II) Dinâmica Quântica

Até agora estabelecemos os conceitos de estado físico e grandezas observáveis em mecânica quântica. Nosso objetivo agora é entender como evolui o estado físico e, consequentemente, os valores dos observáveis nele medidos.

II.1) O operador de evolução temporal

Para descrever o estado físico de um sistema no instante t precisamos relacioná-lo com o estado em t_0 cuja preparação foi discutida anteriormente.
Além disso queremos que o estado físico seja normalizado a cada instante da evolução temporal. Assim devemos associar a evolução temporal a um operador unitário $U(t, t_0)$ tal que

$$|\psi(t)\rangle = U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \text{ e } \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle = 1 \quad \text{(II.1.1)}$$

de onde podemos tirar as propriedades (grupos)

i) $\quad U(t_2, t_0) = U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)$

$$\begin{aligned} |\psi(t_2)\rangle &= U(t_2, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ &= U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle \\ &= U(t_2, t_1)U(t_1, t_0)|\psi(t_0)\rangle \\ \Rightarrow U(t_2, t_1)U(t_1, t_0) &= U(t_2, t_0) \end{aligned}$$

ii) $\quad U(t, t) = \mathbb{1}$

iii) $\quad [U(t, t_0)]^{-1} = U(t_0, t)$

$$\begin{aligned} U(t_0, t)U(t, t_0) &= \mathbb{1} \\ \Rightarrow U(t_0, t) &= [U(t, t_0)]^{-1} \end{aligned}$$

Equações i), ii) e iii) : (II.1.2)

Como U é unitário podemos definir uma evolução temporal infinitesimal a partir de

$$\begin{aligned} U(\epsilon) &= \mathbb{1} - \frac{i\epsilon G}{\hbar} \\ \Rightarrow U(t+\epsilon, t_0) &= U(t+\epsilon, t)U(t, t_0) \\ &= \left(\mathbb{1} - \frac{i\epsilon G}{\hbar}\right) U(t, t_0) \quad \text{(II.1.3)} \end{aligned}$$

onde $G = G^\dagger$. Assim,

$$\begin{aligned} \frac{dU(t, t_0)}{dt} &= \lim_{\epsilon \to 0} \frac{U(t+\epsilon, t_0) - U(t, t_0)}{\epsilon} \\ &= -\frac{i}{\hbar} G(t) U(t, t_0) \quad \text{(II.1.4)} \end{aligned}$$

o que implica em

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\,|\psi(t)\rangle}{dt} &= i\hbar \frac{dU}{dt}|\psi(t_0)\rangle \\ &= G(t)U(t, t_0)|\psi(t_0)\rangle \end{aligned}$$

ou

$$i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle = G(t)|\psi(t)\rangle \quad \text{(II.1.5)}$$

Vamos denotar o gerador $G(t)$ por $H(t)$ no caso da evolução temporal. A solução formal de (II.2.4) é dada por

$$U(t,t_0) = \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')U(t',t_0)dt' \quad \text{(II.1.6)}$$

que quando iterada nos dá

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= \mathbb{1} - \frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} H(t')dt' + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^2 \int_{t_0}^{t} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' H(t')H(t'') \\ &+ \cdots + \left(-\frac{i}{\hbar}\right)^n \int_{t_0}^{t'} dt' \int_{t_0}^{t'} dt'' \ldots \int_{t_0}^{t^{(n-1)}} dt^{(n)} H(t')\ldots H(t^{(n)}) + \ldots \quad \text{(II.1.7)} \end{aligned}$$

Esta expressão pode ainda ser reescrita de outra forma se usarmos o resultado abaixo.

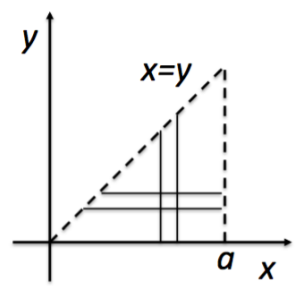
Seja $f(x,y)$ uma função de duas variáveis. Vamos mostrar que

$$\int_0^a dx \int_0^x dy\, f(x,y) = \frac{1}{2}\int_0^a \int_0^a dx\, dy\, T\left[f(x,y)\right]$$

onde

$$T\left[f(x,y)\right] = \begin{cases} f(x,y) \text{ se } x > y \\ f(y,x) \text{ se } x < y \end{cases} \quad \text{(II.1.8)}$$

Consideremos o domínio de integração da figura abaixo



$$\begin{aligned} I &= \int_0^a dx \int_0^x dy\, f(x,y) \\ &= \frac{1}{2}\int_0^a dx \int_0^x dy\, f(x,y) + \frac{1}{2}\int_0^a dx \int_0^x dy\, f(x,y) \\ &= \frac{1}{2}\int_0^a dx \int_0^x dy\, f(x,y) + \frac{1}{2}\int_0^a dy \int_y^a dx\, f(x,y) \end{aligned}$$

onde a 1ª integral refere-se aos trapézios verticais enquanto que 2ª aos horizontais. Mudando $x \leftrightarrow y$ na 2ª integral temos

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2}\int_0^a dx \int_0^x dy\, f(x,y) + \frac{1}{2}\int_0^a dx \int_x^a dy\, f(y,x) \\ &= \frac{1}{2}\int_0^a dx \int_0^a dy\, \theta(x-y) f(x,y) + \frac{1}{2}\int_0^a dy \int_0^a dx\, \theta(y-x) f(y,x) \\ \Rightarrow I &= \frac{1}{2}\int_0^a \int_0^a dxdy\left[\theta(x-y)f(x,y) + \theta(y-x)f(y,x)\right] \end{aligned}$$

que é o resultado enunciado em (II.1.8). Esta expressão pode ainda se generalizada (indução) para N variáveis

$$\begin{aligned}
&\int_0^a dx_1 \int_0^{x_1} dx_2 \cdots \int_0^{x_{N-1}} dx_N f(x_1, x_2, \ldots, x_N) \\
= \quad & \frac{1}{N!} \int_0^a \cdots \int_0^a dx_1 \ldots dx_N T\left[f(x_1, x_2, \ldots, x_N)\right] \qquad \text{(II.1.9)}
\end{aligned}$$

onde

$$T\left[f(x_1, \ldots x_N)\right] = \sum_{\substack{\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \ldots \neq \nu \\ =1}}^{N} \theta(x_\alpha - x_\beta)\theta(x_\beta - x_\gamma) \cdots \theta(x_\lambda - x_\nu) f(x_\alpha, x_\beta, \ldots, x_\nu)$$

No caso do operador de evolução temporal temos

$$U(t, t_0) = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\frac{1}{i\hbar}\right)^n \frac{1}{n!} \int_{t_0}^{t} \cdots \int_{t_0}^{t} T\left[H(t_1) \ldots H(t_n)\right] dt_1 \ldots dt_n \qquad \text{(II.1.10)}$$

onde $T\left[H(t_1) \ldots H(t_n)\right]$, definido como em (II.1.9), é o chamado *produto cronológico* de $H(t_1) \ldots H(t_n)$.

Quando $H \neq H(t)$ a (II.1.10) pode ser escrita como

$$U(t, t_0) = \exp\left(-i\frac{H}{\hbar}(t - t_0)\right) \qquad \text{(II.1.11)}$$

Nossa tarefa é, então, descobrir quem é $H(t)$. Para tal vamos usar a (II.1.5) e escrever a equação da evolução temporal de um observável.

$$\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle = \left\{\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\right\} A|\psi\rangle + \langle\psi|\frac{\partial A}{\partial t}|\psi\rangle + \langle\psi|A\left\{\frac{d|\psi\rangle}{dt}\right\} \qquad \text{(II.1.12)}$$

Aqui, consideramos a possibilidade de A depender explicitamente do tempo ($\partial A/\partial t \neq 0$). Então, usando a (II.1.5)

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle\psi|A|\psi\rangle &= -\frac{1}{i\hbar}\langle HA\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle AH\rangle + \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle \\
\Rightarrow \frac{d}{dt}\langle A\rangle &= \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A, H]\rangle \qquad \text{(II.1.13)}
\end{aligned}$$

Para identificar H podemos usar a evolução temporal de alguns observáveis convenientemente escolhidos como, por exemplo,

$$\frac{d\langle x\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[x, H]\rangle \quad \text{e} \quad \frac{d\langle p_x\rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\langle[p_x, H]\rangle \qquad \text{(II.1.14)}$$

Classicamente temos

$$\frac{dx_c}{dt} = \frac{\partial H_c}{\partial p_{x_c}} \quad \text{e} \quad \frac{dp_{x_c}}{dt} = -\frac{\partial H_c}{\partial x_c}$$

onde

$$H_c = H_c(x_c, p_{x_c}) = \frac{p_{x_c}^2}{2m} + V(x_c)$$

é a hamiltoniana do sistema em questão. Portanto, se desejarmos que os valores médios de observáveis tendam aos seus valores clássicos quando $\hbar \to 0$ devemos ter

$$\lim_{\hbar\to 0}\left(\frac{1}{i\hbar}\langle[x, H]\rangle\right) = \frac{\partial H_c}{\partial p_{x_c}} \quad \text{e} \quad \lim_{\hbar\to 0}\left(\frac{1}{i\hbar}\langle[p_{x_c}, H]\rangle\right) = -\frac{\partial H}{\partial x_c} \qquad \text{(II.1.15)}$$

Usando que quando $[A, B] = \lambda$ temos $[A, f(B)] = \lambda df/dB$ podemos obter (II.1.15) se tomarmos as seguintes medidas

i) Substituirmos H por H_c onde $p_{x_c} \leftrightarrow p_x$ e $x_c \leftrightarrow x$

ii) Postularmos $[x, p_x] = i\hbar$

Em geral devemos ter (coordenadas cartesianas em N-dimensões $x_1, x_2, \ldots, x_N$ e momentos $p_1, \ldots, p_N$)

$$\lim_{\hbar \to 0} \frac{\langle FG - GF \rangle}{i\hbar} = \{F_c, G_c\}_P \quad \text{(II.1.16)}$$

onde

$$\{F_c, G_c\}_P = \sum_i \frac{\partial F_c}{\partial x_{ci}} \frac{\partial G_c}{\partial p_{ci}} - \frac{\partial F_c}{\partial p_{ci}} \frac{\partial G_c}{\partial x_{ci}}$$

e $F_c = F(x_{ci}, p_{ci})$ e $G_c = G(x_{ci}, p_{ci})$. Este é o chamado *parêntese de Poisson* na mecânica clássica.

Podemos, então, identificar o gerador $H(t)$ como o hamiltoniano clássico onde substituimos as variáveis clássicas posição e momento linear por operadores x_i e p_i que obedecem a $[x_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$. Com esta identificação a (II.1.13) representa a dinâmica de observáveis clássicos no limite $\hbar \to 0$ (apenas quando $A = A(x_{ic}, p_{ic})$). A equação dinâmica para o estado fisico é (ver (II.1.5))

$$i\hbar \frac{d|\psi\rangle}{dt} = H|\psi\rangle \quad \text{(II.1.17)}$$

que nos permite reobter a mecânica ondulatória (equação de Schrödinger) uma vez que estabelecemos as conexões introduzidas acima.

Para tal comecemos com o conceito de operador translação D_ξ.

Este operador é tal que

$$D_\xi |x'\rangle = |x' + \xi\rangle \quad \text{(II.1.18)}$$

que, como vimos anteriormente, pode ser escrito como

$$D_\xi = e^{-ip\xi/\hbar} \quad \text{(II.1.19)}$$

onde $[x, p] = i\hbar$. Consequentemente

$$\begin{aligned}
D_\xi|\psi\rangle &= e^{-i\frac{p}{\hbar}\xi}|\psi\rangle \\
&= e^{-i\frac{p}{\hbar}\xi} \int dx' |x'\rangle \psi(x') \\
&= \int dx' |x' + \xi\rangle \psi(x') \\
&= \int dx'' |x''\rangle \psi(x'' - \xi) \quad (x' + \xi = x'') \\
\Rightarrow \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-i\xi)^n}{n!} \left(\frac{p}{\hbar}\right)^n |\psi\rangle &= \int dx'' |x''\rangle \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\xi)^n}{n!} \frac{\partial^n \psi(x'')}{\partial (x'')^n}
\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}
\left(\frac{p}{\hbar}\right)^n |\psi\rangle &= \int dx'' |x''\rangle (-i)^n \frac{\partial^n}{\partial (x'')^n} \psi(x'') \\
\Rightarrow f(p)|\psi\rangle &= \int dx'' |x''\rangle f\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x''}\right) \psi(x'')
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\langle x|f(p)|\psi\rangle = f\left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) \quad \text{(II.1.20)}$$

Portanto, a representação de coordenadas de qualquer função $f(\mathbf{p})$ pode ser generalizada para

$$\langle \mathbf{r}|f(\mathbf{p})|\psi\rangle = f(-i\hbar\boldsymbol{\nabla})\psi(\mathbf{r}) \quad \text{(II.1.21)}$$

que quando usado em (II.1.17) com $H = \frac{p^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ nos dá

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r},t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r},t) + V(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t) \quad \text{(II.1.22)}$$

Apesar de termos estabelecido a substituição de x_{ci} e p_{ci} por operadores x_i e p_i em coordenadas cartesianas este procedimento é válido em situações reais gerais. Na realidade, pode se mostrar que para qualquer conjunto de variáveis (q_{ci}, p_{ci}), que possa ser obtido através de transformações canônicas infinitesimais das coordenadas cartesianas, podemos associar operadores (q_i, p_i), relacionados aos operadores (x_i, p_{x_i}) via uma sucessão de transformações unitárias infinitesimais, tais que

$$[q_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij} \quad \text{(II.1.23)}$$

Esquematicamente

$$\begin{array}{ccc}
(x_c, p_{x_c}) & \xrightarrow[(1)]{\text{transformação canônica}} & (q_c, p_c) \\
\text{quantização} \downarrow (3) & & (2) \downarrow \text{quantização} \\
(x_c, p_x) & \xrightarrow[(4)]{\text{transformação unitária}} & (q, p)
\end{array}$$

$$(x_c, p_{x_c}) \to (q, p) \begin{cases} (1) + (2) \\ \text{ou} \\ (3) + (4) \end{cases}$$

Caso a condição acima não seja satisfeita o processo de quantização canônico pode não ser válido.

Convém notar que apesar de termos escrito a equação de evolução temporal na representação de coordenadas (II.1.22) para o caso específico de um sistema que apresenta um conjunto de variáveis canonicamente conjugadas com análogo clássico, a forma (II.1.17) é geral e pode ser usada para descrever $|\psi(t)\rangle$ na representação que for apropriada, tenham os observáveis do sistema análogos clássicos ou não. Por exemplo, o momento magnético do elétron não pode ser escrito em termos de $\mathbf{r}$ e $\mathbf{p}$ mas, ainda assim, a dinâmica do seu estado físico é regida por (II.1.17).

II.2) As versões da mecânica quântica.

Na nossa análise da seção anterior, atribuímos a evolução temporal de um sistema físico ao estado $|\psi(t)\rangle$ que o descreve e a sua dinâmica é regida por (II.1.17). Esta equação foi deduzida da hipótese que $|\psi(t)\rangle = U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle$ e que $\langle A(t)\rangle = \langle\psi(t)|A|\psi(t)\rangle$ deve descrever a dinâmica clássica de $A_c(t)$ quando $\hbar \to 0$. Esta é a chamada versão de Schrödinger da mecânica quântica. A evolução temporal é atribuída a $|\psi(t)\rangle$ e os operadores carregam, eventualmente, apenas dependência temporal explícita. Entretanto, esta não é a única maneira de encarar o problema. Como estamos, em última instância, interessados em $\langle\psi(t)|A(t)|\psi(t)\rangle$ podemos reescrevê-lo como

$$\langle\psi(t)|A(t)|\psi(t)\rangle = \langle\psi(t_0)|U(t_0,t)A(t)U(t,t_0)|\psi(t_0)\rangle. \quad \text{(II.2.1)}$$

Vamos definir um estado $|\psi_H\rangle$ como

$$|\psi_H\rangle \equiv |\psi(t_0)\rangle = U^\dagger(t,t_0)|\psi(t)\rangle \quad \text{(II.2.2)}$$

e um operador $A_H(t)$ como

$$\begin{aligned}
A_H(t) &\equiv U(t_0,t)A(t)U(t,t_0) \\
&= U^\dagger(t,t_0)A(t)U(t,t_0) \\
\Rightarrow \langle\psi(t)|A(t)|\psi(t)\rangle &= \langle\psi_H|A_H(t)|\psi_H\rangle. \quad \text{(II.2.3)}
\end{aligned}$$

Assim temos

$$\begin{aligned}
\frac{dA_H}{dt} &= \frac{dU^\dagger}{dt}A(t)U + U^\dagger\frac{dA}{dt}U + U^\dagger A\frac{dU}{dt} \\
&= \frac{i}{\hbar}U^\dagger HAU + U^\dagger\frac{dA}{dt}U - \frac{i}{\hbar}U^\dagger AHU \\
&= \left(\frac{dA}{dt}\right)_H + \frac{i}{\hbar}\left[H_H, A_H\right] \\
\Rightarrow \frac{dA_H}{dt} &= \left(\frac{\partial A}{\partial t}\right)_H + \frac{1}{i\hbar}\left[A_H(t), H_H(t)\right], \quad \text{(II.2.4)}
\end{aligned}$$

que é a chamada *equação de Heisenberg* para a evolução de $A_H(t)$.

Tomando $\langle\rangle$ com $|\psi_H\rangle = |\psi(t_0)\rangle$ temos de (II.2.4):

$$\frac{d\langle A\rangle}{dt} = \left\langle\frac{\partial A}{\partial t}\right\rangle + \frac{1}{i\hbar}\langle[A, H]\rangle$$

como em (II.1.13).

Nesta nova versão, os estados estão fixos no tempo e os operadores carregam toda a dependência temporal. Entretanto, a evolução dos valores médios dada por (II.1.13) fica inalterada. Esta nova versão é a chamada *versão de Heisenberg* da mecânica quântica.

Então:

Schrödinger $\rightarrow |\psi(t)\rangle$ e $Q \neq Q(t)$ exceto por dependência temporal explícita.

Heisenberg $\rightarrow |\psi(t_0)\rangle$ e $Q = Q(t)$

Exemplo:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(q) \rightarrow H_H = \frac{p_H^2}{2m} + V(q_H)$$

e

$$[q, p] = [q_H, p_H] = i\hbar$$

$$\Rightarrow \begin{cases} \frac{dp_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[p_H, H_H\right] = -\frac{\partial V(q_H)}{\partial q_H} \\ \\ \frac{dq_H}{dt} = \frac{1}{i\hbar}\left[q_H, H_H\right] = \frac{p_H}{m} \end{cases} \quad \text{(II.2.5)}$$

De agora em diante vamos omitir o índice (H) e fica subentendido que sempre que atribuirmos dinâmica aos operadores estaremos usando a versão de Heisenberg.

Na versão de Heisenberg vemos imediatamente que se $A(t)$ é tal que

a) $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$

b) $[A, H] = 0$

então $dA/dt = 0$, ou seja, A é uma constante de movimento. Como $[A, H] = 0$ em qualquer versão, temos ainda pela (II.1.13) $d\langle A\rangle/dt = 0$, que é também válido em qualquer versão.

i) Evolução temporal do operador densidade.

Vamos agora estudar a evolução temporal do operador densidade $\hat{\rho}(t)$.

Na versão de Schrödinger o operador $\hat{\rho}$ pode ser escrito como

$$\hat{\rho}(t) = \sum_k p_k|\psi_k(t)\rangle\langle\psi_k(t)|, \quad \text{(II.2.6)}$$

já que os kets carregam a dependência temporal. Então

$$\begin{aligned}
\frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \sum_k p_k \frac{d|\psi_k\rangle}{dt}\langle\psi_k| + \sum_k p_k|\psi_k\rangle\frac{d}{dt}\langle\psi_k| \\
&= \sum_k p_k \frac{H}{i\hbar}|\psi_k\rangle\langle\psi_k| - \sum_k p_k|\psi_k\rangle\langle\psi_k|\frac{H}{i\hbar} \\
\Rightarrow \frac{d\hat{\rho}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[H,\hat{\rho}] \quad \text{(II.2.7)}
\end{aligned}$$

que é equivalente à equação de Schrödinger para $|\psi(t)\rangle$. Note que na versão de Schrödinger $\hat{\rho}$ depende do tempo porque na realidade ele representa o estado do sistema e não um observável.

Na versão de Heisenberg, $\hat{\rho}(t) = \hat{\rho}(t_0)$, independente do tempo, novamente refletindo o fato de $\hat{\rho}$ representar o estado físico do sistema. Aqui os observáveis passam a depender do tempo obedecendo equações do tipo (II.2.4) e os seus valores médios, independentemente da versão, são tais que

$$\langle A(t)\rangle = \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}(t_0)A(t)\right]. \quad \text{(II.2.8)}$$

Outra maneira de vermos a mesma coisa é usando a propriedade cíclica do traço

$$\begin{aligned}
\langle A(t)\rangle &= \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}(t_0)A_H(t)\right] \\
&= \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}(t_0)U^\dagger A U\right] \\
&= \mathrm{tr}\left[U\hat{\rho}(t_0)U^\dagger A\right] \\
&= \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}(t)A\right] \quad \text{(II.2.9)}
\end{aligned}$$

onde o último termo da equação representa $\hat{\rho}(t)$ e A na versão de Schrödinger.

ii) Sistemas conservativos.

Há um tipo de sistema cuja dinâmica pode ser descrita de uma forma relativamente simples. Estes são os chamados sistemas conservativos e neles, $H \neq H(t)$. Então, podemos tentar resolver a equação de evolução

$$i\hbar\frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = H|\psi(t)\rangle \quad \text{(II.2.10)}$$

através do ansatz

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)|\psi_n\rangle \quad \text{(II.2.11)}$$

onde

$$H|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle.$$

Então, substituindo (II.2.11) em (II.2.10) temos

$$\begin{aligned}
\sum_n i\hbar\frac{dc_n}{dt}|\psi_n\rangle &= \sum_n E_n c_n(t)|\psi_n\rangle \\
\Rightarrow i\hbar\frac{dc_n}{dt} &= E_n c_n \\
\Rightarrow c_n(t) &= c_n(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}
\end{aligned}$$

ou

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t_0)e^{-\frac{i}{\hbar}E_n(t-t_0)}|\psi_n\rangle \quad \text{(II.2.12)}$$

Se $|\psi(t_0)\rangle = |\psi_k\rangle$ temos $c_n(t_0) = \delta_{kn}$ e

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{E_k}{\hbar}(t-t_0)}|\psi_k\rangle \quad \text{(II.2.13)}$$

que é o chamado *estado estacionário*.

Portanto, para descrever a evolução temporal de um estado $|\psi(t)\rangle$ de um sistema conservativo precisamos resolver o problema de autovalores

$$H|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad \text{(II.2.14)}$$

que é o equivalente, em notação matricial, a

$$\sum_m \langle n|H|m\rangle \psi_m = E\psi_n \quad \text{(II.2.15)}$$

ou,

$$\int \langle x|H|x'\rangle \psi(x')dx' = E\psi(x) \text{ (representação contínua)}$$

No caso do operador densidade temos

$$\begin{aligned}
\langle m|\frac{d\hat{\rho}}{dt}|n\rangle &= \frac{1}{i\hbar}\left(\langle m|H\hat{\rho}|n\rangle - \langle m|\hat{\rho}H|n\rangle\right) \\
\Rightarrow \frac{\partial \rho_{mn}}{\partial t} &= \frac{1}{i\hbar}\sum_k \left(\langle m|H|k\rangle \rho_{kn} - \rho_{mk}\langle k|H|n\rangle\right) \\
&= \frac{1}{i\hbar}\sum_k E_k \delta_{mk}\rho_{kn} - E_n \delta_{kn}\rho_{mk} \\
&= \frac{1}{i\hbar}\left(E_m - E_n\right)\rho_{mn} \\
\Rightarrow \rho_{mn}(t) &= e^{-i\frac{(E_m - E_n)t}{\hbar}}\rho_{mn}(0). \quad \text{(II.2.16)}
\end{aligned}$$

O valor médio de qualquer observável A no instante t é dado por

$$\begin{aligned}
\langle A(t)\rangle &= \mathrm{tr}\left[\hat{\rho}A(t)\right] \\
&= \sum_{nm} e^{-i\frac{E_m - E_n}{\hbar}t}\rho_{mn}(0)A_{nm}. \quad \text{(II.2.17)}
\end{aligned}$$

Note que a contribuição dos termos diagonais de $\hat{\rho}$ ao $\langle A(t)\rangle$ é independente do tempo enquanto que a dos não diagonais oscila com frequência de Bohr

$$\omega_{mn} \equiv \frac{E_m - E_n}{\hbar}. \quad \text{(II.2.18)}$$

Consequentemente, se $\hat{\rho}$ representa um estado puro e além disso estacionário, $\rho_{mn} = \delta_{mn}\delta_{nk}$ e

$$\langle A(t)\rangle = \langle \psi_k|A|\psi_k\rangle = A_{kk}. \quad \text{(II.2.19)}$$

Por outro lado, no caso de uma mistura completamente incoerente, $\rho_{mn}(0) = |c_n|^2\delta_{mn}$ e

$$\langle A(t)\rangle = \sum_n |c_n|^2 A_{nn}. \quad \text{(II.2.20)}$$

iii) O oscilador harmônico

Vamos agora estudar, como exemplo, a dinâmica quântica de um dos sistemas mais importantes em física; o oscilador harmônico.

Através da análise conduzida até o momento, podemos escrever a hamiltoniana de um oscilador harmônico de coordenada q e momento linear p como

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 \quad \text{(II.2.21)}$$

onde $[q, p] = i\hbar$.

Dividindo H por $\hbar\omega$, que tem dimensão de energia, temos a hamiltoniana adimensional $\widetilde{H}$ dada por $\widetilde{H} = x^2 + y^2$ onde

$$x \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\, q \ ; \ \ y \equiv \frac{1}{\sqrt{2m\hbar\omega}}\, p \quad \text{(II.2.22)}$$

o que nos leva a $[x, y] = i/2$.

Definindo $a \equiv x + iy$ e $a^\dagger \equiv x - iy$ temos $\left[a, a^\dagger\right] = -i\,[x, y] + i\,[y, x] = 1$ e, em termos de a e $a^\dagger$, podemos escrever $\widetilde{H}$ como

$$\begin{aligned}
\widetilde{H} &= \left(\frac{a + a^\dagger}{2}\right)^2 + \left(\frac{a - a^\dagger}{2i}\right)^2 \\
&= \frac{a^2 + aa^\dagger + a^\dagger a + (a^\dagger)^2 - a^2 - (a^\dagger)^2 + aa^\dagger + a^\dagger a}{4} \\
&= \frac{aa^\dagger + a^\dagger a}{2} \quad \text{(II.2.23)}
\end{aligned}$$

Como $\left[a, a^\dagger\right] = 1$, $aa^\dagger = 1 + a^\dagger a$ e

$$\begin{aligned}
\widetilde{H} &= \frac{1 + 2a^\dagger a}{2} = a^\dagger a + \frac{1}{2} \\
\Rightarrow H &= \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) \quad \text{(II.2.24)}
\end{aligned}$$

Como H e $a^\dagger a$ comutam, eles possuem auto estados simultâneos. Vamos, então, estudar o problema

$$a^\dagger a|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle. \quad \text{(II.2.25)}$$

A primeira propriedade dos auto valores ξ é que

$$\langle\xi|a^\dagger a|\xi\rangle = \xi \geq 0,$$

pois

$$\langle\xi|a^\dagger a|\xi\rangle = ||a|\xi\rangle||^2 \geq 0. \quad \text{(II.2.26)}$$

A segunda é que tanto $a|\xi\rangle$ quanto $a^\dagger|\xi\rangle$ são também auto estados de $a^\dagger a$ pois

$$\begin{aligned}
a^\dagger a\,(a|\xi\rangle) &= \left(aa^\dagger - 1\right) a|\xi\rangle \\
&= aa^\dagger a|\xi\rangle - a|\xi\rangle \\
&= (\xi - 1)\, a|\xi\rangle \\
a^\dagger a\left(a^\dagger|\xi\rangle\right) &= a^\dagger\left(a^\dagger a + 1\right)|\xi\rangle \\
&= \xi a^\dagger|\xi\rangle + a^\dagger|\xi\rangle \\
&= (\xi + 1)\, a^\dagger|\xi\rangle
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ a aplicação $\left\{\begin{array}{l} a^\dagger|\xi\rangle \text{ implica em } \xi \to \xi + 1 \\ a|\xi\rangle \ \text{ implica em } \xi \to \xi - 1 \end{array}\right.$

Ou seja $\left\{\begin{array}{c} a^\dagger|\xi\rangle \propto |\xi + 1\rangle \overset{\text{normalizando}}{\longrightarrow} a^\dagger|\xi\rangle = \sqrt{\xi + 1}|\xi + 1\rangle \\ a|\xi\rangle \propto |\xi - 1\rangle \overset{\text{normalizando}}{\longrightarrow} a|\xi\rangle = \sqrt{\xi}|\xi - 1\rangle \end{array}\right.$ (II.2.27)

A terceira propriedade é que se aplicarmos a ao estado $|\xi\rangle$ indefinidamente, fatalmente teremos $\xi - n < 0$, o que é absurdo por (II.2.26). Desta forma concluímos que a única possibilidade é ter $\xi = n$, um número natural. Assim temos as seguintes relações:

$$\left.\begin{array}{c} a^\dagger a|n\rangle = n|n\rangle \\ a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n + 1}|n + 1\rangle \\ a|n\rangle = \sqrt{n}|n - 1\rangle \end{array}\right\} \text{(II.2.28)}$$

Daqui vemos que existe um estado $|0\rangle$ tal que $a|0\rangle = 0$ e a partir do qual podemos construir qualquer $|n\rangle$ através de $a^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle$ como

$$\begin{aligned} a^\dagger|0\rangle &= \sqrt{1}|1\rangle \\ (a^\dagger)^2|0\rangle &= \sqrt{1}\sqrt{2}|1\rangle \\ &\vdots \\ (a^\dagger)^n|0\rangle &= \sqrt{1}\ldots\sqrt{n}|n\rangle \end{aligned} \quad \Rightarrow |n\rangle = \frac{(a^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle. \quad \text{(II.2.29)}$$

Com esta expressão podemos construir as auto funções $\psi_n(x)$ do oscilador harmônico sem resolver a equação de Schrödinger (II.1.22), correspondente à hamiltoniana (II.2.21), da seguinte forma.

Como sabemos que $a|0\rangle = 0$ temos

$$\begin{aligned} \langle x|a|0\rangle &= \int dx' \langle x|a|x'\rangle \psi_0(x') \\ &= \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x\psi_0(x) + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d\psi_0}{dx} \\ &= 0, \quad \text{(II.2.30)} \end{aligned}$$

que tem como solução

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-m\omega x^2/2\hbar}.$$

Então, encontrando a representação de coordenadas de (II.2.29) aplicada em $|0\rangle$ temos

$$\langle x|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \left\{ \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} x - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \frac{d}{dx} \right\}^n \psi_0(x), \quad \text{(II.2.32)}$$

e os auto estados $|n\rangle$ são tais que

$$H|n\rangle = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega|n\rangle, \quad \text{(II.2.33)}$$

ou na representação de coordenadas (eq. de Schrödinger)

$$-\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \psi_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega\psi_n(x) \quad \text{(II.2.34)}$$

Na versão de Schrödinger a evolução de um estado $|\psi(0)\rangle = \sum_n c_n|n\rangle$ é dada por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}|n\rangle, \quad \text{(II.2.35)}$$

onde $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$. Na representação de coordenadas temos,

$$\psi(x,t) = \sum_n c_n e^{-iE_n t/\hbar}\psi_n(x), \quad \text{(II.2.36)}$$

que representa um pacote de onda movendo-se no potencial harmônico.

A forma (II.2.35/36) pode ser útil em várias situações. Uma delas é no estudo da correlação do estado $|\psi(t)\rangle$ com o estado inicial $|\psi(0)\rangle$, que é dada pela função

$$C(t) \equiv |\langle\psi(0)|\psi(t)\rangle|^2 = |\langle\psi(0)|U(t,0)|\psi(0)\rangle|^2. \quad \text{(II.2.37)}$$

É fácil ver pela (II.2.35) que

$$\begin{aligned} C(t) &= \sum_{mn} c_m^* c_n e^{-iE_n t/\hbar}\langle m|n\rangle \\ &= \sum_n |c_n|^2 e^{-iE_n t/\hbar}. \quad \text{(II.2.38)} \end{aligned}$$

Vamos assumir que em $t = 0$ os valores c_n variem muito lentamente na escala de energia $\hbar\omega$, ou seja, há um número muito grande de estados na combinação linear da (II.2.35) em $t = 0$. Então, podemos escrever

$$C(t) = \int dE \sum_n \delta(E - E_n)|g(E)|^2 e^{-iEt/\hbar},$$

onde $c_n \equiv g(E_n)$ e $g(E)$ é uma função contínua. A soma de $\delta(E - E_n)$ é a densidade de estados $\rho(E)$ e portanto

$$C(t) = \int dE \rho(E)|g(E)|^2 e^{-iEt/\hbar}. \quad \text{(II.2.39)}$$

Se a função $\rho(E)|g(E)|^2$ está centrada em E_0 e possui uma largura ΔE, a contribuição principal para a função $C(t)$ vem de um intervalo de tempo da ordem de $\Delta t \cong \hbar/\Delta E$ em torno de $t = 0$. Portanto podemos escrever que $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ que é uma relação de incerteza entre tempo e energia. Note, porém, que a origem desta relação nada tem a ver com a que obtivemos no caso de observáveis incompatíveis. A escala Δt determina, basicamente, o tempo em que o sistema permanece no estado inicial $|\psi(0)\rangle$. No caso de um estado estacionário, $\Delta E \sim 0$ e então $\Delta t \to \infty$.

Obviamente podemos estudar $\langle A(t)\rangle$ através da (II.2.35) mas há maneiras mais simples de fazê-lo. Usando a versão de Heisenberg podemos escrever diretamente

$$\frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial t} + \frac{1}{i\hbar}[A, H]$$

o que nos permite estudar a evolução de operadores como $q(t)$ e $p(t)$ de forma mais direta. Assim temos, usando H em (II.2.21),

$$\left.\begin{aligned} \tfrac{dq}{dt} &= \tfrac{1}{i\hbar}[q, H] = \tfrac{p}{m} \\ \tfrac{dp}{dt} &= \tfrac{1}{i\hbar}[p, H] = -m\omega^2 q \end{aligned}\right\} \text{(II.2.40)}$$

ou ainda, usando H em (II.2.24),

$$\left.\begin{aligned} \tfrac{da}{dt} &= \tfrac{1}{i\hbar}[a, H] = -i\omega a \Rightarrow a(t) = a(0)e^{-i\omega t} \\ \tfrac{da^\dagger}{dt} &= \tfrac{1}{i\hbar}\left[a^\dagger, H\right] = i\omega a \Rightarrow a^\dagger(t) = a^\dagger(0)e^{i\omega t} \end{aligned}\right\} \text{(II.2.41)}$$

o que simplifica ainda mais o problema pois como

$$\left.\begin{aligned} q(t) &= \sqrt{\tfrac{\hbar}{2m\omega}}\left(a(t) + a^\dagger(t)\right) \\ p(t) &= -i\sqrt{\tfrac{\hbar m\omega}{2}}\left(a(t) - a^\dagger(t)\right) \end{aligned}\right\} \text{(II.2.42)}$$

temos

$$\left.\begin{aligned} q(t) &= q(0)\cos(\omega t) + \tfrac{p(0)}{m\omega}\sin(\omega t) \\ p(t) &= -m\omega q(0)\sin(\omega t) + p(0)\cos(\omega t) \end{aligned}\right\} \text{(II.2.43)}$$

Como as versões coincidem em $t = 0$ (t_0) os operadores de Heisenberg $q(0)$ e $p(0)$ têm a mesma representação que na versão de Schrödinger.

Ao analisar (II.2.43) logo se imagina que a posição e o momento linear médios do oscilador evoluem como na mecânica clássica, o que não é verdade.Os valores médios de (II.2.43) devem ser tomados com relação a $|\psi(0)\rangle$ e, dependendo da sua preparação, $\langle q(t)\rangle$ e $\langle p(t)\rangle$ podem ter resultados diferentes dos esperados classicamente.

Se $|\psi(0)\rangle$ é um dos auto estados $|n\rangle$ as médias $\langle q(0)\rangle$ e $\langle p(0)\rangle$ serão sempre nulas e, portanto, $\langle q(t)\rangle = \langle p(t)\rangle = 0$. Por outro lado, se $|\langle x|\psi(0)\rangle|^2$ é um pacote gaussiano centrado em q_0 e com momento linear nulo ($p_0 = 0$) teremos

$$\begin{aligned} \langle q(t)\rangle &= q_0\cos(\omega t) \\ \langle p(t)\rangle &= -m\omega q_0\sin(\omega t) \end{aligned}$$

pois $\langle p(0)\rangle = 0$ na (II.2.43).

iv) O oscilador harmônico forçado

Um outro exemplo de sistema físico muito apropriado para a versão de Heinseberg é o do oscilador harmônico forçado. Este é descrito por

$$H = H(t) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 q^2 - qF(t) - pG(t)$$

onde $F(t)$ e $G(t) \in \mathbb{R}$ são não nulos se $t_1 < t < t_2$.

Então, usando (II.2.42) temos

$$H = \hbar\omega\left(a^\dagger a + \frac{1}{2}\right) + f(t)a + f^*(t)a^\dagger$$

onde

$$f(t) = -\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}F(t) + i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}G(t)$$

A equação de Heinsenberg para $a(t)$ é então

$$i\hbar\frac{da}{dt} = [a, H] \Rightarrow \frac{da}{dt} + i\omega a = -\frac{i}{\hbar}f^*(t) \quad \text{(II.2.44)}$$

Para resolver esta equação vamos usar o conceito da função de Green do sistema que é tal que

$$\frac{dG(t-t')}{dt} + i\omega G(t-t') = \delta(t-t'). \qquad \text{(II.2.45)}$$

o que nos permite escrever qualquer solução particular de (II.2.44) como

$$a(t) = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} G(t-t')f^*(t')dt'$$

Por outro lado, a (II.2.45) nos diz que $G(t-t') \propto e^{-i\omega(t-t')}$ se $t > t'$ ou $t < t'$. Integrando esta equação temos

$$\begin{aligned}\int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon}\left[\frac{dG(t-t')}{dt} + i\omega G(t-t')\right]dt &= \int_{t'-\epsilon}^{t'+\epsilon}\delta(t-t')dt = 1\\ \Rightarrow \lim_{\epsilon\to 0}\left[G(\epsilon) - G(-\epsilon)\right] &= 1\end{aligned}$$

Assim, podemos definir duas formas para G:

$$\begin{aligned}G_R(t-t') &\equiv \theta(t-t')e^{-i\omega(t-t')} \text{ (retardada)}\\ G_A(t-t') &\equiv -\theta(t'-t)e^{-i\omega(t-t')} \text{ (avançada)}\end{aligned}$$

A solução homogênea da (II.2.44), ou seja, a solução de $da/dt + i\omega a = 0$, será denotada por $a_{in}(t)$ se $t < t_1$ e $a_{out}(t)$ se $t > t_2$. Nestes intervalos de tempo não há qualquer termo forçante atuando em (II.2.44). Portanto, podemos escrever a solução $a(t)$ de duas formas: ou evoluímos do passado para o futuro, $a_{in}(t)$ com $G_R(t-t')$, ou do futuro para o passado, $a_{out}(t)$ com $G_A(t-t')$. Explicitamente,

$$\begin{aligned}a(t) &= a_{in}(t) - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} G_R(t-t')f^*(t')dt'\\ &= a_{in}(t) - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{t} e^{-i\omega(t-t')}f^*(t')dt' \quad \text{(II.2.46)}\end{aligned}$$

ou

$$\begin{aligned}a(t) &= a_{out}(t) - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} G_A(t-t')f^*(t')dt'\\ &= a_{out}(t) + \frac{i}{\hbar}\int_{t}^{\infty} e^{-i\omega(t-t')}f^*(t')dt' \quad \text{(II.2.47)}\end{aligned}$$

Subtraindo (II.2.47) de (II.2.46) temos

$$a_{out}(t) = a_{in}(t) - \frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega(t-t')} f^*(t')dt'$$

ou ainda, usando que $a_{in}(t) = a_{in}e^{-i\omega t}$ e $a_{out}(t) = a_{out}e^{-i\omega t}$, podemos reecrever

$$a_{out} = a_{in} - \frac{i}{\hbar}g^*(\omega) \quad \text{(II.2.48)}$$

onde

$$g(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t'} f(t')dt'$$

é a decomposição de Fourier do termo forçante.

Obviamente, em termos dos operadores *in* e *out* temos duas maneiras de escrever H:

se $t < t_1$,

$$H = H_{in} = \hbar\omega\left(a_{in}^\dagger a_{in} + \frac{1}{2}\right);\ H_{in}|n\rangle_{in} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle_{in}$$

se $t > t_2$,

$$H = H_{out} = \hbar\omega\left(a_{out}^\dagger a_{out} + \frac{1}{2}\right);\ H_{out}|n\rangle_{out} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega|n\rangle_{out}$$

A fim de relacionar os estados (e operadores) *in* e *out* vamos definir um operador unitário S tal que
$a_{out} = S^\dagger a_{in} S \Rightarrow |n\rangle_{out} = S^\dagger|n\rangle_{in} \quad (S^\dagger = U)$

Para determinar S notemos que quando $[A,[A,B]] = [B,[A,B]] = 0$ (que é satisfeita por a e $a^\dagger$) temos

$$\exp(A+B) = \exp(A)\exp(B)\exp(-[A,B]/2)$$

Assim, se $S \equiv \exp\left(\alpha a^\dagger - \alpha^* a\right)$ temos

$$\begin{aligned}
S &= \exp(-\alpha^* a)\exp\left(\alpha a^\dagger\right)\exp\left({}^{|\alpha|^2}/_2\right) \\
S^\dagger &= \exp\left(-\alpha a^\dagger\right)\exp(\alpha^* a)\exp\left({}^{-|\alpha|^2}/_2\right) \\
\Rightarrow S^\dagger a S &= e^{-\alpha a^\dagger} a e^{\alpha a^\dagger} \\
&= a - \alpha\left[a^\dagger, a\right] \\
&= a + \alpha
\end{aligned}$$

Então temos

$$S = e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a} \quad \text{(II.2.48)}$$

onde $\alpha = -ig^*(\omega)/\hbar$.

Vamos assumir que $|\psi\rangle = |0\rangle_{in}$ se $t < t_1$. Queremos saber ${}_{out}\langle n|0\rangle_{in} = {}_{out}\langle n|S|0\rangle_{out}$, ou seja, como decompor o estado evoluido na base $|n\rangle_{out}$. Como podemos escrever todos os operadores na *out* temos (omitindo os "out")

$$\begin{aligned}
S|0\rangle &= e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}|0\rangle \\
&= e^{-|\alpha|^2/2} e^{\alpha a^\dagger} e^{-\alpha^* a}|0\rangle \\
\Rightarrow \langle n|S|0\rangle &= e^{-|\alpha|^2/2}\langle n|\sum_{p=0}^{\infty}\alpha^p\frac{a^{\dagger p}}{p!}|0\rangle \\
&= e^{-|\alpha|^2/2}\sum_{p=0}^{\infty}\underbrace{\langle n|p\rangle}_{\delta_{np}}\frac{\alpha^p}{\sqrt{p!}} \\
&= e^{-|\alpha|^2/2}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}
\end{aligned}$$

ou seja,

$$_{out}\langle n|0\rangle_{in} = e^{-|\alpha|^2/2}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \quad \text{(II.2.49)}$$

Definindo $P_n(\omega) = |_{out}\langle n|0\rangle_{in}|^2$ temos $P_n(\omega) = e^{-|\alpha|^2}|\alpha|^{2n}/n!$ que deve ser comparada a uma distribuição de Poisson $P_n(\bar{n}) = e^{-\bar{n}}\bar{n}^n/n!$ identificando-se $\bar{n} = |\alpha|^2 = |g(\omega)|^2/\hbar^2$, ou seja, a componente de Fourier da força externa na frequência natural do oscilador em módulo quadrado ($/\hbar^2$). Portanto, o estado $S|0\rangle$ é decomposto na base $|n\rangle$ com coeficientes cujos módulos quadrados descrevem uma distribuição poissoniana.

Como $a_{out} = a_{in} + \alpha$, $a^\dagger_{out} = a^\dagger_{in} + \alpha^*$

$$a^\dagger_{out}a_{out} = a^\dagger_{in}a_{in} + \alpha a^*_{in} + \alpha^* a_{in} + |\alpha|^2$$

e

$$_{in}\langle 0|a^\dagger_{out}a_{out}|0\rangle_{in} = |\alpha|^2 = \bar{n}$$

Uma outra propriedade importante decorre da translação $a_{out} = a_{in} + \alpha$ ao aplicarmos a_{out} em $|0\rangle_{in}$

$$\begin{aligned} a_{out}|0\rangle_{in} &= \underbrace{a_{in}|0\rangle_{in}}_{=0} + \alpha|0\rangle_{in} \\ \Rightarrow |0\rangle_{in} &= S|0\rangle_{out} \end{aligned}$$

é auto estado de a_{out} com auto valor α. Portanto,

$$_{in}\langle 0|a^\dagger_{out}a_{out}|0\rangle_{in} = \alpha^*\alpha = {}_{in}\langle 0|a^\dagger_{out}|0\rangle_{in}\ {}_{in}\langle 0|a_{out}|0\rangle_{in}.$$

Os estados $|0\rangle_{in} = S|0\rangle_{out}$, auto estados de a_{out}, são os chamados *estados semiclássicos*, ou *coerentes*, do oscilador harmônico.

Resumindo, os estados coerentes são tais que $a|\alpha\rangle = \alpha|\alpha\rangle$ e, definindo-se $S_\alpha \equiv e^{\alpha a^\dagger - \alpha^* a}$ tal que $S^\dagger_\alpha = S^{-1}_\alpha = S_{-\alpha}$ temos

$$|\alpha\rangle = S_\alpha|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle \quad \text{(II.2.50)}$$

Propriedades:

a) $\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$

b) $\langle\beta|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{-|\beta|^2/2}e^{\alpha\beta^*} \Rightarrow |\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}$

c) $\frac{1}{\pi}\int|\alpha\rangle\langle\alpha|d^2\alpha = \frac{1}{\pi}\int|\alpha\rangle\langle\alpha|d\,(\mathrm{Re}\,\alpha)\,d\,(\mathrm{Im}\,\alpha) = 1$

Ou seja, o espaço é supercompleto.

Demonstrações:

a) $\langle\alpha|\alpha\rangle = \langle 0|S^\dagger S|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1$

b) $\langle\beta|\alpha\rangle = \langle 0|S_{-\beta}S_\alpha|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{-|\beta|^2/2}\langle 0|e^{\beta^* a}e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle$ mas

$$\begin{aligned} \langle 0|e^{\beta^* a}e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle &= \langle 0|e^{\beta^* a + \alpha a^\dagger + \frac{\beta^*\alpha}{2}}|0\rangle = \langle 0|e^{\alpha a^\dagger}e^{\beta^* a}e^{\beta^*\alpha}|0\rangle \\ &= e^{\beta^*\alpha}\langle 0|e^{\alpha a^\dagger}|0\rangle = e^{\beta^*\alpha} \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \langle\beta|\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}e^{-|\beta|^2/2}e^{\alpha\beta^*} \Rightarrow |\langle\beta|\alpha\rangle|^2 = e^{-|\alpha-\beta|^2}$$

c) $\int|\alpha\rangle\langle\alpha|d^2\alpha = \sum_{mn}|m\rangle\langle m|\alpha\rangle\langle\alpha|n\rangle\langle n|d^2\alpha$ mas

$$\begin{aligned} \langle m|\alpha\rangle &= \langle m|S_\alpha|0\rangle = e^{-|\alpha|^2/2}\frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}} \\ \Rightarrow \int|\alpha\rangle\langle\alpha|d^2\alpha &= \sum_{mn}|m\rangle\langle n|\int e^{-|\alpha|^2}\frac{\alpha^m}{\sqrt{m!}}\frac{\alpha^{*n}}{\sqrt{n!}}d^2\alpha \end{aligned}$$

Por outro lado, $d^2\alpha = d\,(\mathrm{Re}\,\alpha)\,d\,(\mathrm{Im}\,\alpha) = rdrd\theta$ em representação polar. Assim,

$$\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha = \sum_{mn} |m\rangle\langle n| \int_0^{2\pi}\int_0^{\infty} rdrd\theta e^{-r^2} \frac{r^{m+n}}{\sqrt{n!}\sqrt{m!}} e^{i(m-n)\theta}$$

onde $\alpha = re^{i\theta}$. A integral angular nos leva a $2\pi\delta_{mn}$ e portanto

$$\begin{aligned}
\int |\alpha\rangle\langle\alpha| d^2\alpha &= \sum_n |n\rangle\langle n| 2\pi \int_0^{\infty} dr\, re^{-r^2} \frac{r^{2n}}{n!} \\
&= \sum_n |n\rangle\langle n| \pi \int_0^{\infty} d(r^2) e^{-r^2} \frac{\left(r^2\right)^n}{n!} \\
&= \pi \sum_n |n\rangle\langle n| \\
&= \pi \\
\Rightarrow \frac{1}{\pi}\int d^2\alpha |\alpha\rangle\langle\alpha| &= 1
\end{aligned}$$