§ Elementos de matriz:

Na representação de número, os operadores $(a, a^\dagger)$ não são diagonais:

$$\langle n'|a|n\rangle = \sqrt{n}\,\langle n'|n-1\rangle = \sqrt{n}\,\delta_{n',n-1}$$

$$\langle n'|a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,\langle n'|n+1\rangle = \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}$$

Com estas fórmulas podemos calcular elementos de matriz dos observáveis (x, p_x), ou (q, p) na notação adotada:

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\,(a+a^\dagger), \qquad p = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\,(-a+a^\dagger),$$

que são manifestamente hermiteanos, mas não diagonais na representação de número:

$$\langle n'|q|n\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right),$$

$$\langle n'|p|n\rangle = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-\sqrt{n}\,\delta_{n',n-1} + \sqrt{n+1}\,\delta_{n',n+1}\right).$$

Isto era de esperar, porque $[x, \mathcal{H}] \neq 0$, $[p_x, \mathcal{H}] \neq 0$. Para os estados estacionários obtemos:

$$\langle n|q|n\rangle = \langle q\rangle_n = 0 \quad , \quad \langle n|p|n\rangle = \langle p\rangle_n = 0 \, ,$$

de maneira que para estes estados, o Teorema de Ehrenfest fornece uma identidade trivial:

$$0 \equiv 0$$

Calculemos a dispersão para o estado fundamental $|0\rangle$:

$$q^2 = \frac{\hbar}{2m\omega}\,(a^2 + a^{\dagger 2} + aa^\dagger + a^\dagger a) \, ,$$

$$p^2 = -\frac{m\hbar\omega}{2}\left(a^2 + a^{\dagger 2} - aa^\dagger - a^\dagger a\right),$$

logo:

$$\langle 0|q^2|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega}\langle 0|aa^\dagger|0\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \, ,$$

$$\langle 0|p^2|0\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2}\langle 0|aa^\dagger|0\rangle = \frac{m\hbar\omega}{2} \, ,$$

e como $\langle q\rangle = \langle p\rangle = 0$

$$\langle(\Delta q)^2\rangle_0 = \langle q^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega} \, ,$$

$$\langle(\Delta p)^2\rangle_0 = \langle p^2\rangle_0 = \frac{m\hbar\omega}{2} \, ,$$

obtendo assim:

$$\langle(\Delta q)^2\rangle_0 \langle(\Delta p)^2\rangle_0 = \frac{\hbar}{2m\omega}\cdot\frac{m\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar^2}{4} .$$

Neste caso obtemos a igualdade do Teorema sobre as relações de incerteza. Isto acontece porque o estado fundamental tem função de onda gaussiana (ver lista # de problemas). Se fala que este estado "minimiza as relações de incerteza":

$$\boxed{\langle(\Delta q)^2\rangle_0 \langle(\Delta p)^2\rangle_0 = \frac{\hbar^2}{4}}$$

"Quase-clássico" é otro nome dado a este estado. Podemos também verificar o Teorema do Virial:

$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_0 = \frac{1}{2m}\frac{m\hbar\omega}{2} = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2}\langle \mathcal{H}\rangle_0 ,$$

$$\left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right\rangle_0 = \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{\hbar}{2m\omega} = \frac{\hbar\omega}{4} = \frac{1}{2}\langle \mathcal{H}\rangle_0 ,$$

ou:
$$\left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle_0 = \langle T\rangle_0 = \left\langle \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \right\rangle_0 = \langle V\rangle_0$$

▸ Ex: Verificar que para um estado estacionário $|n\rangle$ arbitrário temos:

$$\langle(\Delta q)^2\rangle_n \langle(\Delta p)^2\rangle_n = \left(n+\frac{1}{2}\right)^2\hbar^2$$

§ Dinâmica na Versão de Heisenberg

Trabalhamos na versão de Heisenberg:

$$\overset{(H)}{a}(t) = \mathcal{U}^{\dagger}(t)\, a\, \mathcal{U}(t)$$
$$= \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right) a \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t\right),$$

mas omitiremos o super-índice (H). As equações de movimento para os operadores $(a, a^{\dagger})$ são:

$$\frac{da}{dt} = \frac{1}{i\hbar}[a, \mathcal{H}] = \frac{1}{i\hbar}(+\hbar\omega)a = -i\omega a,$$

$$\frac{da^{\dagger}}{dt} = i\omega a^{\dagger}$$

Integrando estas equações obtemos:

$$a(t) = \exp(-i\omega t)\, a(0), \quad a^{\dagger}(t) = \exp(i\omega t)\, a^{\dagger}(0)$$

Estas soluções são substituídas para os observáveis:

$$q(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left[e^{-i\omega t} a(0) + e^{i\omega t} a^{\dagger}(0)\right]$$
$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left\{\cos\omega t\left[a(0) + a^{\dagger}(0)\right] + i\,\mathrm{sen}\,\omega t\left[-a(0) + a^{\dagger}(0)\right]\right\}$$

$$\boxed{q(t) = q(0)\cos\omega t + \left[\frac{p(0)}{m\omega}\right]\operatorname{sen}\omega t}$$

e para $p(t)$:

$$p(t) = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(-a(t) + a^{\dagger}(t)\right)$$

$$= i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left\{-e^{-i\omega t}a(0) + e^{i\omega t}a^{\dagger}(0)\right\}$$

$$\boxed{p(t) = \cos\omega t\; p(0) - m\omega\operatorname{sen}\omega t\; q(0)}$$

Outra maneira interessante de integrar o problema é usar a identidade de Baker-Campbell-Hausdorff para:

$$q(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\, q(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$$

$$p(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}\, p(0)\, e^{-\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t}$$

com $A = \frac{i}{\hbar}\mathcal{H}t$, $B = \begin{cases} q(0) \\ p(0) \end{cases}$.

Neste caso, a álgebra dos comutadores é fechada e a série pode ser avaliada de maneira fechada.

Como já mostramos, para estados estacionários as médias $\langle p \rangle$ e $\langle q \rangle$ são nulas e a coordenada não oscila com freqüência ω como no caso clássico.
Mas o Teorema de Ehrenfest sugere a possibilidade de construir um pacote de ondas que oscila segundo a trajetória clássica. Este pacote contém componentes de todo o espectro do oscilador, seu centro oscila segundo a equação clássica e não tem dispersão.
Este estado distinguido recebe o nome de "estado coerente" (ver lista # de problemas), ou estados de mínima incerteza.

§ As funções de onda para os estados estacionários

Usando o método dos operadores, podemos obter iterativamente as funções de onda dos autoestados da energia. O estado fundamental satisfaz a equação:

$$a|0\rangle = 0$$

$$\left[\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2} q + \frac{i p}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\right]|0\rangle = 0$$

$$\left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^{1/2}\left(q + \frac{i p}{m\omega}\right)|0\rangle = 0$$

Projetamos na representação de coordenadas $\{|x'\rangle\}$

$$\langle x'|\left(q + \frac{i p}{m\omega}\right)|0\rangle = 0$$

$$\left(x' + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right)\langle x'|0\rangle = 0$$

$$\boxed{\left(x' + \frac{\hbar}{m\omega}\frac{d}{dx'}\right)\psi_0(x') = 0}$$

Eq. satisfeita pelo estado fundamental

$$\frac{d}{dx'}\psi_0(x') = -\frac{x'}{x_0^2}\psi_0(x')$$

com $x_0^2 \equiv \dfrac{\hbar}{m\omega}$, $x_0 = \sqrt{\dfrac{\hbar}{m\omega}}$ é uma escala típica de comprimento do oscilador

Soluçãõ:

$$\psi_0(x') = A_0 \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'^2}{x_0^2}\right)\right]$$

Normalização:

$$1 = |A_0|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dx' \, e^{-(x'/x_0)^2} = |A_0|^2 \, 2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\left(\frac{1}{x_0}\right)}$$

$$= |A_0|^2 x_0 \sqrt{\pi}$$

$$\Rightarrow \quad |A_0| = \left(\frac{1}{x_0\sqrt{\pi}}\right)^{1/2} = \left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar\pi}}\right)^{1/2} = \frac{1}{\sqrt{x_0}\,\pi^{1/4}}$$

Estado fundamental:

$$\boxed{\psi_0(x') = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}} \, e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2}}$$

Os autoestados, subindo no espectro, podem ser obtidos usando o operador de criação:

$$\langle x' | a^{\dagger} | 0 \rangle = \sqrt{1} \, \langle x' | 1 \rangle = \psi_1(x')$$

$$\psi_1(x') = \langle x' | \left(\sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \, q - \frac{i}{\sqrt{2m\hbar\omega}} \, p \right) | 0 \rangle$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x' - \frac{i p}{m\omega} \right) \psi_0(x')$$

$$= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x' - x_0^2 \frac{d}{dx'} \right) \psi_0(x')$$

Escrevemos o operador em forma adimensional

$$a^{\dagger} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x - i\,\frac{p}{\sqrt{m\omega\hbar}}\right)$$

Def. Nova variável y'

$$y' \equiv \frac{x'}{x_0} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x'$$

$$\frac{\partial}{\partial y'} = \frac{\partial x'}{\partial y'}\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{1}{\left(\frac{\partial y'}{\partial x'}\right)}\frac{\partial}{\partial x'} = \frac{\sqrt{\hbar}}{\sqrt{m\omega}}\frac{\partial}{\partial x'}$$

ou $$\frac{\partial}{\partial x'} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,\frac{\partial}{\partial y'}$$

Obtemos:

$$\langle x'|a^{\dagger}|\alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y' - \frac{\partial}{\partial y'}\right)\psi_\alpha(y')$$

Em particular para $\psi_0(x') = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{x'}{x_0}\right)^2\right]$

$$= \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\exp\left(-\frac{1}{2}y'^2\right)$$

$$-\frac{\partial}{\partial y'}\psi_0(y') = +y'\,\psi_0(y')$$

Obtemos:

$$\psi_1(y') = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{x_0}}\frac{1}{\sqrt{2}}\,2y'\,\psi_0(y')$$

IV

TAMOIO Boas Impressões

$$\boxed{\psi_1(y') = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2\cdot 1!}}\, 2y'\, e^{-\frac{1}{2}y'^2}}$$

Para um estado arbitrário do espectro, usamos:

$$\langle x'|n\rangle = \langle x'|\frac{1}{\sqrt{n!}}(a^\dagger)^n|0\rangle = \psi_n(x'/x_0)$$

o que fornece a expressão geral:

$$\psi_n(y') = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}}\left(y' - \frac{\partial}{\partial y'}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}y'^2\right)$$

Geramos polinômios em y' por derivação:

$$\boxed{H_n(y') = e^{\frac{1}{2}y'^2}\left[\left(y' - \frac{\partial}{\partial y'}\right)^n e^{-\frac{1}{2}y'^2}\right]}$$

Def. Os H_n são chamados polinômios de Hermite

$$H_0(y') = 1\,,\quad H_1(y') = 2y'\,,\quad H_2(y') = 4y'^2 - 2$$

....

Finalmente escrevemos.

$$\boxed{\psi_n(y') = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n\cdot n!}} H_n(y') \exp\left(-\frac{1}{2}y'^2\right),}$$

onde $\quad y' = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\, x'$.

§ Estados Coerentes do Oscilador Harmônico Simples (OHS)

Definimos os 'estados coerentes' como auto-kets do operador de destruição:

$$a|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle\,, \qquad (1)$$

onde 'λ' é em geral complexo.

Na base de auto-kets do número, escrevemos

$$|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} c_n\,|n\rangle\,,$$

com coeficientes lineares $c_n = \langle n|\lambda\rangle$.

Usamos a relação (1), operando com 'a':

$$a|\lambda\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\sqrt{n}\,|n-1\rangle$$

$$= \lambda\,|\lambda\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda c_n\,|n\rangle$$

Na 1ª soma, mudamos o índice mudo para

$$n' \equiv n-1 \Rightarrow n = n'+1$$

Obtemos:

$$\sum_{n'=0}^{\infty} c_{n'+1}\sqrt{n'+1}\,|n'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda c_n\,|n\rangle\,,$$

com os mesmos limites nas duas somas. Comparamos termo a termo (pq $\{|n\rangle\}$ é uma base)

$$c_{n+1}\sqrt{n+1} = \lambda\, c_n \quad , \quad n=0,1,2,\ldots,\infty$$

onde temos trocado $n' \to n$ na 1ª somatória.
A relação acima é uma relação de recorrência.

Obtemos:

$$c_0 \,,$$
$$c_1 = \frac{\lambda}{\sqrt{1}}\, c_0 \,,$$
$$c_2 = \frac{\lambda^2}{\sqrt{1\cdot 2}}\, c_0 \,,$$
$$\vdots$$
$$c_n = \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\, c_0$$

Portanto:

$$|\lambda\rangle = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\, |n\rangle$$

Exigimos normalização:

$$1 = \langle\lambda|\lambda\rangle = |c_0|^2 \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = |c_0|^2 \exp(|\lambda|^2)$$

Resulta (~~exceto por uma fase~~):

$$c_0 = \exp\left(-\frac{1}{2}|\lambda|^2\right) e^{i\theta}$$

O estado coerente normalizado é

$$\boxed{|\lambda\rangle = e^{i\theta}\, e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\, |n\rangle} \quad (2)$$

Podemos escrever este estado ainda em outra forma, em termos de (a^+):

$$|\lambda\rangle = e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle =$$

$$= e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} \sum_{n} \frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}} \frac{(a^+)^n}{\sqrt{n!}} |0\rangle$$

$$= e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} \sum_{n}^{\infty} \frac{(\lambda a^+)^n}{n!} |0\rangle$$

$$\boxed{|\lambda\rangle = e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} \exp(\lambda a^+) |0\rangle.} \quad (3)$$

Comparar com o operador 'Deslocamento' generalizado:

$$D(\lambda) \equiv \exp(\lambda a^+ - \lambda^* a) \quad (4)$$

Ele pode ser reduzido usando a identidade

$$e^{A+B} = e^{A} e^{B} e^{-\frac{1}{2}[A,B]},$$

com $A = \lambda a^+$, $B = -\lambda^* a$. A identidade acima é válida quando $[A,B]$ comuta com A e B

$$[A,B] = -|\lambda|^2 [a^+, a] = |\lambda|^2$$

$$D(\lambda) = e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} = e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} e^{\lambda a^+} e^{-\lambda^* a},$$

de onde obtemos:

$$D(\lambda)|0\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2} e^{\lambda a^\dagger}\cdot 1 \cdot |0\rangle$$

Resulta:

$$|\lambda\rangle = e^{i\vartheta} D(\lambda)|0\rangle \quad ,$$

ou

(5)
$$\boxed{|\lambda\rangle = e^{i\theta}\exp(\lambda a^\dagger - \lambda^* a)|0\rangle.}$$

A evolução temporal do ket $|\lambda\rangle$ é obtida de forma imediata a partir da relação (2):

$t_0 = 0$

$$|\lambda;t\rangle = e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda^n}{\sqrt{n!}}\left(e^{-i\frac{\hbar\omega t}{\hbar}}\right)^n e^{-i\frac{\hbar\omega}{2\hbar}t} \times |n\rangle$$

$$= e^{-\frac{i\omega t}{2}} e^{i\theta} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(\lambda e^{-i\omega t})^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle$$

$$|\lambda;t\rangle = e^{i\theta(t)} e^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\lambda(t)^n}{\sqrt{n!}}|n\rangle ,$$

onde, exceto pela fase global $\theta(t)$, o estado evoluído no tempo é obtido por

$$\lambda \longrightarrow \lambda(t) = \lambda e^{-i\omega t} ,$$

com a equação de autovalores sendo mantida no tempo

$$a|\lambda;t\rangle = \lambda(t)|\lambda;t\rangle. \qquad (6)$$

Ex. Demonstrar a relação (6) usando o operador de evolução temporal em (1).

A eq. (6) pode ser transformada numa eq. diferencial para a função de onda

$$\psi_{\lambda(t)}(x'/x_0) = \psi_\lambda(y', t) = \langle x' | \lambda \rangle,$$

em termos da variável y';

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(y' + \frac{\partial}{\partial y'}\right)\psi_\lambda(y', t) = \lambda(t)\,\psi_\lambda(y', t)$$

ou

$$\frac{\partial}{\partial y'}\psi_\lambda(y', t) = -\left(y' - \sqrt{2}\,\lambda(t)\right)\psi_\lambda(y', t)$$

A solução é uma gaussiana complexa:

$$\psi_\lambda(y', t) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(y' - \lambda(t)\sqrt{2}\right)^2\right],$$

exceto por uma fase arb.

O valor médio da energia é

$$\langle \mathcal{H} \rangle_\lambda = E_\lambda = \hbar\omega\left(|\lambda|^2 + \frac{1}{2}\right) \approx \hbar\omega|\lambda|^2$$

para $|\lambda| \gg 1$

Comparando com o caso clássico

$$E_\lambda \approx \hbar\omega|\lambda|^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 ,$$

onde A é a amplitude da oscilação. Resulta

$$A = x_0\sqrt{2}\,|\lambda| = \sqrt{\frac{2\hbar}{m\omega}}\,|\lambda| ,$$

de maneira que $|\lambda|$ é uma medida da amplitude da oscilação clássica.