widehat{O}(t) = \widehat{O}(t) \widehat{H} - \widehat{H} \widehat{O}(t) = [\widehat{O}(t), \widehat{H}], \quad (3.3.2)$$

que chamaremos de **equação de movimento de Heisenberg** no espaço de fase H_Γ . Nessa representação os *autokets* são fixos no tempo, enquanto os operadores são dependentes do tempo (descrição de Heisenberg). Devemos observar que:

1. Se $|\alpha\rangle$ for um estado *ket* em H segue, usando a base $\{|q, p\rangle\}$, que

$$\psi_\alpha(q, p) = \langle q, p | \alpha \rangle$$

é uma função de onda em H_Γ .

2. Sendo $|\alpha\rangle$ e $|\beta\rangle$ dois *kets* no espaço de Hilbert, temos que

$$\langle \alpha | \beta \rangle = \int dqdp \psi_\alpha^\dagger(q, p) \psi_\beta(q, p) = \int dqdp \psi_\alpha^\dagger(q, p) \star \psi_\beta(q, p).$$

3. Se $\widehat{O}(t)$ é um observável (operador autoadjunto) teremos na base $\{|q, p\rangle\}$ que:

$$\begin{aligned} \langle q, p | \widehat{O}(t) | \alpha \rangle &= \int dq' dp' \langle q, p | \widehat{O}(t) | q', p' \rangle \langle q', p' | \alpha \rangle \\ &= \int dq' dp' \widehat{O}(t) \psi_\alpha(q', p') \delta(q - q') \delta(p - p') \\ &= \widehat{O}(t) \psi_\alpha(q, p), \end{aligned}$$

onde foi utilizado que $\langle q, p | \widehat{O}(t) | q', p' \rangle = \widehat{O}(t) \delta(q - q') \delta(p - p')$.

4. O valor esperado do operador $\widehat{O}(t)$ no estado $|\alpha\rangle$ é dado por

$$\begin{aligned} \langle \widehat{O}(t) \rangle_\alpha &:= \langle \alpha | \widehat{O}(t) | \alpha \rangle = \int dq' dp' dq'' dp'' \langle \alpha | q', p' \rangle \langle q', p' | \widehat{O}(t) | q'', p'' \rangle \langle q'', p'' | \alpha \rangle \\ &= \int dq' dp' dq'' dp'' \psi_\alpha^\dagger(q', p') \widehat{O}(t) \psi_\alpha(q'', p'') \delta(q' - q'') \delta(p' - p'') \\ &= \int dq' dp' \psi_\alpha^\dagger(q', p') \widehat{O}(t) \psi_\alpha(q', p') \\ &= \int dqdp \psi_\alpha^\dagger(q, p) \star \widehat{O}(t) \star \psi_\alpha(q, p), \end{aligned} \tag{3.3.3}$$

onde utilizamos a **Propriedade 2.3.8** do produto estrela. Dessa equação vemos que o valor esperado do operador $\widehat{O}(t)$ será real se seu espectro for real. Vemos também que ψ_α não depende explicitamente do tempo. Notamos que, se introduzirmos a expressão (3.3.1) em (3.3.3), podemos reescrever o valor esperado de um observável de outra maneira. Com efeito, sendo $\widehat{H} = h\star$ e definindo a exponencial estrela, $e_\star^{\frac{it}{\hbar}h}$, como [159, 43]

$$e_\star^{\frac{it}{\hbar}h(q,p)} := 1 + \left(\frac{it}{\hbar}\right) h(q, p) + \frac{1}{2!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^2 h \star h + \frac{1}{3!} \left(\frac{it}{\hbar}\right)^3 h \star h \star h + \dots, \tag{3.3.4}$$

encontramos

$$\langle \widehat{O}(t) \rangle_\alpha = \int dqdp \psi_\alpha^\dagger(q, p) \star e_\star^{\frac{it}{\hbar}h} \star \widehat{O} \star e_\star^{-\frac{it}{\hbar}h} \star \psi_\alpha(q, p). \tag{3.3.5}$$

Então, podemos definir

$$\Psi_\alpha(q, p; t) := e_\star^{-\frac{it}{\hbar}h} \star \psi_\alpha(q, p), \quad (3.3.6)$$

e, conseqüentemente, temos

$$\Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) := \psi_\alpha^\dagger(q, p) \star e_\star^{\frac{it}{\hbar}h}. \quad (3.3.7)$$

Portanto, o valor esperado do operador $\widehat{O}(t)$ é dado pela seguinte expressão:

$$\langle \widehat{O}(t) \rangle_\alpha = \int dqdp \Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) \star \widehat{O} \star \Psi_\alpha(q, p; t) = \int dqdp \Psi_\alpha^\dagger(q, p; t) \widehat{O} \Psi_\alpha(q, p; t). \quad (3.3.8)$$

Essa relação nos mostra que o observável é definido num certo instante de tempo, enquanto o estado evolui no tempo, o que corresponde à descrição de Schrödinger.

3.4 A Equação de Schrödinger no Espaço de Hilbert Simplético

A Eq.(3.3.8) descreve a dinâmica dos observáveis. Contudo, ao considerarmos Ψ dependente do tempo, isso nos conduz a encontrar uma equação dinâmica que descreve a evolução de Ψ . Para isto, derivando a Eq.(3.3.6) com relação ao tempo, temos

$$\partial_t \Psi_\alpha(q, p; t) = -\frac{i}{\hbar} h \star e_\star^{-\frac{it}{\hbar}h} \star \psi_\alpha(q, p) = -\frac{i}{\hbar} h \star \Psi_\alpha(q, p; t) = -\frac{i}{\hbar} \widehat{H} \Psi_\alpha(q, p; t).$$

Assim, encontramos

$$i\hbar \partial_t \Psi_\alpha(q, p, t) = \widehat{H} \Psi_\alpha(q, p, t) = h \star \Psi_\alpha(q, p, t), \quad (3.4.1)$$

que é a equação básica da evolução temporal de Ψ_α em H_Γ . Denominamos essa equação como **equação de Schrödinger no espaço de fase**².

Utilizando o método de separação de variáveis e a **Propriedade 2.3.1**, isto é

$$\Psi_\alpha(q, p, t) = \psi_\alpha(q, p) \star \phi(t) = \psi_\alpha(q, p) \phi(t),$$

na Eq.(3.4.1), encontramos a seguinte equação:

$$\widehat{H} \psi_\alpha(q, p) = h(q, p) \star \psi_\alpha(q, p) = E \psi_\alpha(q, p), \quad (3.4.2)$$

²Lembramos que a dedução desta equação somente pode ser verificada se a extensão central (3.2.1) que rotula a representação for não nula ($m \neq 0$), o que nos faz afirmar que são as representações projetivas unitárias do grupo de Galillei que interessam à física não relativística.

onde E representa uma constante e a solução geral Ψ_α da Eq.(3.4.1) é dada por

$$\Psi_\alpha (q, p, t) = \psi_\alpha (q, p) e^{-\frac{i}{\hbar}tE}. \quad (3.4.3)$$

A Eq.(3.4.2) representa a **equação de Schrödinger independente do tempo** no espaço de Hilbert simplético H_Γ .

Notamos que, para um sistema físico constituído de uma partícula interagindo com um potencial do tipo $V(\hat{Q}) = V(q\star)$, o operador Hamiltoniano nas equações (3.4.1) e (3.4.2) será dado pela seguinte expressão

$$\widehat{H} = H(\hat{Q}, \hat{P}) = \frac{1}{2m}\widehat{P}^2 + V(\hat{Q}) = \frac{1}{2m}(p\star)^2 + V(q\star). \quad (3.4.4)$$

3.5 Conexão com a Formalização de Wigner

A conexão entre a solução da equação (3.4.1) e a função de Wigner é estabelecida a partir da relação

$$f(q, p, t) = f_W(q, p, t) = \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t). \quad (3.5.1)$$

Iniciaremos a comprovação dessa conexão, considerando a Eq.(3.4.1) e o seu complexo conjugado

$$-i\hbar\partial_t\Psi^\dagger(q, p, t) = \Psi^\dagger(q, p, t)\widehat{H}. \quad (3.5.2)$$

Multiplicando à esquerda da Eq.(3.4.1) por $\star\Psi^\dagger$, e à direita da Eq.(3.5.2) por $\Psi\star$, e realizando a subtração de uma equação pela outra, encontramos que

$$\begin{aligned} i\hbar\partial_t\left(\Psi(q, p, t)\star\Psi^\dagger(q, p, t)\right) &= \widehat{H}\left(\Psi(q, p, t)\star\Psi^\dagger(q, p, t)\right) - \left(\Psi(q, p, t)\star\Psi^\dagger(q, p, t)\right)\widehat{H} \\ &= h\star f - f\star h \\ &= i\hbar\{h, f\}_M, \end{aligned}$$

ou seja,

$$\frac{\partial f(q, p, t)}{\partial t} = \{h, f\}_M. \quad (3.5.3)$$

Vemos que este resultado é igual à equação obtida para descrever a dinâmica da função de Wigner (vide Eq.(2.4.5)). Notamos também que a função f satisfaz a condição de normalização, isto é:

$$\int dqdpf(q, p, t) = \int dqdp\Psi(q, p, t)\star\Psi^\dagger(q, p, t) = 1. \quad (3.5.4)$$

Em particular temos as seguintes interpretações: se no instante t qualquer é feita uma medida da localização da partícula associada à função de Wigner f , então a densidade de probabilidade $\sigma(q; t)$ de que a partícula seja encontrada com coordenada q é igual a

$$\sigma(q; t) := \int dp f_W(q, p, t); \quad (3.5.5)$$

no entanto, se no instante t é feita uma medida do *momentum* da partícula associada à função de Wigner f , então a densidade de probabilidade $\sigma(p; t)$ de que a partícula seja encontrada com *momentum* p é igual a

$$\sigma(p; t) := \int dq f_W(q, p, t). \quad (3.5.6)$$

A função f não é positiva definida. Com isto concluímos que a relação $f(q, p, t) = \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t)$ satisfaz as propriedades da função de Wigner. Além disso, temos que a função de Wigner é real como garante a Eq.(3.5.1), pois

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

isto é, $f_W = f_W^\dagger$.

Um resultado importante com relação à função de Wigner definida por (3.4.2) é que, se aplicarmos $\star \psi_\alpha^\dagger(q, p)$ à direita desta equação, obtemos

$$\widehat{H}f_\alpha(q, p) = h \star f_\alpha(q, p) = Ef_\alpha(q, p), \quad (3.5.7)$$

e isto mostra que ψ_α e f_α satisfazem a mesma equação de autovalor. Portanto, se temos as soluções ψ_α , podemos encontrar as funções de Wigner em H_Γ . As funções ψ_α no espaço de fase nós a denominamos **quasi-amplitude de probabilidade**.

Finalizando esta seção, devemos observar que o valor esperado de um observável \widehat{O} neste formalismo simplético da mecânica quântica é dado por

$$\langle \widehat{O}(t) \rangle_\alpha = \int dq dp \widehat{O} f_\alpha(q, p, t), \quad (3.5.8)$$

onde substituímos (3.5.1) em (3.3.8) e f_α é a função de Wigner associada ao estado $|\alpha\rangle \in H_\Gamma$. Note que o valor esperado do operador \widehat{Q} será dado por

$$\langle \widehat{Q} \rangle = \int dq dp \widehat{Q} f_W(q, p; t) = \int dq \widehat{Q} \sigma(q; t) = \int dq (q \star \sigma(q; t)), \quad (3.5.9)$$

onde $\sigma(q; t)$ representa a densidade de probabilidade associada à medida do observável \hat{Q} , na posição q . De modo análogo, o valor esperado do operador \hat{P} será expresso da seguinte forma:

$$\langle \hat{P} \rangle = \int dq dp \hat{P} f_W(q, p; t) = \int dp \hat{P} \sigma(p; t) = \int dp (p \star \sigma(p; t)), \quad (3.5.10)$$

em que $\sigma(p; t)$ corresponde à densidade de probabilidade associada à medida do operador \hat{P} com *momentum* p .

3.6 Matriz Densidade no Espaço de Hilbert Simplético

A matriz densidade está relacionada com a função de Wigner por meio da Eq.(2.2.19), ou seja,

$$\hat{\rho} = 2\pi\hbar f_W \star.$$

Portanto, usando a Eq.(3.5.1) temos

$$\hat{\rho} = 2\pi\hbar \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t) \star. \quad (3.6.1)$$

Essa é a expressão para o operador estrela associado à matriz densidade $\rho(q, p, t)$. De fato, derivando essa equação em relação ao tempo e multiplicando por $i\hbar$, obtemos

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho} = 2\pi\hbar \left\{ (i\hbar \partial_t \Psi) \star \Psi^\dagger \star + \Psi \star (i\hbar \partial_t \Psi^\dagger) \star \right\}.$$

Considerando a Eq.(3.4.1) e seu complexo conjugado podemos reescrever a última expressão como

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

isto é,

$$i\hbar \partial_t \hat{\rho} = \hat{H} \hat{\rho} - \hat{\rho} \hat{H} = [\hat{H}, \hat{\rho}]. \quad (3.6.2)$$

Isso mostra que o operador $\hat{\rho}$ satisfaz a equação de Liouville-von Neumann o que, de forma consistente, nos leva à equação dinâmica da função de Wigner, ou seja,

$$\partial_t f_W(q, p, t) = \{h, f_W\}_M.$$

3.7 Espaço de Hilbert Relativístico e a Estrutura Simplética

Seja \mathbb{M} uma variedade analítica quadridimensional, onde as coordenadas de cada ponto são dadas por $q^\mu, \mu = 0, 1, 2, 3$. \mathbb{M} representa o espaço de Minkowski, cuja métrica é dada pela diagonal $diag(g) = (-1, 1, 1, 1)$. No espaço cotangente, $\Gamma = T^*\mathbb{M}$, as coordenadas de cada ponto são dadas por (q^μ, p_μ) . O espaço Γ é equipado com uma estrutura simplética dada pela 2-forma,

$$w = dq^\mu \wedge dp_\mu,$$

também chamada de forma simplética³. Considerando essa forma simplética conjuntamente com o operador bidiferencial de funções no espaço $C^\infty(T^*\mathbb{M})$ dado por

$$\overleftrightarrow{\Lambda} = \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q^\mu} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p_\mu} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p^\mu} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q_\mu}, \quad (3.7.1)$$

temos que o parênteses de Poisson relativístico é expresso da seguinte forma:

$$w(f \overleftrightarrow{\Lambda}, g \overleftrightarrow{\Lambda}) = f \overleftrightarrow{\Lambda} g = \{f, g\}, \quad (3.7.2)$$

onde

$$\{f, g\} := \frac{\partial f}{\partial q^\mu} \frac{\partial g}{\partial p_\mu} - \frac{\partial f}{\partial p^\mu} \frac{\partial g}{\partial q_\mu} \quad (3.7.3)$$

e as funções $f = f(q^\mu, p^\mu)$ e $g = g(q^\mu, p^\mu)$ são de classes C^∞ . Os campos vetoriais $f \overleftrightarrow{\Lambda}$ e $g \overleftrightarrow{\Lambda}$ sobre Γ são dados pela expressão geral da seguinte forma

$$X_h := h \overleftrightarrow{\Lambda} = \frac{\partial h}{\partial q^\mu} \frac{\partial}{\partial p_\mu} - \frac{\partial h}{\partial p^\mu} \frac{\partial}{\partial q_\mu} = \{h, \}. \quad (3.7.4)$$

O espaço $T^*\mathbb{M}$, equipado com essa estrutura simplética, é chamado de espaço de fase Γ relativístico[2, 5].

A introdução de um espaço de Hilbert associado ao espaço de fase Γ relativístico é realizada[2], considerando $d\eta(q, p) := d^4 p d^4 q$ como uma medida invariante no espaço fibrado cotangente. Segue que o espaço de Hilbert sobre Γ é definido como um espaço de funções η -mensuráveis $\Psi : \Gamma \rightarrow \mathbb{C}$, que são de quadrado integrável, com

$$\int |\Psi(q, p)|^2 d\eta(q, p) < \infty, \quad (3.7.5)$$

³Assumimos a soma sobre os elementos de índice repetido.

sendo uma forma bilinear real. Supondo, então, como no caso não relativístico, um conjunto de operadores hermitianos que comutam \overline{Q} e \overline{P} , define-se[128] o conjunto formado pelos kets $|q, p\rangle$, tal que

$$\overline{Q} |q, p\rangle = q |q, p\rangle \quad e \quad \overline{P} |q, p\rangle = p |q, p\rangle,$$

e escreve-se $\Psi(q, p) = \langle q, p | \Psi \rangle$, o que possibilita introduzir o produto $\langle \Psi | \Phi \rangle$ como

$$\int d\eta(q, p) \Psi^\dagger(q, p) \Phi(q, p).$$

Neste contexto, o estado do sistema quântico relativístico é dado pelas funções $\Psi(q, p)$ e pode-se estudar o grupo de Poincaré tomando H_Γ como espaço de representações. Para isto, busca-se construir transformações unitárias $U : H_\Gamma \rightarrow H_\Gamma$ tal que o produto interno entre duas funções, $\langle \Psi | \Phi \rangle$, seja por elas invariante. Com a extensão do operador bidiferencial $\overleftarrow{\Lambda}$, Eq.(3.7.1), pode-se então definir um mapeamento $e^{\frac{i}{2}\overleftarrow{\Lambda}} = \star : \Gamma \times \Gamma \rightarrow \Gamma$ da seguinte forma

$$f(q, p) \star g(q, p) := f(q, p) \exp \left[\frac{i\hbar}{2} \left(\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial q^\mu} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial p_\mu} - \frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial p^\mu} \frac{\overrightarrow{\partial}}{\partial q_\mu} \right) \right] g(q, p), \quad (3.7.6)$$

com os geradores de U sendo introduzidos pela relação:

$$\widehat{F} := f(q, p) \star = f \left(q^\mu + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_\mu}, p^\mu - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \right). \quad (3.7.7)$$

Com essas definições podemos analisar a álgebra de Poincaré-Lie via operadores do tipo $\widehat{F} := f(q, p) \star$; trataremos disso na seção seguinte.

3.8 A Álgebra de Poincaré-Lie no Espaço de Fase

Considerando a definição do operador estrela, Eq.(3.7.7), juntamente com as funções q_μ , p_μ e $m_{\mu,\nu} = q_\mu p_\nu - p_\mu q_\nu$ definidas no espaço de fase Γ , obtemos os seguintes operadores estrelas atuando em H_Γ :

$$\widehat{Q}^\mu := q^\mu \star = q^\mu + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_\mu}, \quad (3.8.1)$$

$$\widehat{P}^\mu := p^\mu \star = p^\mu - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \quad (3.8.2)$$

e

$$\widehat{M}_{\nu\sigma} := m_{\nu\sigma} \star = \widehat{Q}_\nu \widehat{P}_\sigma - \widehat{Q}_\sigma \widehat{P}_\nu, \quad (3.8.3)$$

os quais satisfazem a álgebra de Lie do grupo de Poincaré que é dada pelas seguintes relações de comutação:

$$[\widehat{M}_{\mu\nu}, \widehat{P}_\sigma] = i (g_{\nu\sigma} \widehat{P}_\mu - g_{\sigma\mu} \widehat{P}_\nu), \quad (3.8.4)$$

$$[\widehat{P}_\mu, \widehat{P}_\nu] = 0, \quad (3.8.5)$$

e

$$[\widehat{M}_{\mu\nu}, \widehat{M}_{\sigma\rho}] = -i (g_{\mu\rho} \widehat{M}_{\nu\sigma} - g_{\nu\rho} \widehat{M}_{\mu\sigma} + g_{\mu\sigma} \widehat{M}_{\rho\nu} - g_{\nu\sigma} \widehat{M}_{\rho\mu}). \quad (3.8.6)$$

Nessas expressões, os operadores $\widehat{M}_{\mu\nu}$ são os geradores de rotações e os \widehat{P}_μ geradores de translações no espaço de fase simplético relativístico. Além disso, podemos construir os invariantes de Casimir da álgebra de Poincaré; esses invariantes são dados por

$$C_1 = \widehat{P}^2 = \widehat{P}^\mu \widehat{P}_\mu = m^2 \quad (3.8.7)$$

e

$$C_2 = \widehat{W}^\mu \widehat{W}_\mu = -m^2 s(s+1), \quad (3.8.8)$$

onde \widehat{W}_μ é o chamado pseudovetor de Pauli-Lubanski e é definido por

$$\widehat{W}_\mu := -\frac{1}{2} \epsilon_{\mu\nu\rho\sigma} \widehat{M}^{\nu\rho} \widehat{P}^\sigma, \quad (3.8.9)$$

sendo $\epsilon_{\mu\nu\rho\sigma}$ o símbolo de Levi-Civita. Vemos que a condição relativa à massa(m) é representada pelo primeiro invariante, C_1 . Já o segundo invariante C_2 refere-se ao *spin* da partícula. De forma natural mostra-se que C_1 e C_2 construídos com os operadores (3.8.1-3) comutam com os geradores da álgebra de Poincaré, propriedade esperada dos invariantes da álgebra, mostrando, portanto, que os geradores definidos aqui determinam uma representação do grupo de Poincaré. Nas seções seguintes, iremos escrever as equações de movimento para campos relativísticos, ou seja, a equação de Klein-Gordon e Dirac no espaço de fase com suas respectivas lagrangianas por meio dessa representação.

3.9 A Equação de Klein-Gordon no Espaço de Fase

Consideremos um sistema formado por uma partícula de *spin* nulo, sendo seu estado descrito por um ente que denotaremos por Ψ (campo escalar). Então, o segundo invariante da álgebra de Lie do grupo de Poincaré C_2 é igual a zero (*spin* nulo), e o primeiro invariante $C_1 = \hat{P}^2$ está relacionado com a condição sobre a massa da partícula. Sendo assim, podemos escrever

$$\hat{P}^2 \Psi(q, p) = \hat{P}^\mu \hat{P}_\mu \Psi(q, p) = m^2 \Psi(q, p). \quad (3.9.1)$$

Substituindo nessa equação as expressões dos operadores \hat{P}^μ e \hat{P}_μ (veja Eq.(3.8.2)) obtemos

$$\left(p^\mu - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial q_\mu} \right) \left(p_\mu - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial q^\mu} \right) \Psi(q, p) = m^2 \Psi(q, p),$$

o que nos conduz à seguinte expressão:

$$-\frac{1}{4} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial q^\mu \partial q_\mu} - i p^\mu \frac{\partial \Psi}{\partial q^\mu} + (p^\mu p_\mu - m^2) \Psi = 0. \quad (3.9.2)$$

Essa é a equação de Klein-Gordon no espaço de fase. A solução dessa equação para uma partícula livre tem a forma

$$\Psi(q_\mu, p_\mu) = \xi(p_\mu) e^{-4ip^\mu q_\mu}, \quad (3.9.3)$$

onde a função $\xi(p_\mu)$ depende das condições de contorno.

É importante notar que a equação de Klein-Gordon pode ser deduzida a partir de uma *densidade de lagrangiana*, isto é:

$$\mathfrak{L} = -\frac{1}{4} \frac{\partial \Psi}{\partial q_\mu} \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial q^\mu} + \frac{1}{2} i p^\mu \left(\Psi^\dagger \frac{\partial \Psi}{\partial q^\mu} - \Psi \frac{\partial \Psi^\dagger}{\partial q^\mu} \right) - (p^\mu p_\mu - m^2) \Psi \Psi^\dagger. \quad (3.9.4)$$

Com essa densidade, se utilizarmos as equações de Euler-Lagrange para campos escalares, obtaremos a equação desejada, ou seja, a Eq.(3.9.2).

Para interpretação física da Eq.(3.9.2) devemos associar o estado representado por $\Psi(q, p, t)$ com a função de Wigner $f_W(q, p)$. Com esta finalidade, considere-se a função definida por

$$f(q, p) = f_W(q, p) = \Psi(q, p, t) \star \Psi^\dagger(q, p, t) \quad (3.9.5)$$

e mostra-se que essa é a função de Wigner.

Demonstração. Podemos escrever a equação de Klein-Gordon da seguinte forma

$$p^2 \star \Psi (q, p) = m^2 \Psi (q, p). \quad (3.9.6)$$

Multiplicando essa equação à direita por Ψ^\dagger , obtemos

$$(p^2 \star \Psi (q, p)) \star \Psi^\dagger (q, p) = m^2 \Psi (q, p) \star \Psi^\dagger (q, p). \quad (3.9.7)$$

Reconsiderando a Eq.(3.9.6), tomando seu complexo conjugado e multiplicando à esquerda por Ψ , chegamos à seguinte expressão

$$\Psi (q, p) \star (\Psi^\dagger (q, p) \star p^2) = m^2 \Psi (q, p) \star \Psi^\dagger (q, p). \quad (3.9.8)$$

Agora, subtraindo a Eq.(3.9.7) da Eq.(3.9.8), e fazendo uso da propriedade associativa do produto estrela, encontramos

$$p^2 \star f_W - f_W \star p^2 = 0, \quad (3.9.9)$$

onde $f_W (q, p) = \Psi (q, p) \star \Psi^\dagger (q, p)$. Mas, por meio do parênteses de Moyal e o fato que $\{g, f\}_M = g \left(2 \sin \frac{i}{2} \overleftrightarrow{\Lambda} \right) f$ podemos escrever a última equação da seguinte maneira

$$\{p^2, f_W\}_M = p_\mu \frac{\partial f_W}{\partial q_\mu} = 0, \quad (3.9.10)$$

onde usamos $p^2 \overleftrightarrow{\Lambda} = -2p \partial_q$, $p^2 \overleftrightarrow{\Lambda}^2 = 2\partial_q^2$ e $p^2 \overleftrightarrow{\Lambda}^3 = 0$. Segue, assim, que a solução da Eq.(3.9.10) é a função de Wigner relativística, definida por (3.9.5) \square

3.10 A Equação de Dirac no Espaço de Fase

Para determinarmos uma equação do tipo Dirac no espaço de fase, considera-se os entes de Dirac γ^μ e o operador $\gamma^\mu \widehat{P}_\mu$, que assumimos ser invariante, com \widehat{P}_μ seja dado pela Eq.(3.8.2). Portanto, escrevemos

$$\gamma^\mu \widehat{P}_\mu \Psi (q, p) = \gamma^\mu p_\mu \star \Psi (q, p) = m \Psi (q, p), \quad (3.10.1)$$

com m sendo uma constante a determinar. Segue, então, utilizando a Eq.(3.8.2)(com $\hbar = 1$), que se tem

$$\gamma^\mu \left(p_\mu - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial q^\mu} \right) \Psi (q, p) = m \Psi (q, p). \quad (3.10.2)$$

Essa equação é conhecida[2] como equação de Dirac no espaço de fase. As soluções dessa equação também devem ser soluções da equação de Klein-Gordon; de fato, aplicando o operador $\gamma^\mu \widehat{P}_\mu$ na Eq.(3.10.1) obtemos

$$\left(\gamma^\mu \widehat{P}_\mu\right) \left(\gamma^\nu \widehat{P}_\nu\right) \Psi(q, p) = m^2 \Psi(q, p), \quad (3.10.3)$$

e usando a Eq.(3.8.2) temos a seguinte equação no espaço de fase:

$$\gamma^\mu \left(p_\mu - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial q^\mu}\right) \gamma^\nu \left(p_\nu - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial q^\nu}\right) \Psi(q, p) = m^2 \Psi(q, p). \quad (3.10.4)$$

Observando então o produto $\gamma^\mu \gamma^\nu$ pode ser escrito como a soma de uma parte simétrica e outra antissimétrica, temos

$$\gamma^\mu \gamma^\nu \widehat{P}_\mu \widehat{P}_\nu = \frac{1}{2} (\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu) \widehat{P}_\mu \widehat{P}_\nu. \quad (3.10.5)$$

O que indica que para termos a equação de Klein-Gordon no espaço de fase, devemos ter

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad (3.10.6)$$

sendo $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\}$ o anticomutador entre γ^μ e γ^ν , ou seja, os entes γ^μ devem ser os de Clifford, resultado que justifica a expressão (3.10.1).

É importante notar que a equação de Dirac no espaço de fase pode ser obtida a partir da densidade de lagrangiana para este campo, que é dada pela expressão:

$$\mathfrak{L} = -\frac{i}{4} \left(\frac{\partial \bar{\Psi}(q, p)}{\partial q^\mu} \gamma^\mu \Psi(q, p) - \bar{\Psi}(q, p) \gamma^\mu \frac{\partial \Psi(q, p)}{\partial q^\mu} \right) - \bar{\Psi}(q, p) (m - \gamma^\mu p_\mu) \Psi(q, p). \quad (3.10.7)$$

A partir das densidades de lagrangianas podemos, por exemplo, estudar teorias de calibre no espaço de fase por meio de aplicações do tipo $\Psi(q, p) \rightarrow e^{i\Lambda(q, p)} \star \Psi(q, p)$. Uma análise e um estudo sistemático das transformações de calibre abeliana e não abeliana usando a formulação simplética são apresentados nas referências [2, 41].

Capítulo 4

Átomo de Hidrogênio Unidimensional

*É senso ter um método e experimentá-lo e, se ele
falhar, admiti-lo e francamente tentar outro.
Mas, acima de tudo, tentar alguma coisa.*

Franklin D. Roosevelt

Modelos quânticos em uma dimensão são extremamente úteis para estudar o comportamento de muitos sistemas físicos[30, 60, 115, 142, 154]. Em particular, um elétron interagindo através do potencial $(-k/|q|)$ foi estudado devido não só à sua própria importância, mas por causa da sua relação com a modelagem de uma ampla variedade de problemas. Por exemplo: na descrição de átomos em campos magnéticos super intensos[133], no estudo acima do limiar de ionização de átomos em campos de laser intensos[130], na descrição de elétrons pairando acima de superfluidos[29, 36], em aplicações na física da matéria condensada[29, 125].

O átomo de Hidrogênio unidimensional(1D) foi estudado desde o início da teoria quântica[150, 151]; em 1959, Loudon apresentou um estudo apurado para este sistema[115]. Desde então, usando a mecânica quântica convencional, o átomo de Hidrogênio 1D foi resolvido por meio de diferentes abordagens e discutido por mais de seis décadas; uma compreensiva bibliografia das abordagens e seus aspectos teóricos é apresentada nas referências [50, 51, 129]. No contexto da mecânica quântica no espaço de fase, esse sistema foi primeiramente estudado por Li e Lu[113]; um estudo mais recente pode ser encontrado nas referências [42, 120].

Neste capítulo, aplicaremos a Mecânica Quântica Simplética ao átomo de Hidrogênio 1D se-

guindo o procedimento de trabalhos anteriores[42, 113] para determinar as quasi-amplitudes de probabilidade, as funções de Wigner e o espectro. Nosso objetivo é, por completeza, expor o método existente que, como notaremos, difere de nossa proposta apresentada nos Capítulos 5 e 6 para situações 2D e 3D.

4.1 Hamiltoniano do Átomo Hidrogênio Unidimensional

Vamos considerar o sistema unidimensional onde o potencial coulombiano em unidades do **SI** é dado por:

$$V(q) = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|q|}. \quad (4.1.1)$$

Assim, o correspondente Hamiltoniano clássico inicial é dado por

$$H(q, p) = \frac{p^2}{2m} - \frac{k}{|q|}, \quad (4.1.2)$$

onde k é uma constante positiva e (q, p) são as coordenadas canônicas no espaço $\mathbb{R}^+ \times \mathbb{R}$, sendo \mathbb{R}^+ o conjunto de números reais positivos.

Podemos realizar uma mudança de coordenadas canônicas da seguinte forma:

$$q \rightarrow mkq, \quad p \rightarrow \frac{1}{mk}p, \quad H \rightarrow \frac{1}{mk^2}H, \quad (4.1.3)$$

tal que o novo Hamiltoniano que vamos estudar assume a forma

$$H(q, p) = \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{|q|}, \quad (4.1.4)$$

onde por simplicidade mantemos a mesma notação para as novas variáveis.

A equação de Schrödinger no espaço de fase correspondente a este Hamiltoniano assume a forma

$$\left(\frac{p^2}{2} - \frac{1}{|q|}\right) \star \Psi(q, p) = E\Psi(q, p). \quad (4.1.5)$$

Esta equação pode ser resolvida em duas distintas regiões, $q < 0$ e $q > 0$. Vamos denotar $\Psi_>(q, p)$ como sendo a solução para $q > 0$ e por $\Psi_<(q, p)$ a solução para $q < 0$. Iremos, então, calcular $\Psi_>(q, p)$ e assumiremos que um cálculo similar para $\Psi_<(q, p)$ pode ser realizado. A equação no espaço de fase para $\Psi_>(q, p)$ é

$$\frac{1}{2} \left(p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}\right)^2 \Psi_>(q, p) - \left(q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^{-1} \Psi_>(q, p) = E\Psi_>(q, p). \quad (4.1.6)$$

Iniciaremos a análise desta equação procurando uma solução assintótica. Temos que: se $\Psi_>(q, p)$ representa o estado do sistema físico no espaço de fase, então seu valor aproxima-se de zero à medida que as variáveis q e p tendem ao infinito, isto é

$$\lim_{(q,p) \rightarrow +\infty} \Psi_>(q, p) \rightarrow 0, \quad (4.1.7)$$

de tal modo que a função $\Psi_>(q, p)$ seja de quadrado integrável, Eq.(3.1.1). Uma maneira de escrever a função $\Psi_>(q, p)$ é assumir que esta seja da seguinte forma

$$\Psi_>(q, p) = e^{-\frac{2i}{\hbar}qp} \Phi(q, p), \quad (4.1.8)$$

onde $\Phi(q, p)$ satisfaz a condição

$$\int dqdp \Phi^\dagger(q, p) \Phi(q, p) < \infty. \quad (4.1.9)$$

Portanto, inserindo a solução (4.1.29) na Eq.(4.1.6) e usando as relações[121]:

$$\left(p - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}\right)^n = e^{-\frac{2i}{\hbar}qp} \left(-\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}\right)^n e^{\frac{2i}{\hbar}qp}, \quad (4.1.10)$$

$$\left(q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^n = e^{-\frac{2i}{\hbar}qp} \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^n e^{\frac{2i}{\hbar}qp} \quad (4.1.11)$$

e

$$V\left(q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) = e^{-\frac{2i}{\hbar}qp} V\left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right) e^{\frac{2i}{\hbar}qp}, \quad (4.1.12)$$

obtemos

$$\left[\frac{1}{2} \left(-\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}\right)^2 - \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}\right)^{-1}\right] \Phi(q, p) = E\Phi(q, p). \quad (4.1.13)$$

Fazendo a mudança de variável

$$\eta = 2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p}, \quad (4.1.14)$$

com $\Phi(\eta, p) = \Phi(q, p)$, e notando que

$$\frac{\partial}{\partial q} \Phi(\eta, p) = \left(\frac{\partial \eta}{\partial q}\right) \frac{\partial}{\partial \eta} \Phi(\eta, p) = 2 \frac{\partial}{\partial \eta} \Phi(\eta, p),$$

a equação (4.1.13) é transformada na seguinte forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \frac{1}{\eta}\right) \Phi(\eta, p) = E\Phi(\eta, p). \quad (4.1.15)$$

Essa equação representa uma outra forma da equação de Schrödinger independente do tempo no espaço de fase e é semelhante à equação de Schrödinger da Mecânica Quântica usual. Podemos definir o operador Hamiltoniano

$$H(\eta) = \frac{1}{2}p_\eta^2 - \frac{1}{\eta}, \quad (4.1.16)$$

sendo p_η o operador *momentum* definido como

$$p_\eta := -i\hbar \frac{\partial}{\partial \eta} \equiv -\frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q}. \quad (4.1.17)$$

Devemos prestar atenção ao fato que η é um operador diferencial e, portanto, não comuta com p_η . Podemos resolver a equação (4.1.15) por meio de técnicas similares empregadas quando obtemos as soluções para o átomo de hidrogênio tridimensional na usual representação de Schrödinger da Mecânica Quântica. Fazendo as mudanças de variáveis

$$E = -\varepsilon_0 \beta^2, \quad \varepsilon_0 = \frac{1}{2\hbar^2}, \quad (4.1.18)$$

$$\xi = \beta \frac{\eta}{\eta_0}, \quad \eta_0 = \frac{\hbar^2}{2}, \quad (4.1.19)$$

sendo o raio de Bohr (a_0) igual a $2\eta_0 = \hbar^2$ (em nosso sistema de unidades), a equação (4.1.15) é transformada em:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\beta \xi} - \frac{1}{4} \right) \Phi(\xi, p) = 0. \quad (4.1.20)$$

Estabelecendo que ξ deve ser sempre colocado na frente da variável p e considerando a forma da equação acima, assim como a condição de contorno para $\Phi(\xi, p) = \Phi(q, p)$, ou melhor, que Φ seja finita nas fronteiras do espaço de fase, podemos usar o seguinte "*ansatz*":

$$\Phi(\xi, p) = \xi e^{-\frac{\xi}{2}} \Theta(\xi, p). \quad (4.1.21)$$

Portanto, obtemos de (4.1.20) a equação diferencial para Θ , ou seja

$$\xi \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + (2 - \xi) \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} - \left(1 - \frac{1}{\beta} \right) \Theta = 0. \quad (4.1.22)$$

Essa equação diferencial é identificada com a equação das funções hipergeométricas confluentes na variável ξ . As soluções que satisfazem as condições de contorno são dadas por

$$\Theta(\xi, p) = {}_1F_1(1 - n, 2; \xi) h(p), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (4.1.23)$$

onde ${}_1F_1(1-n, 2; \xi)$ são as funções hipergeométricas confluentes na variável ξ e $h(p)$ é uma função arbitrária na variável p , que deve satisfazer a seguinte condição

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dp \left| \frac{d^m}{dp^m} h(p) \right| < \infty, \quad \text{com } m = 0, 1, 2, \dots \quad (4.1.24)$$

O espectro de energia para o sistema em consideração pode ser obtido por meio da equação (4.1.18); de fato, da equação de funções hipergeométrica segue que $n = \beta^{-1}$, e obtemos de (4.1.18)

$$E = -\varepsilon_0 \frac{1}{n^2} = -\frac{\hbar^2}{2a_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{1}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (4.1.25)$$

As transições de energia de um estado excitado para o estado fundamental é dada por

$$\Delta E_n = |E_1| - |E_n| = \varepsilon_0 \left(1 - \frac{1}{n^2} \right). \quad (4.1.26)$$

É possível relacionar as funções hipergeométricas confluentes com os polinômios de Laguerre associados, $L_n^m(\xi)$. Com este fim, notemos que estes polinômios são as soluções regulares da equação diferencial

$$\xi \frac{\partial^2 \Theta}{\partial \xi^2} + (1 + m - \xi) \frac{\partial \Theta}{\partial \xi} - (m - n) \Theta = 0,$$

que para $m = 1$ e $n = 1, 2, 3, \dots$, nos dá a relação:

$$L_n^1(\xi) = n! \, {}_1F_1(1-n, 2; \xi), \quad (4.1.27)$$

onde o polinômio de Laguerre associado $L_n^1(\xi)$ pode ser escrito como [129]

$$L_n^1(\xi) = n e^\xi \frac{\partial^n}{\partial \xi^n} (\xi^{n-1} e^{-\xi}). \quad (4.1.28)$$

Em termos de $L_n^1(\xi)$ a solução da Eq.(4.1.6) tem, então, a forma

$$\Psi_{n>}(\eta, p) = A_n e^{-\frac{2i}{\hbar} q p} \left[\frac{1}{n\eta_0} \eta e^{-\frac{1}{2n\eta_0} \eta} L_n^1 \left(\frac{1}{n\eta_0} \eta \right) \right] h(p), \quad (4.1.29)$$

e, analogamente, para a região em que $q < 0$, obtemos as auto-energias dada pela equação (4.1.25) com suas correspondentes autofunções sendo

$$\Psi_{n<}(\eta, p) = B_n e^{-\frac{2i}{\hbar} q p} \left[\frac{1}{n\eta_0} \eta e^{\frac{1}{2n\eta_0} \eta} L_n^1 \left(-\frac{1}{n\eta_0} \eta \right) \right] h(p) \quad (4.1.30)$$

e $h(p)$ sujeita à condição (4.1.24). Escolhendo algum tipo de $h(p)$ podemos encontrar espécie de soluções particulares em que as partes de posição e *momentum* de Ψ podem ser separadas. Como uma ilustração consideremos o caso em que $h(p)$ seja uma função da forma

$$h(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\frac{8i}{\hbar} \eta_0 p}, \quad (4.1.31)$$

satisfazendo as identidades:

$$\eta^n h(p) = \left(2q + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p} \right)^n h(p) = 2^n (q - 2\eta_0)^n h(p) \quad (4.1.32)$$

e

$$\langle h_{\eta_0'}(p) | h_{\eta_0''}(p) \rangle = \delta(2\eta_0' - 2\eta_0''). \quad (4.1.33)$$

Notamos que a função (4.1.31) não satisfaz a condição (4.1.24) nos limites infinitos; contudo, mostra-se que é sempre possível considerar uma região do espaço de fase em que a integral (4.1.24) para (4.1.31) é finita nessa região[113]. Assim, as quasi-amplitudes de probabilidade no espaço de fase correspondentes à função (4.1.31) são:

$$\Psi_{n>}(q, p) = A_n \left[\frac{2}{n\eta_0} (q - 2\eta_0) e^{-\frac{1}{n\eta_0}(q-2\eta_0)} L_n^1 \left(\frac{2}{n\eta_0} (q - 2\eta_0) \right) \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{2i}{\hbar}(q-4\eta_0)p} \quad (4.1.34)$$

para a região em que $q > 0$ e

$$\Psi_{n<}(q, p) = B_n \left[\frac{2}{n\eta_0} (q - 2\eta_0) e^{\frac{1}{n\eta_0}(q-2\eta_0)} L_n^1 \left(-\frac{2}{n\eta_0} (q - 2\eta_0) \right) \right] \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{2i}{\hbar}(q-4\eta_0)p} \quad (4.1.35)$$

para a região em que $q < 0$. Evidentemente, exceto pelo fator de fase $\exp\left(-\frac{2i}{\hbar}qp\right)$, nota-se nestas duas últimas expressões que as partes das variáveis de posição e *momentum* são completamente separadas uma da outra. Observa-se ainda que as autofunções no espaço de posição podem ser obtidas por meio da **transformada de Fourier**[113]

$$\psi_n(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp e^{\frac{2i}{\hbar}qp} \Psi_n(q, p) \quad (4.1.36)$$

de tal forma que os autovalores de $\Psi_n(q, p)$ não mudam. Os resultados para o espaço de posição são assim:

$$\psi_{n>}(q) = A_n \frac{2}{n\eta_0} q e^{-\frac{1}{n\eta_0}q} L_n^1 \left(\frac{2}{n\eta_0} q \right) \quad (4.1.37)$$

e

$$\psi_{n<}(q) = B_n \frac{2}{n\eta_0} q e^{\frac{1}{n\eta_0}q} L_n^1 \left(-\frac{2}{n\eta_0} q \right) \quad (4.1.38)$$

o que é consistente com os resultados encontrados por Palma e Raff[129] usando outros procedimentos.

Para obter a interpretação física deve-se calcular a função de Wigner, ou seja

$$f_{W>}^{(n)}(q, p) = \Psi_{n>}(q, p) \star \Psi_{n>}^\dagger(q, p). \quad (4.1.39)$$

Em particular, calculemos a função de Wigner para o estado fundamental. Considerando $n = 1$ na expressão (4.1.34), obtemos então a seguinte quasi-amplitude de probabilidade

$$\Psi_{1>}(q, p) = A_1 \left[\frac{2}{\eta_0} (q - 2\eta_0) e^{-\frac{1}{\eta_0}(q-2\eta_0)} \right] e^{-\frac{2i}{\hbar}(q-4\eta_0)p}. \quad (4.1.40)$$

Substituindo (4.1.40) em (4.1.39) e levando em conta a aproximação do produto estrela até a primeira ordem, segue que a função de Wigner para o estado fundamental, nessa aproximação, é

$$f_{W>}^{(1)}(q, p) \approx K \left(\frac{q - 2\eta_0}{\eta_0} \right)^2 e^{-\frac{2}{\eta_0}(q-2\eta_0)}, \quad (4.1.41)$$

onde K é uma constante. Com essa função de Wigner, podemos por exemplo encontrar o máximo da densidade de probabilidade associada à variável de posição. Com efeito, considerando que a densidade de probabilidade é dada pela expressão

$$\sigma(q) = \int dp f_{W>}^{(1)}(q, p), \quad (4.1.42)$$

escolhendo uma região finita no espaço dos *momenta* de tal modo que a integral acima seja finita, mostra-se que a densidade de probabilidade será máxima em

$$\frac{d\sigma}{dq} = 0 \quad \Rightarrow \quad q = 2\eta_0, \quad (4.1.43)$$

onde reconhecemos que $2\eta_0 = \hbar^2 = a_0$ é o raio de Bohr.

Concluindo este capítulo, notaríamos que a tentativa[91] no sentido de aplicar o método acima exposto ao caso tridimensional conduz às mesmas dificuldades (presença da função $h(p)$ arbitrária, separação *ad hoc* das quasi-amplitudes em duas partes, independentes, por exemplo) o que nos motivou a buscar novas propostas para análise do potencial de Coulomb na MQS, tema que trataremos nos capítulos seguintes.

Capítulo 5

Átomo de Hidrogênio Bidimensional

*Podemos dizer que a mecânica quântica é uma deformação da mecânica clássica.
A constante de Planck \hbar é o parâmetro de deformação correspondente.*

Ludwig Faddeev

Neste capítulo, desenvolvemos nossa proposta de análise do potencial coulombiano na Mecânica Quântica Simplética usando átomo de Hidrogênio bidimensional. Existe um grande interesse nesse sistema devido à sua aplicação na física da matéria condensada[15, 102, 107, 157] e na física atômica e molecular[160]; em particular, no ramo da espectroscopia atômica, o átomo de Hidrogênio em duas dimensões tem sido considerado como um modelo simplificado do processo de ionização do átomo de Hidrogênio tridimensional altamente excitado por microondas circularmente polarizadas[160].

5.1 Hamiltoniano do Átomo de Hidrogênio Bidimensional

Para o átomo de Hidrogênio bidimensional a energia potencial é dada por $V_c(q) = -e^2 q^{-1}$, onde $q = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$. Para simplificar a apresentação, suponhamos que as unidades sejam selecionadas de forma que tanto a carga e , quanto a massa m , tenham valor unitário. Com essa escolha de unidades, o hamiltoniano clássico correspondente ao sistema é

$$H_c = (2^{-1}p^2 - kq^{-1}), \tag{5.1.1}$$

onde $p^2 = p_1^2 + p_2^2$, e k é uma constante positiva. Na representação da Mecânica Quântica Simplética o hamiltoniano $H_c(q, p)$ é escrito da seguinte forma

$$H(\hat{Q}, \hat{P}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 \left(p_i - \frac{i}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \right)^2 + V(q_1^*, q_2^*) \quad (5.1.2)$$

e, conseqüentemente, é difícil determinar soluções da equação de Schrödinger no espaço de fase para o potencial de Coulomb. Para resolver esse problema, propomos um procedimento baseado na conexão entre o problema de Coulomb no plano em coordenadas parabólicas e o oscilador harmônico bidimensional em coordenadas cartesianas [61]. Especificamente, com nossa notação, seja $\mathbb{U} = \mathbb{R}^2, \mathbb{X} = \mathbb{R}^2, \mathbb{U}^* = \mathbb{U} \setminus \{0\}, \mathbb{X}^* = \mathbb{X} \setminus \{0\}$, i.e., $u^t \equiv (u_1, u_2), x^t \equiv (q_1, q_2)$ e

$$T(u) := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} u_1 & -u_2 \\ u_2 & u_1 \end{pmatrix}, \quad u \in \mathbb{U}^*. \quad (5.1.3)$$

A transformação de Levi-Civita (ou Bohlin)[110, 111, 23], que usaremos na proposta, é dada por

$$f: \mathbb{U}^* \rightarrow \mathbb{X}^*, \quad x = f(u) = T(u)u. \quad (5.1.4)$$

As colunas da matriz $T(u)$ formam um sistema ortogonal analítico para \mathbb{U}^* . Um teorema de Hurwitz [87, 86] indica que a matriz quadrada $T(u)$ satisfaz três propriedades as quais podem ser mostradas por cálculos diretos: $T(u)$ tem inversa para todo $u \neq 0$, $T(u)$ é linear em u , e uma das colunas de $T(u)$ é u . Explicitamente temos a seguinte transformação

$$x = T(u)u = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(u_1^2 - u_2^2) \\ u_1 u_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \end{pmatrix}, \quad (5.1.5)$$

com $q = u^2, q = \sqrt{q_1^2 + q_2^2}$, e $u^2 = u_1^2 + u_2^2$. Assim, de acordo com a transformação de Levi-Civita[104, 100] o plano (u_1, u_2) é o "*double covering*" do plano (q_1, q_2) . Portanto, os pontos (u_1, u_2) e $(-u_1, -u_2)$ representam o mesmo ponto do plano (q_1, q_2) e as funções devem satisfazer $\psi(u_1, u_2) = \psi(-u_1, -u_2)$. Podemos ainda observar que a **aplicação de Levi-Civita** é uma transformação para as coordenadas parabólicas e leva o espaço plano q ao espaço plano u . A relação inversa obtida de (5.1.5) é

$$u_1 = \pm (q_1 + q)^{\frac{1}{2}} \quad (5.1.6)$$

e

$$u_2 = \frac{q_2}{u_1}, \quad (5.1.7)$$

dando as coordenadas parabólicas u_i em termos das coordenadas cartesianas. Através do desenvolvimento de

$$dq^t dq = 4du^t T^t T du, \quad (5.1.8)$$

obtemos

$$dq_1^2 + dq_2^2 = q \left(du_1^2 + du_2^2 \right). \quad (5.1.9)$$

Verifica-se também que[100]

$$\frac{\partial}{\partial u} = 2T^t \frac{\partial}{\partial q}, \quad (5.1.10)$$

o que pode ser invertido para encontrarmos

$$\frac{\partial}{\partial q} = \frac{2}{q} T \frac{\partial}{\partial u}. \quad (5.1.11)$$

Aplicando essa transformação $T(u)$ ao hamiltoniano clássico H_c , Eq.(5.1.1), obtemos em termos das coordenadas parabólicas (u_1, u_2) , definidas por $q_1 = \frac{1}{2}(u_1^2 - u_2^2)$ e $q_2 = u_1 u_2$, o seguinte hamiltoniano:

$$H_c = \frac{1}{2} \frac{1}{u_1^2 + u_2^2} \left(P_1^2 + P_2^2 \right) - \frac{2k}{u_1^2 + u_2^2}, \quad (5.1.12)$$

onde P_1 e P_2 são os *momenta* canonicamente conjugados a u_1 e u_2 , respectivamente. Em consequência, a hipersuperfície no espaço de fase definida por $H_c = E$ corresponde a

$$\frac{1}{2} \left(P_1^2 + P_2^2 \right) - E \left(u_1^2 + u_2^2 \right) = 2k, \quad (5.1.13)$$

isto é, $H_c = E$ é equivalente à condição $h_E = 2k$, onde

$$h_E = \frac{1}{2} \left(P_1^2 + P_2^2 \right) - E \left(u_1^2 + u_2^2 \right) \quad (5.1.14)$$

é um Hamiltoniano auxiliar que depende parametricamente de E , e é da forma de um oscilador bidimensional no plano (x, y) se $E < 0$, com (u_1, u_2) no lugar de (x, y) , e E tomando o lugar de $\frac{\omega^2}{2}$. Então, consideramos o hamiltoniano definido da seguinte forma

$$H_{ho} := q \left(H_c - E \right) \quad (5.1.15)$$

para estudar o átomo de Hidrogênio bidimensional na descrição da mecânica quântica no espaço de fase. Neste contexto, determinaremos as amplitudes de probabilidade $\Psi(u_1, u_2)$ e, portanto, a

função de Wigner $f_w(u_1, u_2) = \Psi(u_1, u_2) \star \Psi^\dagger(u_1, u_2)$. Para isso, no entanto, é necessário analisar o produto estrela. Na verdade, usando

$$T^t(u) := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} u_1 & u_2 \\ -u_2 & u_1 \end{pmatrix}, \quad (5.1.16)$$

podemos mostrar por meio de um cálculo direto que

$$P_1 = u_1 p_1 + u_2 p_2, \quad (5.1.17)$$

$$P_2 = -u_2 p_1 + u_1 p_2 \quad (5.1.18)$$

obtendo que

$$\overleftarrow{\partial}_q \cdot \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \cdot \overrightarrow{\partial}_q = \overleftarrow{\partial}_u \cdot \overrightarrow{\partial}_P - \overleftarrow{\partial}_P \cdot \overrightarrow{\partial}_u. \quad (5.1.19)$$

Além disso, temos os seguintes parênteses de Poisson:

$$\{u_i, u_j\} = 0, \quad \{u_i, P_j\} = \delta_{ij}, \quad e \quad \{P_i, P_j\} = 0, \quad (5.1.20)$$

com (i, j) referindo-se às direções (u_1, u_2) , respectivamente.

Tendo o Hamiltoniano para o átomo de Hidrogênio bidimensional no espaço de fase, o processo de quantização da Mecânica Quântica Simplética considera os operadores de posição e *momentum* como $\hat{U} = u \star = u + \frac{i\hbar}{2} \partial_P$ e $\hat{P} = P \star = P - \frac{i\hbar}{2} \partial_u$, respectivamente. O que nos dá:

$$H_{ho\star} = \frac{1}{2} \left(P_1 - \frac{i\hbar}{2} \partial_{u_1} \right)^2 + \frac{1}{2} \left(P_2 - \frac{i\hbar}{2} \partial_{u_2} \right)^2 - E \left(u_1 + \frac{i\hbar}{2} \partial_{P_1} \right)^2 - E \left(u_2 + \frac{i\hbar}{2} \partial_{P_2} \right)^2 - 2k.$$

Segue então que temos a resolver a equação das quasi-amplitudes, ou seja,

$$H_{oh} \star \Psi = 0, \quad (5.1.21)$$

onde, com esse objetivo, assumimos que $\Psi(u, P) = f_1(u_1, P_1) f_2(u_2, P_2)$. Em consequência, obtemos duas equações diferenciais

$$\left(\left(P_1 - \frac{i\hbar}{2} \partial_{u_1} \right)^2 + W \left(u_1 + \frac{i\hbar}{2} \partial_{P_1} \right)^2 - 2K_1 \right) f_1 = 0, \quad (5.1.22)$$

$$\left(\left(P_2 - \frac{i\hbar}{2} \partial_{u_2} \right)^2 + W \left(u_2 + \frac{i\hbar}{2} \partial_{P_2} \right)^2 - 2K_2 \right) f_2 = 0, \quad (5.1.23)$$

onde $W = -2E$, e introduzimos duas constantes de separação K_1 e K_2 , tal que $K_1 + K_2 = 2k$. Essas equações separadas são semelhantes à equação diferencial para o oscilador harmônico unidimensional no espaço de fase e admitem soluções[101, 159]. Uma análise de sua estrutura mostra que a energia E aparece como um fator precisamente no local onde a frequência clássica do oscilador geralmente aparece, e as constantes de separação aparecem na posição geralmente ocupada pelo autovalor de energia. Para resolver as equações (5.1.22) e (5.1.23) usaremos o método analítico. Assim, vamos separar cada equação em sua parte imaginária e sua parte real. Realizando essa separação, a parte imaginária das equações acima é nula, ou seja,

$$(P\partial_u - Wu\partial_P)f = 0 \quad (5.1.24)$$

e nota-se que f depende de apenas de uma variável, isto é

$$z = \frac{2H}{\hbar} = \frac{2}{\hbar} \left(W^{-\frac{1}{2}}u^2 + W^{\frac{1}{2}}P^2 \right). \quad (5.1.25)$$

Então, a parte real da equação reduz-se a uma equação diferencial ordinária da forma:

$$\left(\frac{z}{4} - \partial_z - z\partial_z^2 - \frac{K}{\hbar W^{\frac{1}{2}}} \right) f(z) = 0, \quad (5.1.26)$$

onde K é K_1 ou K_2 . Além disso, propondo $f(z) = e^{-\frac{z}{2}}L(z)$ obtemos a seguinte equação

$$\left[z\partial_z^2 + (1-z)\partial_z + \left(\frac{K}{\hbar W^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \right) \right] L(z) = 0, \quad (5.1.27)$$

que é a **equação diferencial de Laguerre**. Essa equação é satisfeita pelos **polinômios de Laguerre**, ou seja,

$$L_n(z) = \frac{1}{n!} e^z \partial_z^n (z^n e^{-z}), \quad (5.1.28)$$

com a condição

$$n = \frac{K}{\hbar W^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} = 0, 1, 2, \dots \quad (5.1.29)$$

Como é conhecido[84, 159] os **polinômios de Laguerre** não formam um conjunto ortogonal. Contudo, podemos relaciona-los ao conjunto de funções do tipo:

$$f_n(z) = e^{-\frac{z}{2}} L_n(z), \quad (5.1.30)$$

e esse conjunto é ortogonal no intervalo $0 \leq z < \infty$, isto é,

$$\int_0^\infty e^{-z} L_m(z) L_n(z) dz = \delta_{n,m}.$$

Entre as propriedades dessas autofunções observa-se que não são positivas definidas e satisfazem as seguintes condições de contorno: $L(z=0)$ é finito e $\lim_{z \rightarrow \infty} L(z) \rightarrow 0$. Em consequência, com o requisito das condições de contorno para as funções, obtemos as seguintes restrições sobre os valores das constantes de separação:

$$\frac{K_1}{\hbar W^{\frac{1}{2}}} = n_1 + \frac{1}{2}, \quad (5.1.31)$$

$$\frac{K_2}{\hbar W^{\frac{1}{2}}} = n_2 + \frac{1}{2}, \quad (5.1.32)$$

com $n_1, n_2 = 0, 1, 2, \dots$. Conseqüentemente, as frequências e os níveis de energia (com $k = 1$) satisfazem obrigatoriamente as expressões:

$$W_{n_1, n_2} = \left[\frac{1}{\hbar} \left(\frac{2}{n_1 + n_2 + 1} \right) \right]^2, \quad (5.1.33)$$

e

$$E_{n_1, n_2} = -\frac{1}{2\hbar^2} \left(\frac{n_1 + n_2 + 1}{2} \right)^{-2}, \quad (5.1.34)$$

respectivamente, quando as constantes de separação são eliminadas das equações (5.1.31) e (5.1.32). Com esses resultados nota-se que o conjunto de estados se divide em subvariedades degeneradas, cada uma caracterizada por um valor particular de $n = n_1 + n_2$, sendo a degenerescência dessas subvariedades dada por $d_n = n + 1$. Esse padrão de degenerescência é uma manifestação direta da simetria unitária do oscilador isotrópico[64, 96, 95, 97, 118]: a n -ésima representação irreduzível de $SU(2)$ tem dimensão $n + 1$ [76], ou seja, cada uma delas aparece exatamente uma vez no espectro do oscilador isotrópico. Observe que o grupo de rotação tridimensional[156], cujas representações irreduzíveis são sempre de dimensão ímpar ($d_l = 2l + 1$, $l = 0, 1, 2, \dots$), não pode reproduzir adequadamente as degenerescências observadas no espectro do oscilador isotrópico. É bem conhecido[83] que $SU(2)$ é o "*double covering*" do grupo $SO(3)$. Isto significa que: $SO(3)$ e $SU(2)$ são localmente isomórficos; contudo, $SU(2)$, e não $SO(3)$, é o grupo de simetria correto para o oscilador isotrópico[35, 64, 95, 96, 97, 118]. Para completar a discussão, consideremos a inversão no espaço u , o que nos dá:

$$\psi(-u) = (-1)^{n_1+n_2} \psi(u). \quad (5.1.35)$$

Como as variáveis q_j são funções pares de u_j , a inversão de u não causa efeitos no espaço físico de q_j e, portanto, por (5.1.35), apenas os estados com $n_1 + n_2 = 2n$ devem corresponder às soluções do

átomo de Hidrogênio 2D. Em consequência, considerando (5.1.25) e (5.1.30) as expressões analíticas para f_{n_1} e f_{n_2} têm as seguintes formas:

$$f_{n_1} = \frac{(-1)^{n_1}}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{H_{n_1, n_2}(\bar{u}_1, \bar{P}_1)}{\hbar}\right) L_{n_1}\left(\frac{2H_{n_1, n_2}(\bar{u}_1, \bar{P}_1)}{\hbar}\right), \quad (5.1.36)$$

$$f_{n_2} = \frac{(-1)^{n_2}}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{H_{n_1, n_2}(\bar{u}_2, \bar{P}_2)}{\hbar}\right) L_{n_2}\left(\frac{2H_{n_1, n_2}(\bar{u}_2, \bar{P}_2)}{\hbar}\right), \quad (5.1.37)$$

onde

$$H_{n_1, n_2}(\bar{u}_i, \bar{P}_i) = \frac{1}{\hbar} \bar{u}_i^2 + \hbar \bar{P}_i^2 \equiv H_{n_1, n_2}^{(i)}, \quad (5.1.38)$$

e as variáveis do argumento das funções são definidas por

$$\bar{u}_i = \left(\frac{2}{n_1 + n_2 + 1}\right)^{\frac{1}{2}} u_i, \quad (5.1.39)$$

$$\bar{P}_i = \left(\frac{2}{n_1 + n_2 + 1}\right)^{-\frac{1}{2}} P_i. \quad (5.1.40)$$

Uma observação sobre a origem desses fatores de multiplicação é relevante: na equação de Schrödinger no espaço de fase para o oscilador harmônico, a frequência é o fator multiplicador de u^2 , enquanto a energia quantizada é o termo constante da equação diferencial semelhante à Eq.(5.1.22); no presente desenvolvimento é E que multiplica u^2 , e a constante de separação é que é "quantizada". Assim, a constante de energia E entra como fator de escala para o argumento da função, no lugar onde a frequência clássica normalmente aparece. Como consequência, temos que os autovalores de energia entram no argumento da autofunção, bem como nos índices dos polinômios de Laguerre que compreendem parte das autofunções. A solução final da equação de Schrödinger no espaço de fase é dada, portanto, pela seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \Psi_{n_1, n_2} = f_{n_1} f_{n_2} = & \frac{1}{(\pi\hbar)^2} (-1)^{n_1+n_2} \times \\ & \exp\left(\frac{-1}{\hbar} (H_{n_1, n_2}(\bar{u}_1, \bar{P}_1) + H_{n_1, n_2}(\bar{u}_2, \bar{P}_2))\right) \times \\ & L_{n_1}\left(\frac{2H_{n_1, n_2}(\bar{u}_1, \bar{P}_1)}{\hbar}\right) L_{n_2}\left(\frac{2H_{n_1, n_2}(\bar{u}_2, \bar{P}_2)}{\hbar}\right); \end{aligned} \quad (5.1.41)$$

onde

$$L_0 = 1, \quad L_1 = 1 - \frac{2H_{n_1, n_2}}{\hbar}, \quad L_2 = \frac{4H_{n_1, n_2}^2}{\hbar^2} - \frac{8H_{n_1, n_2}}{\hbar} + 1, \dots \quad (5.1.42)$$

Para interpretar fisicamente nosso resultado devemos associamos $\Psi(u, P)$ com a função de Wigner, $f_w(u, P)$, que é dada pela expressão[63, 128, 159]

$$f_w = \Psi(u, P) \star \Psi^\dagger(u, P).$$

Na Mecânica Quântica Simplética, a função de Wigner satisfaz também a equação de Schrödinger no espaço de fase [159] e determina a densidade de probabilidade tanto no espaço de configuração,

$$\rho(u) = \int dP \Psi(u, P) \star \Psi^\dagger(u, P) = \int dp \Psi(u, P) \Psi^\dagger(u, P),$$

como no espaço de *momentum*,

$$\rho(P) = \int du \Psi(u, P) \star \Psi^\dagger(u, P) = \int dq \Psi(u, P) \Psi^\dagger(u, P).$$

Portanto, a função de Wigner geral para o nosso problema é dada por

$$f_w^{(n)}(u, P) = \Psi_{n_1, n_2}(u, P) \star \Psi_{n_1, n_2}^\dagger(u, P), \quad (5.1.43)$$

ou seja,

$$\begin{aligned} f_w^{(n)}(u, P) = & \frac{1}{(\pi\hbar)^2} L_{n_1} \left(\frac{2H_{n_1, n_2}^{(1)}}{\hbar} \right) L_{n_2} \left(\frac{2H_{n_1, n_2}^{(2)}}{\hbar} \right) \times \\ & \exp \left(\frac{-1}{\hbar} (H_{n_1, n_2}^{(1)} + H_{n_1, n_2}^{(2)}) \right) \star \\ & \exp \left(\frac{-1}{\hbar} (H_{n_1, n_2}^{(1)} + H_{n_1, n_2}^{(2)}) \right) \times \\ & L_{n_1} \left(\frac{2H_{n_1, n_2}^{(1)}}{\hbar} \right) L_{n_2} \left(\frac{2H_{n_1, n_2}^{(2)}}{\hbar} \right). \end{aligned} \quad (5.1.44)$$

Desenvolvendo em (5.1.44) a função exponencial em série de Taylor, utilizando as propriedades do produto estrela e as seguintes expressões

$$\sum_{i=1}^2 H_{n_1, n_2}^{(i)} \star \Psi_{n_1, n_2} = 4\hbar \left(\frac{n_1 + n_2 + 1}{2} \right) \Psi_{n_1, n_2}. \quad (5.1.45)$$

e

$$H_{n_1, n_2}^{(i)} f_{n_1, n_2}^{(i)} = 2 \left(\frac{2n_i + 1}{n_1 + n_2 + 1} \right) f_{n_1, n_2}^{(i)}, \quad (5.1.46)$$

com $i = 1, 2$, obtemos a expressão analítica para a n -ésima função de Wigner, isto é,

$$\begin{aligned}
f_w^{(n)} &\sim \exp \left[-4 \left(\frac{n_1 + n_2 + 1}{2} \right) \right] \times \\
&L_{n_1} \left(\frac{4}{\hbar} \left(\frac{2n_1 + 1}{n_1 + n_2 + 1} \right) \right) L_{n_2} \left(\frac{4}{\hbar} \left(\frac{2n_2 + 1}{n_1 + n_2 + 1} \right) \right) \times \\
&L_{n_1} \left(\frac{2H_{n_1, n_2}^{(1)}}{\hbar} \right) L_{n_2} \left(\frac{2H_{n_1, n_2}^{(2)}}{\hbar} \right) \times \\
&\exp \left(\frac{-1}{\hbar} \left(H_{n_1, n_2}^{(1)} + H_{n_1, n_2}^{(2)} \right) \right),
\end{aligned} \tag{5.1.47}$$

ou seja, neste caso, temos

$$f_w^{(n)}(u, P) = \Psi_{n_1, n_2} \star \Psi_{n_1, n_2} \sim \Psi_{n_1, n_2}. \tag{5.1.48}$$

Observe que o produto estrela \star "projeta" os estados Ψ s neles mesmos. Por exemplo, o estado fundamental ($n = 0$) e o estado degenerado excitado ($n = 2$) da função de Wigner, para o potencial de Coulomb 2D, são dadas, respectivamente, por:

$$\begin{aligned}
f_w^{(0)}(u, P) &= \Psi_{0,0} \star \Psi_{0,0}^\dagger \sim \Psi_{0,0} = \\
&\frac{1}{(\pi\hbar)^2} \exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \sum_{j=1}^2 \left(\frac{\hbar}{2} P_j^2 + \frac{2}{\hbar} u_j^2 \right) \right\}
\end{aligned} \tag{5.1.49}$$

e

$$\begin{aligned}
f_w^{(2)}(u, P) &\sim \Psi_{1,1} = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} \times \\
&\left[1 - \frac{2}{\hbar} \left(\frac{3\hbar}{2} P_1^2 + \frac{2}{3\hbar} u_1^2 \right) \right] \times \\
&\left[1 - \frac{2}{\hbar} \left(\frac{3\hbar}{2} P_2^2 + \frac{2}{3\hbar} u_2^2 \right) \right] \times \\
&\exp \left\{ \frac{-1}{\hbar} \sum_{j=1}^2 \left(\frac{3\hbar}{2} P_j^2 + \frac{2}{3\hbar} u_j^2 \right) \right\}.
\end{aligned} \tag{5.1.50}$$

Nesse caso, as funções de Wigner têm relação direta com as soluções encontradas para as amplitudes; isso é consistente, já que elas obedecem a mesma equação de autovalores. Uma análise do comportamento dessas funções mostra que $f_w^{(0)}$ é positiva em todos os pontos do espaço de fase e $f_w^{(2)}$ é positiva na origem. A n -ésima função de Wigner, Eq.(5.1.48), é invariante sob rotações em torno da origem e também pode ser escrita em termos dos polinômios de Hermite[136].

Como conclusão desse capítulo temos que nossa proposta mostra-se efetiva na obtenção de soluções da equação de Schrödinger no espaço de fase para o potencial de Coulomb no plano, possibilitando determinar as quasi-amplitudes, as funções de Wigner e o espectro do átomo de Hidrogênio bidimensional[27].

Capítulo 6

Átomo de Hidrogênio Tridimensional

*Chegamos agora à questão crucial para toda a nova teoria:
ela é capaz de explicar as propriedades do átomo de hidrogênio?*

Max Born

*O espectro do átomo de hidrogênio provou ser
a pedra de Rosetta¹ da física moderna.*

T. W. Hänsch, A. L. Schawlow e G. W. Series

Neste capítulo, iremos apresentar nossa proposta para tratar do átomo de Hidrogênio tridimensional segundo o formalismo da Mecânica Quântica Simplética. É importante observar que em qualquer outro formalismo da Mecânica Quântica no espaço de fase, a função de Wigner deste sistema físico não é conhecida em sua forma analítica fechada. Na descrição de Schrödinger da Mecânica Quântica usual, as autofunções são escritas como funções das variáveis de posição ou *momentum*. Assim, apesar da existência das expressões analíticas para as autofunções do átomo de Hidrogênio, nas representações de posição e de *momentum*[22], uma forma analítica fechada da função de Wigner para o átomo de Hidrogênio 3D é, pelo melhor de nosso conhecimento, desconhecida. Neste contexto o nosso objetivo principal é encontrar uma forma analítica fechada para a função de Wigner[28]. Nosso desenvolvimento a ser apresentado baseia-se na transformação

¹Uma pedra inscrita encontrada perto de Rosetta na foz ocidental do Nilo em 1799. Seu texto está escrito em três roteiros: hieroglífico, demótico e grego. A decifração dos hieróglifos por Jean-François Champollion em 1822 levou à interpretação de muitos outros registros antigos da civilização egípcia.

Kustaanheimo-Stiefel. Essa transformação é obtida através da generalização da transformação de Levi-Civita [110, 111] usada no caso bidimensional. Com esse procedimento transformaremos o problema de Coulomb 3D no problema do oscilador harmônico 4D e obteremos a equação de Schrödinger no espaço de fase sujeita a um vínculo. Suas soluções, assim como as funções de Wigner correspondentes, serão determinadas, o mesmo ocorrendo com o espectro.

6.1 Hamiltoniano do Átomo Hidrogênio Tridimensional

O hamiltoniano clássico para o átomo de Hidrogênio tridimensional é

$$H_c = \frac{\mathbf{p}^2}{2\mu} - \frac{\kappa}{q}, \quad (6.1.1)$$

onde μ é a massa reduzida, κ é uma constante positiva igual a Ze^2 ($Z = 1$), $\mathbf{p}^2 = \sum_{i=1}^3 p_i^2$, os q_i s representam as coordenadas cartesianas e $q = \sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}$. Para simplificar a apresentação, suponhamos que as unidades sejam selecionadas de forma que tanto a carga e , quanto a massa μ , tenham valor unitário. Com essa escolha de unidades, na representação da Mecânica Quântica Simplética para $H_c(q, p)$, temos

$$H(\hat{Q}, \hat{P}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left(p_i - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q_i} \right)^2 + V(q_{1\star}, q_{2\star}, q_{3\star}) \quad (6.1.2)$$

e, conseqüentemente, é difícil determinar soluções da equação de Schrödinger no espaço de fase. Para resolver esse problema, vamos considerar a transformação Kustaanheimo-Stiefel. Especificamente, com nossa notação, temos

$$\mathbb{U} = \mathbb{R}^4, \quad \mathbb{Q} = \mathbb{R}^3, \quad \mathbb{U}^* = \mathbb{U} \setminus \{0\}, \quad \mathbb{Q}^* = \mathbb{Q} \setminus \{0\}$$

e

$$T(\mathbf{u}) := \frac{1}{2} \begin{pmatrix} u_3 & -u_4 & u_1 & -u_2 \\ u_4 & u_3 & u_2 & u_1 \\ u_1 & u_2 & -u_3 & -u_4 \\ u_2 & -u_1 & -u_4 & u_3 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{u} \in \mathbb{U}^*. \quad (6.1.3)$$

A transformação Kustaanheimo-Stiefel é dada por

$$f : \mathbb{U}^* \rightarrow \mathbb{Q}^*,$$

ou seja,

$$\mathbf{q} = T(\mathbf{u}) \mathbf{u}, \quad (6.1.4)$$

onde a quarta componente de \mathbf{q} , como a imagem da transformação de \mathbf{u} , é identicamente nula. Segue que essa transformação nos dá:

$$\begin{aligned} q_1 &= u_1 u_3 - u_2 u_4, \\ q_2 &= u_1 u_4 + u_2 u_3, \\ q_3 &= \frac{1}{2} (u_1^2 + u_2^2 - u_3^2 - u_4^2). \end{aligned} \quad (6.1.5)$$

As propriedades principais dessa matriz quadrada T são:

(i) $T(\mathbf{u})$ é uma matriz que tem inversa para todos $\mathbf{u} \neq 0$, e vetores das colunas ou vetores das linhas de $T(\mathbf{u})$ são ortogonais entre si.

(ii) A matriz inversa é dada por:

$$T^{-1} = \frac{4}{\rho} T^t, \quad (6.1.6)$$

onde o t representa a transposta da matriz e

$$\frac{\rho}{2} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^4 u_{\alpha}^2 = \left(\sum_{i=1}^3 q_i^2 \right)^{\frac{1}{2}} = q; \quad (6.1.7)$$

(iii) O determinante de T é dado por

$$\det T = -\frac{1}{2^4} \rho^2. \quad (6.1.8)$$

Observemos que essa transformação pode ser parametrizada como

$$\begin{aligned} u_1 &= \sqrt{q} \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi + \phi}{2}, \\ u_2 &= \sqrt{q} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi + \phi}{2}, \\ u_3 &= \sqrt{q} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi - \phi}{2}, \\ u_4 &= \sqrt{q} \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi - \phi}{2}, \end{aligned} \quad (6.1.9)$$

onde θ, φ e ϕ são coordenadas angulares de uma esfera tridimensional S^3 , com θ e φ sendo as coordenadas esféricas usuais de uma esfera bidimensional S^2 . ϕ é interpretado como a quarta

variável nessa parametrização. Com as equações (6.1.5) e (6.1.9) obtemos as coordenadas esféricas de \mathbb{R}^3 :

$$\begin{aligned}q_1 &= q \sin \theta \cos \varphi, \\q_2 &= q \sin \theta \sin \varphi, \\q_3 &= q \cos \theta.\end{aligned}\tag{6.1.10}$$

Usando (6.1.3) e (6.1.9) podemos considerar a aplicação diferencial

$$\begin{pmatrix} dq_1 \\ dq_2 \\ dq_3 \\ dq_4 \end{pmatrix} = 2T \begin{pmatrix} du_1 \\ du_2 \\ du_3 \\ du_4 \end{pmatrix},\tag{6.1.11}$$

onde q_4 é uma "coordenada falsa", de modo que dq_4 não é uma diferencial total. Ao calcular $dq^t dq = 4du^t T^t T du$, obtemos

$$\sum_{\alpha=1}^4 dq_\alpha^2 = \rho \sum_{\alpha=1}^4 du_\alpha^2.\tag{6.1.12}$$

Da relação (6.1.11) derivamos a transformação dos *momenta*, isto é:

$$\mathbf{p} = \begin{pmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \end{pmatrix} = \frac{2}{\rho} T \begin{pmatrix} P_1 \\ P_2 \\ P_3 \\ P_4 \end{pmatrix} = \frac{2}{\rho} T \mathbf{P}.\tag{6.1.13}$$

Segue, por coerência, que a introdução de um grau de liberdade auxiliar, que transforma o problema originalmente tridimensional em um problema de quatro dimensões, implica uma restrição no *momentum* p_4 , ou seja, devemos ter:

$$p_4 = \frac{1}{\rho} (u_2 P_1 - u_1 P_2 - u_4 P_3 + u_3 P_4) = 0,\tag{6.1.14}$$

ou, em termos dos componentes do *momentum* angular ordinário L_{ij} em \mathbb{U}^* ,

$$L_{12} = u_1 P_2 - u_2 P_1 = u_3 P_4 - u_4 P_3 = L_{34}.\tag{6.1.15}$$

Por outro lado, se as relações (6.1.5) e (6.1.13) definem uma transformação canônica, então os **parênteses de Poisson** devem ser independentes das coordenadas do espaço de fase em que são

avaliados. Assim, os **parênteses de Poisson** no sistema u, P obtemos as seguintes relações

$$\begin{aligned} \{q_i, q_j\} &= 0, \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij}, \quad \{q_i, p_4\} = 0, \\ \{p_i, p_j\} &= \sum_{k=1}^3 \epsilon_{ijk} \frac{q_k}{q^2} p_4, \quad \{p_i, p_4\} = \frac{q_i}{q^2} p_4, \end{aligned} \quad (6.1.16)$$

com (i,j,k) referindo-se às direções (q_1, q_2, q_3) , respectivamente. Dessas relações temos, portanto, que a transformação Kustaanheimo-Stiefel $q, p \rightarrow u, P$, definida pelas equações (6.1.5) e (6.1.13)), é uma transformação canônica se e somente se $p_4 = 0$, que é o vínculo dado pela relação (6.1.14). Para um estudo mais detalhado das propriedades dessa condição de vínculo o leitor pode consultar, por exemplo, as referências [25, 24, 40, 39].

Aplicando a transformação Kustaanheimo-Stiefel e a condição de vínculo, Eq.(6.1.14), ao hamiltoniano clássico (6.1.1), com $\mu = 1$, podemos escrever H_c em termos das novas coordenadas \mathbf{u} definidas pela Eq.(6.1.5). Assim, obtemos

$$H_c = \frac{1}{2\rho} \sum_{i=1}^4 P_i^2 + \frac{2\kappa}{\rho}, \quad (6.1.17)$$

onde os P_i 's são os *momenta canonicamente conjugados* às coordenadas u_i 's, respectivamente. Consequentemente, temos que a hipersuperfície no espaço de fase definido por $H_c = E$ corresponde a

$$\frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 P_i^2 - E \sum_{i=1}^4 u_i^2 = 2\kappa, \quad (6.1.18)$$

ou seja, $H_c = E$ é equivalente à condição $h_E = 2\kappa$, onde

$$h_E = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 P_i^2 - E \sum_{i=1}^4 u_i^2 \quad (6.1.19)$$

é um hamiltoniano auxiliar que depende parametricamente de E , e tem a forma de um oscilador quadridimensional isotrópico se $E < 0$. Nosso interesse é nos estados ligados, onde E assume o lugar de $\frac{\omega^2}{2}$.

Consideremos, então, o hamiltoniano

$$H_{ho} = \rho (H_c - E) \quad (6.1.20)$$

e o processo de quantização simplética para estudar o átomo de Hidrogênio 3D. Nosso objetivo é determinar as quasi-amplitudes de probabilidade $\Psi(\mathbf{u}, \mathbf{P})$ e, portanto, a quasi-distribuição função

de Wigner $f_w(\mathbf{u}, \mathbf{P}) = \Psi(\mathbf{u}, \mathbf{P}) \star \Psi^\dagger(\mathbf{u}, \mathbf{P})$. Nesse contexto devemos observar o fato de que a transformação Kustaanheimo-Stiefel preserva os parênteses de Poisson, o que nos assegura que:

$$\sum_{i=1}^3 \left(\overleftarrow{\partial}_{q_i} \overrightarrow{\partial}_{p_i} - \overleftarrow{\partial}_{p_i} \overrightarrow{\partial}_{q_i} \right) = \sum_{\alpha=1}^4 \left(\overleftarrow{\partial}_{u_\alpha} \overrightarrow{\partial}_{P_\alpha} - \overleftarrow{\partial}_{P_\alpha} \overrightarrow{\partial}_{u_\alpha} \right) \quad (6.1.21)$$

e a estrutura algébrica baseada no produto estrela. Assim, pela Mecânica Quântica Simplética, temos o seguinte sistema de equações

$$H_{ho} \star \Psi = \rho(H_c - E) \star \Psi = 0, \quad (6.1.22)$$

$$(L_{34} - L_{12}) \star \Psi = (u_2 P_1 - u_1 P_2 - u_4 P_3 + u_3 P_4) \star \Psi = 0, \quad (6.1.23)$$

$$\Psi = \Psi^\dagger, \text{ and } \Psi \star \Psi^\dagger \propto \Psi. \quad (6.1.24)$$

Para resolver as Eqs. (6.1.22) e (6.1.23), suponhamos que Ψ tenha a seguinte forma

$$\Psi(\mathbf{u}, \mathbf{P}) = f(u_1, u_2, P_1, P_2) g(u_3, u_4, P_3, P_4). \quad (6.1.25)$$

Introduzindo então duas constantes de separação K_{12} e K_{34} tais que $K_{12} + K_{34} = 2\kappa$ e considerando que $\omega^2 := -2E$, as equações (6.1.22) e (6.1.23) nos dão quatro equações diferenciais, a saber:

$$\left[\frac{1}{2} \left(\sum_{j=1}^2 P_j^2 \right) + \frac{\omega^2}{2} \sum_{j=1}^2 u_j^2 \right] \star f = K_{12} f, \quad (6.1.26)$$

$$L_{12} \star f = (u_1 P_2 - u_2 P_1) \star f = M f, \quad (6.1.27)$$

$$\left[\frac{1}{2} \left(\sum_{j=3}^4 P_j^2 \right) + \frac{\omega^2}{2} \sum_{j=3}^4 u_j^2 \right] \star g = K_{34} g, \quad (6.1.28)$$

$$L_{34} \star g = (u_3 P_4 - u_4 P_3) \star g = M g, \quad (6.1.29)$$

onde M é uma constante. Essas equações, como se nota, são similares às equações diferenciais para osciladores harmônicos bidimensionais isotrópicos no espaço de fase e seus momentos angulares, respectivamente.

Com o objetivo de explorar a relação (6.1.23) para obter as soluções do sistema de equações (6.1.26-29) vamos considerar o problema de autovalor, algebricamente, através da abordagem de operadores de criação e aniquilação[128]. Notamos nesse sentido que nosso problema de autovalor é um problema de diagonalização simultânea em relação às funções dinâmicas H e L . Para encontrar os autovalores para esse problema, façamos a seguinte transformação canônica linear[17, 12]

$$v_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\omega^{\frac{1}{2}} u_1 + \omega^{-\frac{1}{2}} P_2), \quad \pi_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(\omega^{\frac{1}{2}} u_2 - \omega^{-\frac{1}{2}} P_1), \quad (6.1.30)$$

$$v_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\omega^{\frac{1}{2}} u_1 - \omega^{-\frac{1}{2}} P_2), \quad \pi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\omega^{\frac{1}{2}} u_2 + \omega^{-\frac{1}{2}} P_1), \quad (6.1.31)$$

conjuntamente com as funções

$$b_1 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (v_1 + i\pi_1) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (a_1 - ia_2), \quad (6.1.32)$$

$$b_2 = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (v_2 + i\pi_2) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (a_1 + ia_2), \quad (6.1.33)$$

com

$$a_j = 2^{-\frac{1}{2}} \left(\omega^{\frac{1}{2}} u_j + i\omega^{-\frac{1}{2}} P_j \right), \quad j = 1, 2., \quad (6.1.34)$$

e equações análogas para os índices 3 e 4. As funções b_j e b_j^\dagger correspondem a "aniquilação" e "criação", respectivamente. Introduzindo então os operadores $b_j \star$ e $b_j^\dagger \star$, temos que

$$[b_j \star, b_j^\dagger \star] = 1, \quad (6.1.35)$$

e o sistema de autovalores, Eqs.(6.1.26-29), pode ser transformado em

$$\omega \hbar \left(\sum_{j=1}^2 b_j^\dagger \star b_j \star + 1 \right) f = \omega \hbar (n_1 + n_2 + 1) f = K_{12} f, \quad (6.1.36)$$

$$L_{12} \star f = \hbar (b_1^\dagger \star b_1 \star - b_2^\dagger \star b_2 \star) f = \hbar (n_1 - n_2) f = M f, \quad (6.1.37)$$

$$\omega \hbar \left(\sum_{j=3}^4 b_j^\dagger \star b_j \star + 1 \right) g = \omega \hbar (n_3 + n_4 + 1) g = K_{34} g, \quad (6.1.38)$$

$$L_{34} \star g = \hbar (b_3^\dagger \star b_3 \star - b_4^\dagger \star b_4 \star) g = \hbar (n_3 - n_4) g = M g, \quad (6.1.39)$$

com $n_\alpha = 0, 1, 2, \dots$, equações que serão usadas para obter relações entre os n_α .

Para obter as autofunções do sistema de equações, consideraremos o método analítico. Com efeito, equações (6.1.26-29) podem ser agregadas da seguinte forma

$$\left[H_{12} \pm L_{12} - \left(\frac{K_{12}}{\omega} \pm M \right) \right] \star f = 0 \quad (6.1.40)$$

e

$$\left[H_{34} \pm L_{34} - \left(\frac{K_{34}}{\omega} \pm M \right) \right] \star g = 0, \quad (6.1.41)$$

onde

$$H_{12} = \frac{1}{2} \left(\omega^{-1} \sum_{j=1}^2 P_j^2 + \omega \sum_{j=1}^2 u_j^2 \right), \quad L_{12} = u_1 P_2 - u_2 P_1, \quad (6.1.42)$$

$$H_{34} = \frac{1}{2} \left(\omega^{-1} \sum_{j=3}^4 P_j^2 + \omega \sum_{j=3}^4 u_j^2 \right), \quad L_{34} = u_3 P_4 - u_4 P_3. \quad (6.1.43)$$

Lembrando que os operadores de posição e momentum na formulação simplética da Mecânica Quântica[128] são escritos como

$$\hat{U} = u\star = u + \frac{i\hbar}{2}\partial_P$$

e

$$\hat{P} = P\star = P - \frac{i\hbar}{2}\partial_u,$$

e executando os cálculos algébricos, f em (6.1.40) pode ser visto como dependendo apenas de uma variável z de expressão

$$z = \frac{2}{\hbar}(H_{12} \pm L_{12}). \quad (6.1.44)$$

Na realidade, como no caso 2D, ao separar as equações em parte real e parte imaginária, nós encontramos que a parte imaginária é nula e a parte real reduz-se a uma equação diferencial ordinária, ou seja,

$$\left[\frac{1}{4}z - z\partial_z^2 - \partial_z - \frac{1}{2\hbar} \left(\frac{K_{12}}{\omega} \pm M \right) \right] f(z) = 0. \quad (6.1.45)$$

Propondo então

$$f(z) = e^{-\frac{z}{2}}L(z),$$

obtemos a equação

$$\left[z\partial_z^2 + (1-z)\partial_z + \left(\frac{K_{12}}{2\hbar\omega} \pm \frac{M}{2\hbar} - \frac{1}{2} \right) \right] L(z) = 0 \quad (6.1.46)$$

que é a equação diferencial de Laguerre. Desde que K_{12} é a constante do oscilador harmônico isotrópico 2D no espaço de fase, podemos escrever

$$K_{12} = \hbar\omega(n_1 + n_2 + 1) \quad (6.1.47)$$

e colocando $M = \hbar m$, obtemos que os polinômios de Laguerre,

$$L_n(z) = \frac{1}{n!} e^z \partial_z^n (z^n e^{-z}) \quad (6.1.48)$$

para

$$n = \frac{n_1 + n_2 + 1 \pm m}{2} - \frac{1}{2} = \frac{n_{12} \pm m}{2} = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.1.49)$$

são as soluções da equação (6.1.46), e o conjunto de funções $f(z) = e^{-\frac{z}{2}}L_n(z)$, como no caso 2D, forma um conjunto ortogonal de funções no intervalo $0 \leq z < \infty$. Observemos ainda que os polinômios de Laguerre também nesse caso não são funções definidas positivas, mas satisfazem as condições: $L(z=0)$ finito e $\lim_{z \rightarrow \infty} L(z) \rightarrow 0$.

Agora, como $K_{12} + K_{34} = 2\kappa$, obtemos, usando (6.1.47) e a equação análoga para K_{34} com $\omega^2 = -2E$,

$$E = -\frac{\kappa^2}{2\hbar^2} \frac{1}{\left(\frac{N}{2} + 1\right)^2}, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.1.50)$$

onde $N = \sum_{\alpha=1}^4 n_{\alpha}$ e n_{α} é o α -ésimo número quântico para o oscilador harmônico 4D. Em consequência, os estados são $\binom{n+3}{n}$ vezes degenerados. Devido à condição de vínculo, entretanto, temos que apenas alguns estados têm significado físico. Na verdade, considerando as equações (6.1.23), (6.1.37) e (6.1.39), obtemos que

$$m = n_1 - n_2 = n_3 - n_4,$$

ou seja, somente os estados com

$$n_1 + n_4 = n_2 + n_3 \equiv \mathfrak{N} - 1,$$

têm significado físico. Essa última condição reduz a degenerescência dos auto-estados correspondentes do oscilador harmônico 4D. Então, com $\frac{N}{2} + 1 = \mathfrak{N}$, obtemos

$$E = -\frac{\kappa^2}{2\hbar\mathfrak{N}^2}, \quad (\mathfrak{N} = 1, 2, \dots), \quad (6.1.51)$$

que, com nossas unidades, é o resultado espectral correto para o átomo de hidrogênio 3D e nos dá a degenerescência correta dos estados. Resumindo, as soluções analíticas finais para o sistema de equações (6.1.26-29) são expressas na forma

$$\Psi(u, P) = f_{n_{12}, m}(u_1, u_2, P_1, P_2) g_{n_{34}, m}(u_3, u_4, P_3, P_4), \quad (6.1.52)$$

onde

$$f_{n_{12}, m} = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} (-1)^{n_{12}} e^{-\frac{2}{\hbar}H_{12}} L_{\frac{1}{2}(n_{12}+m)}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{12} + L_{12})\right) \times L_{\frac{1}{2}(n_{12}-m)}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{12} - L_{12})\right), \quad (6.1.53)$$

$$g_{n_{34}, m} = \frac{1}{(\pi\hbar)^2} (-1)^{n_{34}} e^{-\frac{2}{\hbar}H_{34}} L_{\frac{1}{2}(n_{34}+m)}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{34} + L_{34})\right) \times L_{\frac{1}{2}(n_{34}-m)}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{34} - L_{34})\right). \quad (6.1.54)$$

Então, substituindo os números quânticos apropriados, obtemos as funções quasi-amplitudes para o átomo de hidrogênio 3D no espaço de fase, ou seja:

$$\begin{aligned}\Psi_{\{n_\alpha\}} = \Psi_{n_1, n_2, n_3, n_4}(u, P) &= \frac{1}{(\pi\hbar)^4} e^{-\frac{2}{\hbar}(H_{12}+H_{34})} \times \\ &L_{n_1}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{12}+L_{12})\right) L_{n_2}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{12}-L_{12})\right) \times \\ &L_{n_3}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{34}+L_{34})\right) L_{n_4}\left(\frac{2}{\hbar}(H_{34}-L_{34})\right),\end{aligned}\quad (6.1.55)$$

com

$$n_1 + n_4 = n_2 + n_3 \quad e \quad n_\alpha = 0, 1, 2, \dots \quad (6.1.56)$$

A interpretação física é obtida associando $\Psi_{\{n_\alpha\}}$ com a função de Wigner, f_w , que é dada pela expressão (3.5.1). Assim, temos que a função de Wigner geral para o átomo de hidrogênio 3D é dada por:

$$f_w^{\{n_\alpha\}} = \Psi_{\{n_\alpha\}} \star \Psi_{\{n_\alpha\}}^\dagger \propto \Psi_{\{n_\alpha\}}. \quad (6.1.57)$$

Em particular, para o estado fundamental, encontramos

$$\begin{aligned}f_w^{\{\mathfrak{N}=1\}}(u, P) &= \Psi_{0,0,0,0} \star \Psi_{0,0,0,0}^\dagger \propto \Psi_{0,0,0,0} = (\pi\hbar)^{-4} \exp\left[-\frac{2}{\hbar}(H_{12}+H_{34})\right] \\ &= (\pi\hbar)^{-4} \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{\hbar}{\kappa} \sum_{\alpha=1}^4 P_\alpha^2 + \frac{\kappa}{\hbar} \sum_{\alpha=1}^4 u_\alpha^2\right)\right];\end{aligned}\quad (6.1.58)$$

e para o primeiro estado degenerado excitado ($\mathfrak{N} = 2$) f_w é dado por

$$\begin{aligned}f_w^{\{\mathfrak{N}=2\}}(u, P) &= \Psi_{1,0,1,0} \star \Psi_{1,0,1,0}^\dagger \propto \Psi_{1,0,1,0} \\ &= (\pi\hbar)^{-4} \exp\left[-\frac{2}{\hbar}(H_{12}+H_{34})\right] L_1\left(\frac{2}{\hbar}(H_{12}\pm L_{12})\right) L_1\left(\frac{2}{\hbar}(H_{34}\pm L_{34})\right) \\ &= (\pi\hbar)^{-4} \left[1 - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{2\hbar}{\kappa} \sum_{\alpha=1}^2 P_\alpha^2 + \frac{\kappa}{2\hbar} \sum_{\alpha=1}^2 u_\alpha^2 \pm 2(u_1 P_2 - u_2 P_1)\right)\right] \times \\ &\quad \left[1 - \frac{1}{\hbar}\left(\frac{2\hbar}{\kappa} \sum_{\alpha=3}^4 P_\alpha^2 + \frac{\kappa}{2\hbar} \sum_{\alpha=3}^4 u_\alpha^2 \pm 2(u_3 P_4 - u_4 P_3)\right)\right] \times \\ &\quad \exp\left[-\frac{1}{\hbar}\left(\frac{2\hbar}{\kappa} \sum_{\alpha=1}^4 P_\alpha^2 + \frac{\kappa}{2\hbar} \sum_{\alpha=1}^4 u_\alpha^2\right)\right].\end{aligned}\quad (6.1.59)$$

Observamos que, também neste caso, as funções de Wigner têm relação direta com as soluções encontradas para as amplitudes. Isso é consistente, uma vez que $\Psi_{\{n_\alpha\}}$ e $f_w^{\{n_\alpha\}}$ obedecem a mesma

equação de autovalor e são analíticas na vizinhança de 0. Notamos também que a função de Wigner do estado fundamental (6.1.58) é positiva em todos os pontos no espaço de fase e tem um único máximo. Isso contrasta com a função de Wigner determinada por Dahl e Springborg usando o procedimento original de Wigner[49], uma vez que para esses autores existem regiões no espaço de fase em que a função de Wigner para o estado fundamental se torna negativa. É importante enfatizar que $f_w^{\{n_\alpha\}}$ obedece a condição de vínculo (6.1.23) e, conseqüentemente, o $f_w^{(n=1)}$ é a função de Wigner adequada para o estado fundamental do átomo de hidrogênio dentro do formalismo simplético da Mecânica Quântica. Nosso resultado para o estado fundamental concorda com o obtido por Nouri[126], usando o desenvolvimento de Wigner. No entanto, para os estados excitados existem diferenças entre o nosso resultado e os de Nouri; o ponto crucial é que a condição de vínculo (6.1.23) está ausente nos cálculos de Nouri [47, 126]. Em particular o primeiro estado excitado degenerado que obtivemos pode assumir valores negativos, mas é positivo na origem. Concluindo, nossos resultados, para o caso bidimensional e tridimensional, mostram que o uso das transformações de Levi-Civita e Kuntaanheimo-Stiefel constitui um método eficaz para o estudo do potencial de Coulomb na MQS, propiciando obter, por exemplo, uma forma analítica fechada para a função de Wigner e dando assim uma contribuição efetiva para o desenvolvimento da teoria quântica no espaço de fase[28].

Capítulo 7

Conclusões e Perspectivas

*Reconhecemos que o raciocínio pode compreender
os aspectos revelados do universo físico,
mas apenas algo além do raciocínio
pode experimentar o todo encoberto.*

A noção de espaço de fase na mecânica quântica foi proposta por Wigner em 1932[155] com o objetivo de introduzir, para baixas temperaturas, correções quânticas na mecânica estatística clássica. Nesse desenvolvimento o que hoje é conhecido como função de Wigner é obtido por uma transformada de Fourier da matriz densidade a partir da formulação usual da teoria quântica. Nos anos seguintes e segunda metade do século XX desenvolvimentos físicos[19, 20, 21, 81, 123] e matemáticos[70, 71, 72, 73, 74] foram realizados visando explorar a idéia de Wigner e obter um processo de quantização consistente descrevendo o estado quântico pela função de Wigner e as variáveis dinâmicas por funções $a(q, p)$ no espaço das coordenadas q e momenta p obedecendo uma estrutura algébrica definida pelo conhecido produto estrela. É um ponto importante nesses desenvolvimentos sua relação direta com a teoria quântica padrão uma vez que se faz necessário resolver a equação de Liouville-von Neumann para usar esses procedimentos.

Dispensando o uso da equação de Liouville-von Neumann como passo para obter a descrição da teoria quântica no espaço de fase, Oliveira et al[128] partiram do fibrado cotangente $T^*M = \Gamma$ de uma variedade diferenciável M e consideraram o espaço de Hilbert H_Γ de funções de quadrado integrável $\Psi(q, p)$, definidas sob Γ de coordenadas locais $(q, p) = (q^1, q^2, \dots, q^n, p_1, p_2, \dots, p_n)$, e

compatível com o produto estrela. Em consequência, usando a álgebra de Lie do grupo de Galilei mostraram que uma realização dessa álgebra no espaço H_Γ é obtida considerando os operadores fundamentais \hat{P}_μ e \hat{Q}^μ como:

$$\hat{P}_\mu \Psi(q, p) = p_\mu \star \Psi(q, p) = \left(p_\mu - \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial q^\mu} \right) \Psi(q, p),$$

$$\hat{Q}^\mu \Psi(q, p) = q^\mu \star \Psi(q, p) = \left(q^\mu + \frac{i\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial p_\mu} \right) \Psi(q, p),$$

e que o gerador das translações temporais h satisfaz uma equação do tipo Schrödinger no espaço de fase, ou seja,

$$\hat{H}\Psi(q, p) = h \star \Psi(q, p) = E\Psi(q, p) \quad (7.0.1)$$

onde $h \star$ depende de $p_\mu \star$ e $q_\mu \star$; sendo a interpretação física da teoria obtida, considerando uma função $f(q, p)$ construída pelas quasi-amplitudes $\Psi(q, p)$ e o produto estrela, i.e.

$$f(q, p) = \Psi(q, p) \star \Psi^\dagger(q, p)$$

a qual demonstra-se satisfazer as propriedades da função de Wigner. Essa formulação, acima resumida, é conhecida na literatura como Mecânica Quântica Simplética(MQS) e nesse desenvolvimento a questão central é resolver a equação de Schrödinger no espaço de fase, (7.0.1), o que tem sido realizado para alguns tipos de potencial[3, 4] mas encontrado dificuldades no caso do potencial de Coulomb devido a $q_\mu \star$ ser um operador que envolve a derivada. Neste trabalho nós consideramos o problema do potencial Coulomb nos casos ainda não abordados na literatura, ou seja, o caso bidimensional e tridimensional. Nossa proposta permitiu relacionar o problema de Coulomb na MQS com o de um oscilador harmônico; para isto, usamos a transformação de Levi-Civita no caso 2D e sua generalização(transformação Kuntaanheimo-Stiefel) no caso 3D e obtivemos, usando a MQS, de forma inédita, o espectro do átomo de Hidrogênio 2D e 3D, suas quasi-amplitudes de probabilidade bem como as funções de Wigner correspondentes. Uma análise dos resultados obtidos mostra que as funções de Wigner e as quasi-amplitudes encontram-se relacionadas, como era de se esperar, já que $\Psi_{\{n\}}$ e $f_W^{\{n\}}$ obedecem as mesmas equações de autovalores; podemos notar também que ambas são analíticas na vizinhança da origem e que a função de Wigner para o estado fundamental nos casos 2D e 3D é positiva para todos os pontos do espaço de fase, com um único máximo, apresentando assim comportamento similar ao encontrado por outros no caso unidimensional.

Como perspectiva, gostaríamos de observar que, de acordo com Gosson[78, 79], existe a possibilidade de obter uma conexão entre a mecânica quântica usual e a descrição da mecânica quântica no espaço de fase considerando um operador U tal que $\Psi_E(q, p) = U\varphi_E(q)$. Um estudo no sentido de encontrar uma tal transformação U está em andamento. Temas de interesse que ainda podem ser estudados com nossa proposta são os efeitos Stark e Zeeman para o átomo de Hidrogênio. Além disso, efeitos de confinamento quântico de átomos hidrogenóides bidimensionais fazem parte de projeto futuro pois este é um assunto relevante na pesquisa atual de fenômenos quânticos em sistemas mesoscópicos[8].

Com o presente trabalho surge também a possibilidade de estudar as equações de Klein-Gordon e de Dirac no espaço de fase para uma partícula submetida ao potencial *coulombiano*. Outro ponto importante ainda a explorar é, por exemplo, a teoria de espalhamento.

Referências

- [1] A. M. O. de Almeida. *Sistemas Hamiltonianos Caos e Quantização*. Editora da UNICAMP, Campinas, 1991.
- [2] R. G. G. Amorim. “Geometria nao-comutativa e teoria de campos simplética”. Tese de doutorado. IF-UnB, 2009.
- [3] R. G. G. Amorim. “Quartic Potential in Phase Space”. Em: *Physicae* 10 (2014), pp. 20–25.
- [4] R. G. G. Amorim, S. C. Ulhoa e A. E. Santana. “The Noncommutative Harmonic Oscillator Based on Symplectic Representation of Galilei Group”. Em: *Brazilian Journal of Physics* 43.1 (2013), pp. 78–85.
- [5] R. G. G. Amorim et al. “Non-commutative geometry and symplectic field theory”. Em: *Phys. Lett. A* 361.6 (2007), pp. 464–471.
- [6] R. G. G. Amorim et al. “Wigner function at 80 years and the origins of noncommutative geometry”. Em: *Revista Brasileira de Ensino de Física* 35.3 (2013), pp. 1–14.
- [7] F. Antonsen. “Quantum theory in curved spacetime using the Wigner function”. Em: *Phys. Rev. D* 56.2 (1997), pp. 920–935.
- [8] N. Aquino e E. Castaño. “Efectos de confinamiento en atomos hidrogenoides bidimensionales”. Em: *Revista Mexicana de Física* 44.6 (1998), pp. 628–636.
- [9] D. Bahns et al. “Ultraviolet finite quantum field theory on quantum spacetime”. Em: *Commun. Math. Phys.* 237.1-2 (2003), pp. 221–241.
- [10] L. M. Baker e D. B. Fairlie. “Moyal–Nahm equations”. Em: *J. Math. Phys.* 40.6 (1999), pp. 2539–2548.
- [11] N. L. Balazs e B. K. Jennings. “Wigner’s function and other distribution functions in mock phase spaces”. Em: *Physics Reports* 104.6 (1984), pp. 347–391.

- [12] L. E. Ballentine. *Quantum Mechanics: A Modern Development Second Edition*. World Scientific Publishing Company, 2014.
- [13] A. O. Barut. *Dynamical groups and generalized symmetries in quantum theory: with applications in atomic and particle physics*. University of Canterbury Press, Christchurch, N. Z., 1972.
- [14] A. O. Barut, C. K. E. Schneider e R. Wilson. “Quantum theory of infinite component fields”. Em: *Journal of Mathematical Physics* 20.11 (1979), pp. 2244–2256.
- [15] D. M. Basko et al. “Interaction of quantum well excitons with a resonant localized excitation”. Em: *Physical Review B* 71.16 (2005), p. 165330.
- [16] F. Bayen et al. “Deformation theory and quantization. I. Deformations of symplectic structures”. Em: *Ann. Phys.* 111.1 (1978), pp. 61–110.
- [17] F. Bayen et al. “Deformation theory and quantization. II. Physical applications”. Em: *Annals of Physics* 111.1 (1978), pp. 111–151.
- [18] A.V. Belitsky, X. Ji e F. Yuan. “Quark imaging in the proton via quantum phase-space distributions”. Em: *Phys. Rev. D* 69 (2004), p. 074014.
- [19] F. A. Berezin. “General concept of quantization”. Em: *Commun. Math. Phys.* 40.2 (1975), pp. 153–174.
- [20] F. A. Berezin. “Quantization”. Em: *Math. USSR Izv.* 8.5 (1974), pp. 1109–1165.
- [21] F. A. Berezin. “Quantization in complex symmetric spaces”. Em: *Math. USSR Izv.* 9.2 (1975), pp. 341–379.
- [22] H. A. Bethe e E. E. Salpeter. *Quantum mechanics of one-and two-electron atoms*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [23] K. Bohlin. “Note sur le problème des deux corps et sur une intégration nouvelle dans le problème des trois corps”. Em: *Bull. Astron.* 28 (1911), pp. 113–119.
- [24] M. Boiteux. “Point transformations and diastrophic point transformations”. Em: *Physica* 75.3 (1974), pp. 603–612.
- [25] M. Boiteux. “The three-dimensional hydrogen atom as a restricted four-dimensional harmonic oscillator”. Em: *Physica* 65.2 (1973), pp. 381–395.

- [26] M. Boiteux. “Theory of nonbijective canonical transformations in mechanics: Application to the Coulomb problem”. Em: *J. Math. Phys.* 23.7 (1982), pp. 1311–1314.
- [27] P. Campos, M. G. R. Martins e J. D. M. Vianna. “Quantum mechanics on phase space and the Coulomb potential”. Em: *Physics Letters A* 381.13 (2017), pp. 1129–1133.
- [28] P. Campos et al. “Quantum mechanics on phase space: The hydrogen atom and its Wigner functions”. Em: *Annals of Physics* 390 (2018), pp. 60–70.
- [29] C. M. Care. “One dimensional hydrogen atom with a repulsive core”. Em: *J. Phys. C (London)* 5 (1972), pp. 1799–1805.
- [30] W. J. Carr. “Energy, Specific Heat, and Magnetic Properties of the Low-Density Electron Gas”. Em: *Phys. Rev.* 122 (1961), pp. 1437–1446.
- [31] P. Carruthers e F. Zachariasen. “Quantum collision theory with phase-space distributions”. Em: *Reviews of Modern Physics* 55.1 (1983), pp. 245–285.
- [32] A. C. Chen. “Hydrogen atom as a four-dimensional oscillator”. Em: *Phys. Rev. A* 22.2 (1980), pp. 333–335.
- [33] A. C. Chen e M. Kibler. “Connection between the hydrogen atom and the four-dimensional oscillator”. Em: *Phys. Rev. A* 31.6 (1985), pp. 3960–3963.
- [34] L. Chetouani e T. F. Hammann. “The hydrogen atom in phase space”. Em: *J. Math. Phys.* 28.3 (1987), pp. 598–604.
- [35] A. Cisneros e H. V. McIntosh. “Symmetry of the Two-Dimensional Hydrogen Atom”. Em: *Journal of Mathematical Physics* 10.2 (1969), pp. 277–286.
- [36] M. W. Cole. “Properties of Image-Potential-Induced Surface States of Insulators”. Em: *Phys. Rev. B* 2 (10 1970), pp. 4239–4252.
- [37] A. Connes. *Noncommutative Geometry*. Academic Press, San Diego, New York, London, 1994.
- [38] A. Connes, M. R. Douglas e A. Schwarz. “Noncommutative geometry and matrix theory”. Em: *J. High Energy Phys.* 1998.02 (1998), p. 003.
- [39] F. H. J. Cornish. “Kepler orbits and the harmonic oscillator”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 17.11 (1984), pp. 2191–2197.

- [40] F. H. J. Cornish. “The hydrogen atom and the four-dimensional harmonic oscillator”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 17.2 (1984), pp. 323–327.
- [41] J. S. da Cruz Filho. “Teoria quântica no espaço de fase: modelo de Hénon-Heiles e simetrias de calibre”. Tese de doutorado. IF-UnB, 2016.
- [42] J. S. da Cruz Filho et al. “Hénon–Heiles interaction for hydrogen atom in phase space”. Em: *International Journal of Modern Physics A* 31.10 (2016), p. 1650046.
- [43] T. Curtright, D. B. Fairlie e C. K. Zachos. *A Concise Treatise on Quantum Mechanics in Phase Space*. World Scientific, 2014.
- [44] T. Curtright, D. Fairlie e C. Zachos. “Features of time-independent Wigner functions”. Em: *Physical Review D* 58.2 (1998), p. 025002.
- [45] T. Curtright e C. Zachos. “Wigner trajectory characteristics in phase space and field theory”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 32.5 (1999), pp. 771–779.
- [46] J. P. Dahl. “On the group of translations and inversions of phase space and the Wigner functions”. Em: *Physica Scripta* 25.4 (1982), pp. 499–503.
- [47] J. P. Dahl e M. Springborg. “Comment on “Wigner phase-space distribution function for the hydrogen atom””. Em: *Physical Review A* 59.5 (1999), pp. 4099–4100.
- [48] J. P. Dahl e M. Springborg. “The Morse oscillator in position space, momentum space, and phase space”. Em: *J. Chem. Phys.* 88.7 (1988), pp. 4535–4547.
- [49] J. P. Dahl e M. Springborg. “Wigner’s phase space function and atomic structure: I. The hydrogen atom ground state”. Em: *Molec. Phys.* 47.5 (1982), pp. 1001–1019.
- [50] C. R. De Oliveira. “Is Dirichlet the physical boundary condition for the one-dimensional hydrogen atom?” Em: *Physics Letters A* 374.28 (2010), pp. 2805–2808.
- [51] C. R. De Oliveira e A. A. Verri. “Self-adjoint extensions of Coulomb systems in 1, 2 and 3 dimensions”. Em: *Annals of Physics* 324.2 (2009), pp. 251–266.
- [52] L. Demeio et al. “Wigner-function approach to multiband transport in semiconductors”. Em: *Physica B* 314.1 (2002), pp. 104–107.
- [53] R. Dickman e R. F. O’Connell. “Wigner-distribution-and Green’s-function approach to quantum corrections and implications for the melting temperature of two-dimensional Wigner crystals”. Em: *Phys. Rev. B* 32.1 (1985), pp. 471–473.

- [54] P. A. M. Dirac. “The Lagrangian in Quantum Mechanics”. Em: *Phys. Z. Sowjetunion* 3.1 (1933), pp. 64–72.
- [55] G. Dito e D. Sternheimer. “Deformation quantization: genesis, developments and metamorphoses”. Em: *IRMA Lectures Maths. Theor. Phys., by G. Halbout and W. de Gruyter, Berlin* 2.2 (2002), pp. 55–66.
- [56] J. Dito. “An example of cancellation of infinities in the star-quantization of fields”. Em: *Lett. Math. Phys.* 27.1 (1993), pp. 73–80.
- [57] J. Dito. “Star-product approach to quantum field theory: the free scalar field”. Em: *Lett. Math. Phys.* 20.2 (1990), pp. 125–134.
- [58] J. Dito. “Star-products and nonstandard quantization for Klein–Gordon equation”. Em: *J. Math. Phys.* 33.2 (1992), pp. 791–801.
- [59] D. A. Dubin, M. A. Hennings e T. D. Smith. *Mathematical Aspects of Weyl Quantization and Phase*. World Scientific, Singapore, 2000.
- [60] R. J. Elliott e R. Loudon. “Theory of the absorption edge in semiconductors in a high magnetic field”. Em: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 15 (1960), pp. 196–207.
- [61] M. J. Englefield. *Group theory and the Coulomb problem*. Wiley-Interscience, New York, 1972.
- [62] B.-G. Englert e K. Wódkiewicz. “Tutorial notes on one-party and two-party gaussian states”. Em: *International Journal of Quantum Information* 1.02 (2003), pp. 153–188.
- [63] D. B. Fairlie. “Moyal brackets in M-theory”. Em: *Mod. Phys. Lett. A* 13.04 (1998), pp. 263–274.
- [64] D. Farrelly. “Lie algebraic approach to quantization of nonseparable systems with internal nonlinear resonance”. Em: *The Journal of Chemical Physics* 85.4 (1986), pp. 2119–2131.
- [65] M. C. B. Fernandes e J. D. M. Vianna. “On the generalized phase space approach to Duffin-Kemmer-Petiau particles”. Em: *Foundations of Physics* 29.2 (1999), pp. 201–219.
- [66] R. P. Feynman. “Space-time approach to non-relativistic quantum mechanics”. Em: *Rev. Mod. Phys.* 20.2 (1948), pp. 367–387.
- [67] R. P. Feynman, A. R. Hibbs e D. Styer. *Quantum Mechanics and Path Integrals*. Dover Publications, 2010.

- [68] D. Galetti. “Mecânica Quântica no Espaço de Fase”. Em: *Notas de aula da III Escola Mário Schönberg do Departamento de Física da UFPB, João Pessoa* (1996).
- [69] C. C. Gerry. “Coherent states and the Kepler-Coulomb problem”. Em: *Phys. Rev. A* 33.1 (1986), p. 6.
- [70] M. Gerstenhaber. “On the Deformation of Rings and Algebras: II”. Em: *Ann. Math.* 84 (1966), pp. 1–19.
- [71] M. Gerstenhaber. “On the Deformation of Rings and Algebras: III”. Em: *Ann. Math.* 88 (1968), pp. 1–34.
- [72] M. Gerstenhaber. “On the Deformation of Rings and Algebras IV”. Em: *Ann. Math.* 99 (1974), pp. 257–276.
- [73] M. Gerstenhaber. “The cohomology structure of an associative ring”. Em: *Ann. Math.* 78 (1963), pp. 267–288.
- [74] M. Gerstenhaber e S. D. Schack. *Deformation Theory of Algebras and Structures and Applications*. Kluwer Academic Press, Dordrecht, 1988.
- [75] S. Ghosh et al. “Sub-Planck-scale structures in a vibrating molecule in the presence of decoherence”. Em: *Physical Review A* 79.5 (2009), p. 052104.
- [76] R. Gilmore. *Lie groups, Lie algebras, and some of their applications*. Dover Publications, Mineola, New York, 2005.
- [77] M. A. de Gosson. “Extended Weyl calculus and application to the phase-space Schrödinger equation”. Em: *J. Phys. A* 38 (2005), pp. L325–L329.
- [78] M. A. de Gosson. “Symplectically covariant Schrödinger equation in phase space”. Em: *J. Phys. A* 38 (2005), pp. 9263–9287.
- [79] M. A. de Gosson e F. Luef. “A New Approach to the *-Gervalue Equation”. Em: *Lett. Math. Phys.* 85.2-3 (2008), pp. 173–183.
- [80] J. M. Gracia-Bondia. “Hydrogen atom in the phase-space formulation of quantum mechanics”. Em: *Phys. Rev. A* 30.2 (1984), pp. 691–697.
- [81] H. J. Groenewold. “On the Principles of elementary quantum mechanics”. Em: *Physica* 12 (1946), pp. 405–460.

- [82] M. C. Gutzwiller. *Chaos in classical and quantum mechanics*. Vol. 1. Springer Science & Business Media, 2013.
- [83] M. Hamermesh. *Group theory and its application to physical problems*. Courier Corporation, 2012.
- [84] S. Hassani. *Mathematical Physics: A Modern Introduction to Its Foundations*. Springer Science & Business Media, 2002.
- [85] M. Hillery et al. “Distribution functions in physics: Fundamentals”. Em: *Physics Reports* 106.3 (1984), pp. 121–167.
- [86] A. Hurwitz. “Über die Komposition der quadratischen Formen”. Em: *Mathematische Annalen* 88.1-2 (1922), pp. 1–25.
- [87] A. Hurwitz. *Über die Komposition der quadratischen Formen von beliebig vielen Variablen, Nachrichten von der königlichen Gesellschaft der Wissenschaften zu Göttingen, Math.-phys. Kl. 1898, 309–316; reprinted in: A. HURWITZ, Mathematische Werke II. 1933.*
- [88] K. Imre et al. “Wigner method in quantum statistical mechanics”. Em: *Journal of Mathematical Physics* 8.5 (1967), pp. 1097–1108.
- [89] A. Inomata, H. Kuratsuji e C. C. Gerry. *Path integrals and coherent states of SU (2) and SU (1, 1)*. World Scientific, 1992.
- [90] E. Inönü e E. P. Wigner. “Representations of the Galilei group”. Em: *II Nuovo Cimento (1943-1954)* 9.8 (1952), pp. 705–718.
- [91] L. Jun. “Wave mechanics in quantum phase space: hydrogen atom”. Em: *Progress in Natural Science* 17.2 (2007), pp. 144–149.
- [92] B. Jurčo, P. Schupp e J. Wess. “Nonabelian noncommutative gauge theory via noncommutative extra dimensions”. Em: *Nucl. Phys. B* 604.1 (2001), pp. 148–180.
- [93] B. Jurčo, P. Schupp e J. Wess. “Noncommutative gauge theory for Poisson manifolds”. Em: *Nucl. Phys. B* 584.3 (2000), pp. 784–794.
- [94] B. Jurčo et al. “Construction of non-Abelian gauge theories on noncommutative spaces”. Em: *The European Physical Journal C-Particles and Fields* 21.2 (2001), pp. 383–388.
- [95] M. E. Kellman. “Algebraic representation for multiple anharmonic oscillators via compact and non-compact unitary groups”. Em: *Chemical physics letters* 99.5-6 (1983), pp. 437–441.

- [96] M. E. Kellman. “Algebraic resonance dynamics of the normal/local transition from experimental spectra of ABA triatomics”. Em: *The Journal of chemical physics* 83.8 (1985), pp. 3843–3858.
- [97] M. E. Kellman. “Group theory of coupled oscillators: Normal modes as symmetry breaking”. Em: *The Journal of Chemical Physics* 76.9 (1982), pp. 4528–4534.
- [98] A. Kenfack e K. Życzkowski. “Negativity of the Wigner function as an indicator of non-classicality”. Em: *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics* 6.10 (2004), pp. 396–404.
- [99] F. C. Khanna et al. *Thermal Quantum Field Theory: Algebraic Aspects and Applications*. World Scientific Books, 2009.
- [100] M. Kibler e T. Negadi. “On the use of nonbijective canonical transformations in Chemical Physics”. Em: *Croatica Chemica Acta* 57.6 (1985), pp. 1509–1523.
- [101] Y.-S. Kim e M. E. Noz. *Phase Space Picture of Quantum Mechanics: Group Theoretical Approach*. Vol. 40. World Scientific, 1991.
- [102] W. Kohn e J. M. Luttinger. “Theory of donor states in silicon”. Em: *Physical Review* 98.4 (1955), pp. 915–922.
- [103] B. O. Koopman. “Hamiltonian systems and transformation in Hilbert space”. Em: *Proc. Natl. Acad. Sci. (USA)* 17.5 (1931), pp. 315–318.
- [104] D. Lambert e M. Kibler. “An algebraic and geometric approach to non-bijective quadratic transformations”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 21.2 (1988), pp. 307–343.
- [105] B. Leaf. “Weyl transform in nonrelativistic quantum dynamics”. Em: *J. Math. Phys.* 9.5 (1968), pp. 769–781.
- [106] H.-W. Lee e M. O. Scully. “The Wigner phase-space description of collision processes”. Em: *Found. Phys.* 13.1 (1983), pp. 61–72.
- [107] P. Lefebvre, P. Christol e H. Mathieu. “Unified formulation of excitonic absorption spectra of semiconductor quantum wells, superlattices, and quantum wires”. Em: *Physical Review B* 48.23 (1993), p. 17308.

- [108] D. Leibfried, T. Pfau e C. Monroe. “Shadows and mirrors: reconstructing quantum states of atom motion”. Em: *Physics Today* 51 (1998), pp. 22–29.
- [109] U. Leonhardt. *Measuring the quantum state of light*. Vol. 22. Cambridge University Press, 1997.
- [110] T. Levi-Civita. Em: *Opere Matematiche* 2 (1906), pp. 411–417.
- [111] T. Levi-Civita. “Sur la regularisation du probleme des trois corp”. Em: *Acta Math.* 42 (1920), pp. 99–144.
- [112] J.-M. Lévy-Leblond e F. Lurçat. “N-Particle Kinematics and Group-Theoretical Treatment of Phase Space I. Nonrelativistic”. Em: *J. Math. Phys.* 6.10 (1965), pp. 1564–1570.
- [113] Q.-S. Li e J. Lu. “One-dimensional hydrogen atom in quantum phase-space representation: rigorous solutions”. Em: *Chemical Physics Letters* 336.1-2 (2001), pp. 118–122.
- [114] A. Loinger. “Galilei group and Liouville equation”. Em: *Ann. Phys.* 20.1 (1962), pp. 132–144.
- [115] R. Loudon. “One-dimensional hydrogen atom”. Em: *Am. J. Phys.* 27 (1959), pp. 649–655.
- [116] G. Lugarini e M. Pauri. “Canonical representations of the Inhomogeneous Lorentz Group”. Em: *Ann. Phys.* 44.2 (1967), pp. 266–288.
- [117] M. A. Marchioli. “Quantum Mechanics in Phase Space: I. The Weyl-Wigner Formalism”. Em: *Revista Brasileira de Ensino de Física* 24.4 (2002), pp. 421–436.
- [118] C. C. Martens e G. S. Ezra. “Classical, quantum mechanical, and semiclassical representations of resonant dynamics: A unified treatment”. Em: *The Journal of chemical physics* 87.1 (1987), pp. 284–302.
- [119] H. V. McIntosh. “Symmetry and degeneracy”. Em: *Group Theory and its Applications, Volume II*. Elsevier, 1971, pp. 75–144.
- [120] M. B. de Menezes. “Mecânica Quântica Simplética Supersimétrica”. Tese de doutorado. IF-UFBA, 2015.
- [121] M. B. de Menezes et al. “Supersymmetric symplectic quantum mechanics”. Em: *Annals of Physics* 389 (2018), pp. 111–135.

- [122] M. Moshinsky. “Accidental degeneracies and symmetry groups”. Em: *Foundations of Physics* 13.1 (1983), pp. 73–82.
- [123] J. E. Moyal. “Quantum mechanics as a statistical theory”. Em: *Proc. Cambridge Phil. Soc.* 45.01 (1949), pp. 99–124.
- [124] J. von Neumann. “Mathematische Begründung der Quantenmechanik”. Em: *Nachr. Ges. Wiss. Göttingen Math. Phys. Kl* (1927), pp. 1–57.
- [125] M. M. Nieto. “Electrons above a helium surface and the one-dimensional Rydberg atom”. Em: *Phys. Rev. A* 61 (3 2000), p. 034901.
- [126] S. Nouri. “Wigner phase-space distribution function for the hydrogen atom”. Em: *Phys. Rev. A* 57.3 (1998), pp. 1526–1528.
- [127] R. F. O’connell e L. Wang. “Phase-space representations of the Bloch equation”. Em: *Phys. Rev. A* 31 (1985), pp. 1707–1711.
- [128] M. D. Oliveira et al. “Symplectic quantum mechanics”. Em: *Annals of Physics* 312.2 (2004), pp. 492–510.
- [129] G. Palma e U. Raff. “The one-dimensional hydrogen atom revisited”. Em: *Canadian journal of physics* 84.9 (2006), pp. 787–800.
- [130] U.-L. Pen e T.-F. Jiang. “Direct momentum-space calculations for the resonant multiphoton processes of a hydrogen atom under intense laser pulses”. Em: *Phys. Rev. A* 53 (1 1996), pp. 623–626.
- [131] A. Pinzul e A. Stern. “Absence of the holographic principle in noncommutative Chern-Simons theory”. Em: *J. High Energy Phys.* 2001.11 (2001), p. 023.
- [132] L. Praxmeyer, J. Mostowski e K. Wódkiewicz. “Hydrogen atom in phase space: the Wigner representation”. Em: *Journal of Physics A: Mathematical and General* 39.45 (2006), p. 14143.
- [133] W. W. Rössner et al. “Hydrogen atoms in arbitrary magnetic fields. I. Energy levels and wavefunctions”. Em: *Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics* 17.1 (1984), pp. 29–52.
- [134] J. J. Sakurai e J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 2017.

- [135] W. P. Schleich. *Quantum optics in phase space*. John Wiley & Sons, 2011.
- [136] W. Schleich, D. F. Walls e J. A. Wheeler. “Area of overlap and interference in phase space versus Wigner pseudoprobabilities”. Em: *Physical Review A* 38.3 (1988), pp. 1177–1186.
- [137] H. Schmider e J. P. Dahl. “Nodal structure of the electronic Wigner function of many-electron atoms and molecules”. Em: *International J. Quantum Chem.* 60.1 (1996), pp. 439–452.
- [138] M. Schönberg. “Application of second quantization methods to the classical statistical mechanics”. Em: *Il Nuovo Cimento (1943-1954)* 9.12 (1952), pp. 1139–1182.
- [139] M. Schönberg. “Application of second quantization methods to the classical statistical mechanics”. Em: *Il Nuovo Cimento (1943-1954)* 10.4 (1953), pp. 419–472.
- [140] M. Schönberg. “Application of second quantization methods to the classical statistical mechanics”. Em: *Il Nuovo Cimento (1943-1954)* 10.6 (1953), pp. 697–744.
- [141] N. Seiberg e E. Witten. “String theory and noncommutative geometry”. Em: *Journal of High Energy Physics* 1999.09 (1999), p. 032.
- [142] L. Skála et al. “Method for calculating analytical solutions of the Schrödinger equation: Anharmonic oscillators and generalized Morse oscillators”. Em: *Phys. Rev. A* 53 (1996), pp. 2009–2020.
- [143] M. Springborg e J. P. Dahl. “Wigner’s phase-space function and atomic structure: II. Ground states for closed-shell atoms”. Em: *Phys. Rev. A* 36 (1987), pp. 1050–1062.
- [144] E. Stiefel e P. Kustaanheimo. “Perturbation theory of Kepler motion based on spinor regularization.” Em: *Journal für die reine und angewandte Mathematik* 218 (1965), pp. 204–219.
- [145] E. Stiefel e G. Scheifele. *Linear and regular celestial mechanics: perturbed two-body motion, numerical methods, canonical theory*. Springer-Verlag, 1971.
- [146] M. C. Tijero. “Aproximações Semiclássicas nos Processos de Colisões Atômico-Moleculares”. Tese de doutorado. Tese de doutoramento apresentada no Instituto de Física Teórica (UNESP), IFT, 1994.
- [147] G. Torres-Vega e J. H. Frederick. “A quantum mechanical representation in phase space”. Em: *J. Chem. Phys.* 98.4 (1993), pp. 3103–3120.

- [148] G. Torres-Vega e J. H. Frederick. “Quantum mechanics in phase space: new approaches to the correspondence principle”. Em: *J. Chem. Phys.* 93.12 (1990), pp. 8862–8874.
- [149] J. David M. Vianna. “Feynman Path Integrals”. Em: *Revista Brasileira de Ensino de Física* 40.4 (2018), e4206-1–9.
- [150] V. S. Vrkljan. “Bemerkung über die Freiheitsgrade in der Wellenmechanik”. Em: *Zeitschrift für Physik* 52.9-10 (1928), pp. 735–738.
- [151] V. S. Vrkljan. “Das eindimensionale relativistische Kepler-Problem in der Wellenmechanik”. Em: *Zeitschrift für Physik* 54.1 (1929), pp. 133–136.
- [152] H. Weyl. “Quantenmechanik und gruppentheorie”. Em: *Z. Phys.* 46.1-2 (1927), pp. 1–46.
- [153] H. Weyl. *The theory of groups and quantum mechanics*. Dover Books on Intermediate e Advanced Mathematics, New York: Dover, 1950.
- [154] E. Wigner. “Effects of the electron interaction on the energy levels of electrons in metals”. Em: *Trans. Faraday Soc.* 34 (1938), pp. 678–685.
- [155] E. Wigner. “On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium”. Em: *Phys. Rev.* 40 (1932), pp. 749–759.
- [156] E. P. Wigner. *Group theory and its applications to the quantum theory of atomic spectra*. Acad. Press, N.Y., 1959.
- [157] W. Xie. “A study of a hydrogen atom in a two-dimensional quantum well”. Em: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 268.20 (2010), pp. 3321–3324.
- [158] C. Zachos e T. Curtright. “Phase-space quantization of field theory”. Em: *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 135 (1999), pp. 244–258.
- [159] C. Zachos, D. Fairlie e T. Curtright. *Quantum Mechanics in Phase Space: An Overview with Selected Papers*. Vol. 34. World Scientific, 2005.
- [160] J. Zakrzewski, R. Gebarowski e D. Delande. “Two-dimensional quantum hydrogen atom in circularly polarized microwaves: Global properties”. Em: *Physical Review. A* 54.1 (1996), pp. 691–709.
- [161] W. H. Zurek. “Sub-Planck structure in phase space and its relevance for quantum decoherence”. Em: *Nature* 412.6848 (2001), pp. 712–717.