CBPF-NF-035/01

Teorema de Ehrenfest e o limite clássico da mecânica quântica*

A. O. Bolivar †

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, CBPF-DCP,

Rua Dr. Xavier Sigaud 150, 22290-180 - Rio de Janeiro, Brasil

May, 2001

RESUMO

Apresentamos argumentos sustentando que o teorema de Ehrenfest não é formal e conceitualmente adequado para conectar a mecânica quântica à mecânica clássica. A propósito, a fim de ressaltarmos a importância pedagógica de jamais deixarmos de ler os textos originais, traduzimos o artigo de Paul Ehrenfest publicado em 1927 na revista alemã *Zeitschrift für Physik*.

ABSTRACT

We present arguments against the use of the Ehrenfest theorem as a classical limiting method of quantum mechanics. In addition, in order to point out the pedagogical relevance of reading the original texts we translate the article by Paul Ehrenfest published in the german journal *Zeitschrift für Physik* in 1927.

---

*Aceito para publicação na Revista Brasileira de Ensino de Física.

†Endereço permanente: Instituto Cultural Eudoro de Sousa, Grupo "Mário Schönberg" de estudos em Física-Matemática, Ceilândia, 72221-970 (C.P. 7316), D.F, Brasil.

I. TEOREMA DE EHRENFEST E O LIMITE CLÁSSICO

Em mecânica quântica, o estado de um sistema físico é determinado pela função de onda ψ, solução da equação de Schrödinger. *Supondo* que a teoria quântica seja uma teoria universal da matéria, é importante mostrar como a mecânica clássica surge como um caso particular de dentro do arcabouço teórico da mecânica quântica. O teorema de Ehrenfest [1] visa, portanto, responder a esta questão. Tal teorema estabelece, então, que os valores médios da posição e do *momentum* linear de uma partícula, por exemplo, calculados a partir de uma dada ψ, obedeçam às equações de Newton (ou equivalentemente às equações de Hamilton), o que acontece somente se ψ for um pacote de onda bem estreito (Pacote de Ehrenfest ψ_{PE}) de tal modo que o potencial escalar externo varie muito pouco dentro das dimensões de ψ_{PE}. Isto é o que é propalado, em geral, nos livros-textos usados em nossas universidades.

Contudo, vale notar que o teorema de Ehrenfest não explica o fato de como a álgebra não-comutativa das observáveis quânticas desaparece no limite clássico [2]. Além deste pequeno detalhe geralmente olvidado, recentemente Ballentine *et al.* [3] mostraram de modo definitivo que, do ponto de vista formal, as condições de validade deste teorema não são suficientes, pois quando aplicadas ao oscilador harmônico, por exemplo, não bastam para caracterizar a sua classicalidade; muito menos são necessárias, visto que há sistemas físicos (partícula unidimensional entre paredes refletoras, oscilador quártico forçado) que podem violar o teorema de Ehrenfest e ainda assim se comportarem classicamente.

Conceitualmente, contra o teorema de Ehrenfest são levantadas as seguintes objeções:

(α) Na interpretação de Copenhague, o "x" que aparece no argumento de $\psi_{PE}(x,t)$ não representa a localização *real* de uma partícula, mas somente uma possível posição, entre outras, de ser *realizada* com uma probabilidade $|\psi_{PE}|^2$, desde que uma medição seja feita para determinar a posição da partícula. Então, como justificar que "x" descreve características de objetos clássicos, tal como, a posição bem definida de um sistema, em todo instante, independentemente de ser ou não observada? [4].

(β) Não há nenhuma razão *a priori* para que o princípio de superposição não possa ser usado por algum método de limite clássico [5]. (A fim de superar esta dificuldade levantada por Einstein, recentemente a abordagem da descoerência [6] tenta explicar por meio de um mecanismo físico porque objetos macroscópicos não são caracterizados por funções de onda superpostas).

Destas objeções formais e conceituais, segue a questão: de que trata, afinal, o teorema de Ehrenfest? Abaixo, mostraremos que tal teorema não possui nenhuma função em conectar a física quântica à física clássica. Ele é simplesmente um procedimento estritamente *matemático*, ou seja, estabelece que os valores esperados da posição e do *momentum* linear, calculados a partir de um dado *ensemble* (quântico ou clássico) evoluem de acordo com equações de movimento similares às equações de Newton.

(a) *TEOREMA DE EHRENFEST QUÂNTICO.*

Partindo da equação de Schrödinger sob a ação de um potencial escalar V

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x_1^2}+V(x_1,t)\psi=\imath\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}, \tag{1}$$

no ponto x_1 e da sua complexa-conjugada

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{\partial^2\psi^\dagger}{\partial x_2^2}+V(x_2,t)\psi^\dagger=-\imath\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}, \tag{2}$$

no ponto x_2, obtemos a equação de evolução

$$\left\{\hbar\frac{\partial}{\partial t}+\hbar\frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial q}-\hbar\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-)^k(\hbar/2)^{2k}}{(2k+1)!}\frac{\partial^{2k+1}V}{\partial q^{2k+1}}\frac{\partial^{2k+1}}{\partial p^{2k+1}}\right\}\mathcal{W}=0, \tag{3}$$

para a função de Wigner [7]

$$\mathcal{W}(p,x,t)=\frac{1}{2\pi}\int\psi^\dagger(x+\frac{\eta\hbar}{2},t)\psi(x-\frac{\eta\hbar}{2},t)e^{-\imath p\eta}d\eta, \tag{4}$$

depois de usarmos a mudança de variáveis

$$x_1=x-\frac{\eta\hbar}{2}\quad;\quad x_2=x+\frac{\eta\hbar}{2}. \tag{5}$$

Na formulação da mecânica quântica no espaço de fase, os valores esperados da posição x e do *momentum* p são calculados por meio das relações

$$\langle x\rangle = \int x\mathcal{W}(x,p,t)dpdx \tag{6}$$

$$\langle p\rangle = \int p\mathcal{W}(x,p,t)dpdx. \tag{7}$$

A função de Wigner $\mathcal{W}$ é um objeto quântico, pois, além de possuir a constante de Planck $\hbar$, ela não é sempre positiva para qualquer valor de p e q e apresenta também termos de interferência quando calculada a partir da superposição de funções de onda. O teorema de Ehrenfest, reformulado neste formalismo de Wigner [8], consiste basicamente em impor condições para que a função quântica $\mathcal{W}$ *simule* um comportamento de modo que ela possa ser descrita classicamente. Isto é possível se

(i) a função de Wigner $\mathcal{W}$ for suficientemente bem localizada, ou seja, se for construída a partir de um pacote de Ehrenfest ψ de tal modo que o potencial V não varie muito dentro das dimensões de $\mathcal{W}$:

$$\frac{\partial^3 V}{\partial x^3} \ll \frac{\partial V}{\partial x}; \tag{8}$$

(ii) a função de Wigner for sempre definida positiva. Isto ocorre sempre para funções de onda gaussianas.

Decorre das condições acima que a Eq.(3) torna-se

$$\left\{\frac{\partial}{\partial t} + \frac{p}{m}\frac{\partial}{\partial q} - \frac{\partial V}{\partial x}\frac{\partial}{\partial p}\right\}\mathcal{W} = 0, \tag{9}$$

por sua vez, esta permite que

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{\langle p\rangle}{m} \tag{10}$$

$$\frac{d\langle p\rangle}{dt} = -\int \frac{\partial V(x,t)}{\partial x}\mathcal{W}(x,p,t)dxdp = -\langle\frac{\partial V}{\partial x}\rangle = -\frac{\partial V(\langle x\rangle,t)}{\partial x}. \tag{11}$$

Ou seja, o centróide do *ensemble* quântico $\mathcal{W}$ segue trajetórias determinadas por equações do tipo Hamilton.

(b) *TEOREMA DE EHRENFEST CLÁSSICO.*

Na formulação de Liouville da mecânica clássica, o estado de um sistema físico é especificado pela função distribuição de probabilidade $F(x,p,t)$ no espaço de fase (x,p).

A dinâmica de um sistema isolado submetido a um potencial escalar externo $V(x,t)$ é dada por

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{p}{m}\frac{\partial F}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial p}\frac{\partial F}{\partial p} = 0. \tag{12}$$

O valor esperado das observáveis físicas $A(x,p,t)$ é calculado a partir da fórmula

$$\langle A \rangle = \int AF dxdp. \tag{13}$$

Assim, é fácil mostrar que

$$\frac{d\langle x \rangle}{dt} = \frac{\langle p \rangle}{m} \tag{14}$$

$$\frac{d\langle p \rangle}{dt} = -\langle \frac{\partial V}{\partial x} \rangle = -\frac{\partial V(\langle x \rangle, t)}{\partial x}, \tag{15}$$

desde que a largura da distribuição de probabilidade for pequena. Portanto, o centróide $(\langle q \rangle, \langle p \rangle)$ do *ensemble* clássico pode ser descrito pelas equações de Hamilton.

Em suma, o teorema de Ehrenfest estabelece condições para que os valores esperados da posição e do *momentum* linear, calculados a partir de um dado *ensemble* (clássico ou quântico), tenha uma evolução temporal dada por equações de movimento similares em forma às equações de Hamilton. Ao contrário do que comumente se pensa, tal teorema não é um processo de limite clássico.

A seguir, apresentamos a tradução ‡ do artigo original de Paul Ehrenfest publicado na *Zeitschrift für Physik* **45** (1927) 455-457.

---

‡A propósito, queremos anunciar que está em fase de preparação outras traduções do alemão de artigos muitas vezes citados, no entanto, pouco lidos e raramente discutidos em nossas universidades, tais como o artigo de Einstein de 1917 sobre sistemas não-integráveis e o artigo de Heisenberg (1927) sobre as relações de incerteza.

II. TRADUÇÃO:

Nota sobre a validade aproximada da mecânica clássica a partir da mecânica quântica

por **P. Ehrenfest**, Leiden, Holanda

(Recebido em 5 de setembro de 1927)

Por meio de um cálculo elementar sem aproximação, pode-se deduzir a relação

$$m\frac{d^2}{dt^2}\int\int\int d\tau\psi\psi^* x = \int\int\int d\tau\psi\psi^*(-\frac{\partial V}{\partial x})$$

que significa — considerando um pacote de onda (m *da ordem de* $1g$) *pequeno e que permaneça bem pequeno — que a aceleração de sua posição obedece à equação de movimento de Newton para uma força local* $-\partial V/\partial x$.

É importante responder, de um modo o mais elementar possível, a seguinte questão: *como as equações fundamentais de Newton da mecânica clássica resultam da mecânica quântica?* Toda uma série de recentes publicações tem elucidado, de modo essencial e completo, até que ponto a mecânica clássica permanece correta, como uma boa aproximação, para processos macroscópicos[§]. No entanto, falta mostrar alguma relação em especial, elementar que seja, seguindo exatamente da equação de Schrödinger (sem qualquer aproximação) e que talvez revele com mais comodidade a conexão entre a mecânica ondulatória e a mecânica clássica.

Consideremos, então, a equação de Schrödinger na seguinte forma

---

[§]Louis de Broglie, Thèse 1924; Journ. de Phys. et le Ra. (6) **7**, 1, 32, 1926; C. R. **180**, 498, 1925; **183**, 272, 1926. — L. Brillouin, Journ. de Phys. et le Rad. **7**, 353, 1926. — E. Schrödinger, Naturwiss. **14**, 664, 1926. — P. Debye, Phys. ZS. **28**, 170, 1927. — W. Heisenberg, ZS. f. Phys. **43**, 172, 1927. — E. H. Kennard, ZS. f. Phys. **44**, 326, 1927.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+V(x)\psi=\imath\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\quad;\quad-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi^*}{\partial x^2}+V(x)\psi^*=-\imath\hbar\frac{\partial\psi^*}{\partial t} \tag{16}$$

para o caso de um único grau de liberdade. Em seguida, chamemos **

$$\int_{-\infty}^{+\infty}dxx\psi\psi*\equiv Q(t), \tag{17}$$

$$\imath\hbar\int_{-\infty}^{+\infty}dx\psi\frac{\partial\psi*}{\partial x}\equiv P(t), \tag{18}$$

e calculemos dQ/dt e dP/dt usando (16). Substituindo e integrando por partes, resulta imediatamente (e sem aproximação) que

$$\frac{dQ}{dt}=\frac{1}{m}P \tag{19}$$

$$m\frac{d^2Q}{dt^2}=\frac{dP}{dt}=\int dx\psi\psi^*(-\frac{\partial V}{\partial x}). \tag{20}$$

A equação (20) significa: sempre que a largura do pacote de onda (ou de probabilidade) $\psi\psi^*$ é tida como muito pequena com respeito a distâncias macroscópicas, *a aceleração* (do centro de gravidade) *do pacote de onda obedece às equações de Newton com uma força* $(-\partial V/\partial x)$ *"atuando no ponto Q do pacote de onda"*.

Observações: a dispersão gradual de um pacote de onda foi discutida pormenorizadamente por Heisenberg, l.c.. Seu cálculo, para o exemplo de uma partícula livre no espaço unidimensional, pode talvez tornar-se mais confiável com a ajuda de uma expressão mais natural envolvendo cálculos bem conhecidos em condução térmica: a equação de Schrödinger tem, para $V=0$, uma estrutura de equação de condução térmica

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=a^2\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} \tag{21}$$

com

**A expansão de ψ em termos das autofunções $\psi=\sum c_n e^{\frac{\imath E_n}{\hbar}t}\phi_n(x)$ leva às relações matriciais $q_{nm}=e^{\frac{\imath}{\hbar}(E_n-E_m)t}\int dxx\phi_n\phi_m$ e p_{nm}.

$$a^2 = \imath \frac{\hbar}{2m}. \tag{22}$$

Substituindo sua solução geral dada por (ver, e. g., B. Riemann-Weber, Vol. II)

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2a\sqrt{\pi t}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4a^2 t}} \psi(0,\xi), \tag{23}$$

com a condição inicial

$$\psi(0,\xi) = C e^{-\frac{\xi^2}{2\omega^2} + \imath\mu\xi}, \tag{24}$$

e

$$(\psi\psi^*)_{t=0} = C^2 e^{-\frac{\xi^2}{\omega^2}}, \tag{25}$$

(μ sendo uma constante real arbitrária), acha-se uma alteração na forma do pacote de onda com a velocidade $\hbar\mu/m$ e uma dispersão que aumenta com o tempo. Este resultado é o mesmo obtido por Heisenberg:

$$\psi\psi^* = c(t) e^{-\frac{(x-\frac{\hbar\mu}{m}t)^2}{\Omega^2}}, \tag{26}$$

onde

$$\Omega^2 = \omega^2 + \frac{\hbar^2 t^2}{m^2 \omega^2}. \tag{27}$$

Duplicando-se a largura inicial (i.e., $\Omega^2 = 4\omega^2$), leva-se o tempo

$$T = \sqrt{3}\frac{m\omega^2}{\hbar} \quad (\hbar = \frac{6,6.10^{-27}}{2\pi}). \tag{28}$$

para que o pacote se dispersa. Para $m = 1g$, $\omega = 10^{-3}$cm, T é igual a 10^{21}s; enquanto que para $m = 1,7.10^{-24}$g e $\omega = 10^{-8}$cm, T é igual a 10^{-13}s.

REFERENCES

[1] P. Ehrenfest, *Bemerkung über die angenärte Gültigkeit der klassischen Mechanik innerhalb der Quantenmechanik*, Zeitschrift für Physik **45** (1927) 455-457.

[2] A. A. Grib and W. A. Rodrigues, Jr., Nonlocality in Quantum Mechanics (Plenum Press, New York, 1998).

[3] L. E. Ballentine, Y. Yang, and J. P. Zibin, *Inadequacy of Ehrenfest's theorem to characterize the classical regime*, Physical Review **50** (1994) 2854-2859.

[4] P. R. Holland, The Quantum Theory of Motion (Cambrigde University Press, Cambridge, 1993).

[5] Einstein, A., *Elementare Überlegungen zur Interpretation der Grundlagen der Quantenmechanik*, in Scientific Papers Presented to Max Born on his Retirement from the Tait Chair of Natural Philosophy in the University of Edinburgh (Olivier and Boyd, Edinburgh, 1953) pp.: 33-40;

in The Born-Einstein Letters, M. Born, ed., (Walker and Company, New York, 1969).

[6] Joos, F. and Zeh, H. D., *The emergence of classical properties through interaction with the environment*, Zeitschrift für Physik B **59** (1985) 223-243;

Zurek, W. H., *Decoherence and the transition from quantum to classical*, Physics Today **44** (October) (1991) 36-44;

Zurek, W. H., *Preferred states, predictability, classicality and the environment-induced decoherence*, Progress of Theoretical Physics **89** (1993) 281-312;

Zurek, W. H., *Decoherence, einselection and the existential interpretation (the rough guide)*, Philosophical Transactions of the Royal Society of London A **356** (1998) 1793-1821;

Zurek, W. H., *Decoherence, Chaos, quantum-classical correspondence, and the algorithmic arrow of time*, Physica Scripta T **76** (1998) 186-198;

Zurek, W. H., *Decoherence, Chaos, quantum-classical correspondence, and the arrow of time*, Acta Physica Polonica B **29** (1998) 3689-3709;

Zurek, W. H. and Paz, J. P., *Decoherence, chaos, and second law*, Physical Review Letters **72** (1994) 2508-2511;

Zurek, W. H. and Paz, J. P., *Decoherence, chaos, the quantum and the classical*, Nuovo Cimento B **110** (1995) 611-624;

Habib, S., Shizume, K. and Zurek, W. H., *Decoherence, chaos and the correspondence principle*, Physical Review Letters **80** (1998) 4361-4365.

[7] Wigner, E. P., *On the quantum correction for thermodynamic equilibrium*, Physical Review **40** (1932) 749-759.

[8] A. Royer, *Ehrenfest's theorem reinterpreted and extended with Wigner's function*, Foundations of Physics **22** (1992) 727-736.