

Mecânica Quântica no Espaço de Fases

Guilherme Monteiro Oliveira

Instituto de Física,

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Porto Alegre

Brasil

2013

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Mecânica Quântica no Espaço de Fases

Guilherme Monteiro Oliveira

Bolsista PIBIC CNPq-UFRGS

Trabalho de conclusão de curso submetido ao Instituto de Física como parte dos requisitos para a obtenção do grau de Bacharel em Física: Pesquisa Básica.

Silvio Renato Dahmen

Orientador

Sandra Denise Prado

Coorientadora

Instituto de Física – UFRGS

Porto Alegre, Brazil

3 de julho de 2013

Resumo

Neste trabalho estudamos uma das formulações da mecânica quântica no espaço de fases. Para tal utilizamos o formalismo de Moyal, obtido através de uma deformação da álgebra do espaço de fases clássico e a transformação de Wigner, um método que associa funções de posição do espaço de Hilbert à funções densidade de quasiprobabilidade do espaço de fases.

Com estas ferramentas, estudamos os casos da partícula livre e do oscilador harmônico. Mostramos por fim que os estados coerentes de Glauber estão intimamente relacionados à equação de Liouville no caso do oscilador harmônico.

Abstract

In this work we discuss one example of phase space formulation of quantum mechanics, namely Moyal Formalism. We use Moyal Formalism, obtained through a deformation of the classical phase space algebra and the Wigner transformation, a method which associates functions defined on a Hilbert space with quasi-probability densities in a classical phase space.

As an example of the application of this method we use these tools to discuss the free particle and the harmonic oscillator. We show that there is a correspondence between the Liouville equation and the coherent Glauber states for the harmonic oscillator as well as its phase space version.

Sumário

1	Introdução	5
2	Produto de Moyal	7
2.1	Relação de Incerteza	10
3	Equação de Liouville	12
3.1	Partícula Livre	14
3.2	Oscilador Harmônico	17
4	A Transformação de Wigner	22
4.1	Combinação Linear	23
4.2	Oscilador Harmônico	25
5	Estados Coerentes do Oscilador Harmônico	28
6	Conclusões	31
	Apêndice A Oscilador Harmônico via Equação de Schrödinger	33
	Apêndice B Estados de Glauber	35
	Apêndice C Função de Wigner geral: Oscilador Harmônico	36
	Referências	40

1 Introdução

A Mecânica Quântica (MQ) é uma das mais bem sucedidas teorias físicas. A visão que temos hoje é que a Mecânica Clássica (MC) pode ser obtida da MQ no limite de números quânticos grandes. Esta visão é traduzida através do Princípio de Correspondência de Bohr [1]. Entretanto, por questões de praticidade, tratamos as duas teorias como algo independente.

Porém, nos últimos anos, com o avanço das técnicas experimentais e da nanotecnologia, encontramos-nos em um regime de aplicações onde a fronteira entre as duas mecânicas torna-se difusa. Assim, a compreensão da transição quântica-clássica deixou de ser um problema meramente teórico para se tornar um problema prático.

Neste sentido, a partir da primeira metade do século passado, uma série de trabalhos têm sugerido uma descrição mais geral para este problema, começando por Groenewold[2] em 1946 e sedimentado por Moyal [3] em 1949. Um vez que a MC, em sua formulação Hamiltoniana, pode ser interpretada como uma dinâmica das densidades de probabilidade no espaço de fases, a ideia de Groenewold e Moyal foi sugerir que a MQ nada mais seria que uma deformação da álgebra do espaço de fases clássico. O intuito de Groenewold e Moyal era a formulação de uma MQ sem a necessidade de operadores com ordenamentos específicos e sem o conceito de espaço de Hilbert, no qual o conceito de probabilidade é introduzido de maneira *ad hoc*.

Esta deformação da álgebra se torna necessária pela não-comutatividade dos operadores posição e momentum – $[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar$ – uma vez que esta relação esta no cerne da MQ. As seguintes equações demonstram explicitamente o porquê da necessidade desta deformação¹:

$$\iint dqdp \, qp \, \rho(q, p) - \iint dqdp \, pq \, \rho(q, p) = 0 \quad (1.1) \quad \text{Clássico}$$

$$\int dq \, \Psi^\dagger(q) \, \hat{q}\hat{p} \, \Psi(q) - \int dq \, \Psi^\dagger(q) \, \hat{p}\hat{q} \, \Psi(q) = i\hbar \quad (1.2) \quad \text{Quântico}$$

onde em (1.1) usamos as funções e variáveis do espaço de fases e em (1.2) os operadores e funções de onda do espaço de Hilbert. Para resolver este problema precisamos introduzir em (1.1) um mecanismo que recupere a não-comutatividade da MQ. Este mecanismo é conhecido como *Produto Estrela de Moyal* (\star):

¹Todas as integrais neste trabalho sem limites de integração explícitos serão tomadas de $-\infty$ até ∞ .

$$\iint dqdp \hat{q} \star \hat{p} \rho(q, p) - \iint dqdp \hat{p} \star \hat{q} \rho(q, p) = i\hbar \quad (1.3)$$

e este será nosso ponto de partida para desenvolvermos uma formulação da MQ em um espaço de fases clássico deformado.

Com este objetivo em mente, organizamos esta monografia da seguinte forma: no capítulo 2 são descritas as principais ideias necessárias para um bom entendimento da álgebra, assim como a dedução deste produto estrela. Discutiremos seu papel na transição da MQ no espaço de Hilbert para a MQ no espaço de fases, assim como aplicaremos o formalismo no cálculo das relações de incerteza de posição-momentum e de energia-tempo.

No capítulo 3 estudaremos, com auxílio do teorema de transporte de Reynolds associado à equação de Liouville, um método de obter informações sobre sistemas físicos no espaço de fases em um formalismo probabilístico. Em seguida, aplicamos este formalismo à partícula livre e ao oscilador harmônico.

O capítulo 4 tratará da transformação de Wigner, um método de associação direta entre as funções de onda do espaço de Hilbert e as funções densidade no espaço de fases. Como exemplo de aplicação, estudaremos um oscilador harmônico descrito por uma superposição de autoestados de energia.

Por fim, no capítulo 5 concluímos com uma síntese dos resultados obtidos: projetamos os resultados clássicos obtidos no capítulo 3 nas funções densidade obtidas através das transformações de Wigner estudadas no capítulo 4 e explicitamente calculadas no Apêndice C para o oscilador harmônico.

2 Produto de Moyal

A principal função do produto estrela de Moyal é transformar os operadores da MQ em funções escalares no espaço de fases. Sendo assim, perde-se a necessidade de manter sequências fixas de aplicação dos operadores ou ordenamento, ou seja, poderíamos aplicar qp em certa função densidade e obtermos o mesmo resultado que pq . A seguir desenvolveremos algumas ideias básicas de como utilizar este mecanismo em sistemas físicos.

O primeiro passo é determinar a associação entre um operador $\hat{a}(\hat{q}, \hat{p})$ do espaço de Hilbert e uma função escalar $a(q, p)$ do espaço de fases. Dado o espaço (q, p) contínuo e diferenciável, temos[2]:

$$\hat{a}(\hat{q}, \hat{p}) = \iint dqdp \, m(q, p, \hat{q}, \hat{p})a(q, p), \quad (2.1)$$

onde $m(q, p, \hat{q}, \hat{p})$ é o núcleo (ou *kernel*) da transformação desejada. O método natural de transformação utilizado em MQ é a transformada de Fourier. Assim, esperamos que o núcleo seja da forma

$$m(q, p, \hat{q}, \hat{p}) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \iint dx dy \, e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{-\frac{i}{\hbar}(px + qy)}, \quad (2.2)$$

onde a constante $(4\pi^2\hbar^2)^{-1}$ é uma constante de normalização. Esta transformação é comumente denominada *Transformação de Weyl*. A fim de calcular o produto estrela podemos definir os operadores:

$$\hat{a}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \iiint dx dy dq dp \, e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{-\frac{i}{\hbar}(px + qy)} a(q, p) \quad (2.3)$$

$$\hat{b}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \iiint dx' dy' dq' dp' \, e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')} e^{-\frac{i}{\hbar}(p'x' + q'y')} b(q', p') \quad (2.4)$$

onde $m(q, p, \hat{q}, \hat{p})$ e $m'(q', p', \hat{q}, \hat{p})$ são os seus respectivos núcleos. Multiplicando (2.3) e (2.4) e integrando para q, p, q' e p' obtemos:

$$\hat{a}(\hat{q}, \hat{p}) \hat{b}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int dx dy dx' dy' \, a(x, y)b(x', y') e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')}. \quad (2.5)$$

Sabemos que a exponencial de um certo operador é, por sua vez, um operador e, portanto, não podemos agrupar os expoentes em (2.5) sem violar a não-comutatividade

$[\hat{q}, \hat{p}]$. Todavia, não existe restrição alguma em alterar a ordem da soma dos operadores no expoente de uma única exponencial.

A solução deste problema é, senão, determinar um mecanismo que nos permita agregar estas duas exponenciais em uma, sem violar a não-comutatividade. Deste modo transformamos uma multiplicação de operadores exponenciais em uma única exponencial, onde o expoente é uma soma de operadores. Este mecanismo existe na forma de um teorema demonstrado por Baker, Campbell e Hausdorff [4], que se apresenta na seguinte forma geral:

$$\log \left(e^{\hat{a}} e^{\hat{b}} \right) = \hat{a} + \hat{b} + \frac{1}{2}[\hat{a}, \hat{b}] + \frac{1}{12}[\hat{a}, [\hat{a}, \hat{b}]] - \frac{1}{12}[\hat{b}, [\hat{a}, \hat{b}]] - \frac{1}{24}[\hat{b}, [\hat{a}, [\hat{a}, \hat{b}]]] + \dots \quad (2.6)$$

Aplicando (2.6) nas exponenciais de (2.5), obtemos:

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')} = e^{\frac{i}{\hbar}\{\hat{p}(x+x') + \hat{q}(y+y')\}} e^{\frac{i}{2\hbar}(xy' - yx')}. \quad (2.7)$$

Este último passo é o responsável pela transformação de um operador do espaço de Hilbert em sua função escalar correspondente no espaço de fases. Definimos, assim, a forma integral do Produto Estrela de Moyal:

$$\hat{a}(\hat{q}, \hat{p}) \star \hat{b}(\hat{q}, \hat{p}) = \frac{1}{4\pi^2 \hbar^2} \int dx dy dx' dy' a(x, y) b(x', y') e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{\frac{i}{2\hbar}(xy' - yx')} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')} \quad (2.8)$$

Por uma questão de conveniência, é possível reescrever a expressão (2.8) de forma mais compacta, o que faremos a seguir.

Por praticidade, nos passos seguintes iremos trabalhar apenas com as exponenciais de (2.8). Expandindo $e^{\frac{i}{2\hbar}(xy' - yx')}$ em série de potência obtemos:

$$\begin{aligned} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} & \left[1 + \frac{i}{2\hbar}(xy' - yx') - \frac{1}{8\hbar^2}(xy' - yx')^2 + \dots \right] e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')} = \\ e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} & \left[1 - \frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q - \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p) - \frac{\hbar^2}{8}(\overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q - \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p)^2 + \dots \right] e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde ∂_p representa uma derivada em relação a p e ∂_q representa uma derivada em relação a q . As flechas indicam quais das exponenciais devem ser diferenciadas (à direita ou à esquerda dos operadores diferenciais). Por fim, temos que:

$$1 + \frac{i\hbar}{2}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q) - \frac{\hbar^2}{8}(\overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q)^2 + \dots = \exp\left(\frac{i\hbar}{2}\{\overleftarrow{\partial}_q, \overrightarrow{\partial}_p\}\right), \quad (2.10)$$

onde

$$\{\overleftarrow{\partial}_q, \overrightarrow{\partial}_p\} = \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q. \quad (2.11)$$

Deste modo,

$$e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{\frac{i}{2\hbar}(xy' - yx')} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')} = e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x + \hat{q}y)} e^{\frac{i\hbar}{2}\{\overleftarrow{\partial}_q, \overrightarrow{\partial}_p\}} e^{\frac{i}{\hbar}(\hat{p}x' + \hat{q}y')}. \quad (2.12)$$

Substituindo-se (2.12) em (2.8), chegamos à:

$$\begin{aligned} \hat{a}(\hat{q}, \hat{p}) \star \hat{b}(\hat{q}, \hat{p}) &= \left(\frac{1}{2\pi\hbar} \iint dx dy a(x, y) e^{\frac{i}{\hbar}(px + qy)} \right) \\ \exp\left(\frac{i\hbar}{2}\{\overleftarrow{\partial}_q, \overrightarrow{\partial}_p\}\right) &\left(\frac{1}{2\pi\hbar} \iint dx' dy' b(x', y') e^{\frac{i}{\hbar}(px' + qy')} \right). \end{aligned} \quad (2.13)$$

Como as integrais (2.13) são apenas transformadas de Fourier, obtemos uma forma direta de associar os operadores quânticos do espaço de Hilbert às funções escalares no espaço de fases. Esta relação é conhecida como produto estrela de Moyal.

$$\boxed{\hat{a}(\hat{q}, \hat{p}) \star \hat{b}(\hat{q}, \hat{p}) = a(q, p) e^{\frac{i\hbar}{2}\{\overleftarrow{\partial}_q, \overrightarrow{\partial}_p\}} b(q, p)} \quad (2.14)$$

Como exemplo de aplicação desta fórmula, calculemos $[\hat{q}, \hat{p}]$. Para tal é necessário calcular explicitamente $\hat{p} \star \hat{q}$ e $\hat{q} \star \hat{p}$. Expandindo (2.14) em série de Taylor até primeiro ordem (q e p são lineares), temos

$$\hat{q} \star \hat{p} = q \left(1 + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q + \dots \right) p = qp + \frac{i\hbar}{2} \quad (2.15)$$

e

$$\hat{p} \star \hat{q} = p \left(1 + \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_q \overrightarrow{\partial}_p - \frac{i\hbar}{2} \overleftarrow{\partial}_p \overrightarrow{\partial}_q + \dots \right) q = pq - \frac{i\hbar}{2}. \quad (2.16)$$

Subtraindo (2.16) de (2.15) obtemos a não comutatividade esperada.

$$[\hat{q}, \hat{p}] = \hat{q} \star \hat{p} - \hat{p} \star \hat{q} = qp + \frac{i\hbar}{2} - pq + \frac{i\hbar}{2} = i\hbar \quad (2.17)$$

Nos casos em que um dos operadores \hat{a} e \hat{b} são aplicados isoladamente, a aplicação (2.14) é realizada juntamente com o operador identidade. Sendo assim, se formos calcular, por exemplo, a transformada de \hat{q} temos que este é dado simplesmente por q .

2.1 Relação de Incerteza

Quanto à posição e momentum.

Usando o formalismo de Moyal podemos calcular o princípio de incerteza de forma bastante simples. Sem perda de generalidade, podemos tomar $\langle p \rangle = \langle q \rangle = 0$. Simbolizando $\sigma_{p,\star}^2$ como a variância de momentum e $\sigma_{q,\star}^2$ como a variância de posição calculadas segundo o formalismo de Moyal podemos escrever, com auxílio da desigualdade de Schwarz [4], a seguinte relação:

$$\sigma_{p,\star}^2 \sigma_{q,\star}^2 = \langle \hat{p} \star \hat{p} \rangle \langle \hat{q} \star \hat{q} \rangle \geq |\langle \hat{p} \star \hat{q} \rangle|^2 \quad (2.18)$$

Substituindo (2.16) em (2.18), obtemos:

$$\sigma_{p,\star}^2 \sigma_{q,\star}^2 \geq \left| \left\langle pq - \frac{i\hbar}{2} \right\rangle \right|^2 = \left| \langle pq \rangle - \frac{i\hbar}{2} \right|^2 \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.19)$$

ou seja, o princípio de incerteza como conhecido.

$$\boxed{\sigma_{p,\star} \sigma_{q,\star} \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (2.20)$$

Quanto à energia e tempo.

Como o comutador $[\hat{q}, \hat{p}]$ não fora alterado na transição do espaço de Hilbert para o espaço de fases deformado, não existem razões para que haja alguma modificação na relação de incerteza de energia-tempo assim como no caso posição-momentum. Deste modo, podemos assumir que

$$\boxed{\Delta H_\star \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}} \quad (2.21)$$

Entranto, alguns cuidados devem ser tomados ao calcular o desvio padrão de energia. Supondo um Hamiltoniano com dependências em q e p , ou seja, temos uma exceção no caso da partícula livre, o produto $\langle \hat{H} \star \hat{H} \rangle$ é diferente do resultado direto $\langle H^2 \rangle$. No próximo capítulo, na subseção correspondente ao oscilador harmônico, esta precaução tornar-se-á mais clara.

3 Equação de Liouville

Um dos métodos mais simples de obter informações (dinâmica, valores médios,...) do espaço de fases no formalismo de Moyal é aplicando a equação de Liouville. Supondo conhecida uma função densidade de probabilidade $\rho(q, p, t)$, podemos analisar sua evolução temporal em um certo volume do espaço de fases tomando a derivada total em relação ao tempo:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \rho(q, p, t) dV = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\delta t} \left\{ \int_{V(t+\delta t)} \rho(q, p, t + \delta t) dV - \int_{V(t)} \rho(q, p, t) dV \right\}. \quad (3.1)$$

Somando e subtraindo $\int_{V(t)} \rho(q, p, t + \delta t) dV$ podemos reescrever este resultado de forma a obter uma derivada parcial em t e uma integral sobre uma variação de volume:

$$\begin{aligned} \frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \rho(q, p, t) dV = \lim_{\delta t \rightarrow 0} \frac{1}{\delta t} \left\{ \int_{V(t+\delta t) - V(t)} \rho(q, p, t + \delta t) dV \right\} + \\ \int_{V(t)} \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} dV. \end{aligned} \quad (3.2)$$

É fácil mostrar que um certo volume $V(t)$ varia temporalmente devido a velocidade de expansão ou contração perpendicular à superfície. No espaço de fases, o vetor velocidade é dado por $\vec{u} = (\dot{q}, \dot{p})$. Denotando \vec{n} como um versor perpendicular à superfície, temos que $dV = \vec{u} \cdot \vec{n} dS dt$ no limite $\delta t \rightarrow 0$. Podemos reescrever a equação (3.2) como:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \rho(q, p, t) dV = \int_{S(t)} \rho(q, p, t) \vec{u} \cdot \vec{n} dS + \int_{V(t)} \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} dV. \quad (3.3)$$

Usando o teorema de Gauss-Ostrogradski [5] podemos transformar a integral de superfície em um integral de volume:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \rho(q, p, t) dV = \int_{V(t)} \left[\vec{\nabla} \cdot (\rho(q, p, t) \vec{u}) + \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} \right] dV. \quad (3.4)$$

A equação (3.4) é conhecida como teorema de transporte de Reynolds [5]. Para nossos propósitos, associamos o sistema físico desejado ao espaço de fases introduzindo o formalismo de Hamilton [6] no teorema de Reynolds:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = \frac{\partial H(q, p)}{\partial p} \quad (3.5a)$$

$$\frac{\partial p}{\partial t} = -\frac{\partial H(q, p)}{\partial q}. \quad (3.5b)$$

Expandindo $\vec{\nabla}(\rho(q, p, t) \vec{u})$, supondo um Hamiltoniano conservativo e substituindo (3.5) obtemos:

$$\vec{\nabla}(\rho(q, p, t) \vec{u}) = \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial q} \frac{\partial H(q, p)}{\partial p} - \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial p} \frac{\partial H(q, p)}{\partial q}, \quad (3.6)$$

os parênteses de Poisson[6] com respeito às variáveis canônicas q e p . Ou ainda, segundo a notação:

$$\vec{\nabla}(\rho(q, p, t) \vec{u}) = \{\rho(q, p, t), H(q, p)\}. \quad (3.7)$$

Com este resultado podemos reescrever (3.4) associando-a ao Hamiltoniano do sistema:

$$\frac{D}{Dt} \int_{V(t)} \rho(q, p, t) dV = \int_{V(t)} \left[\{\rho(q, p, t), H(q, p)\} + \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} \right] dV. \quad (3.8)$$

A partir da equação (3.8) podemos estudar qualquer sistema físico conservativo desejado no formalismo de espaço de fases. Entretanto, ainda precisamos assegurar que $\rho(q, p, t)$ seja normalizável, uma vez que é uma função densidade de probabilidade. Portanto, $\rho(q, p, t)$ ainda deve satisfazer a relação de normalização:

$$\iint dq dp \rho(q, p, t) = 1. \quad (3.9)$$

Supondo $\rho(q, p, t)$ uma função normalizável temos que o lado esquerdo de (3.8) é sempre nulo se integrado em todo o volume do espaço de fases, pois esta integral é constante e igual a um. Portanto, seja qual for o sistema em estudo, este deve obedecer a equação:

$$\int_V \left[\{\rho(q, p, t), H(q, p, t)\} + \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} \right] dV = 0. \quad (3.10)$$

Um caso particular são os sistemas descritos pela equação:

$$\{\rho(q, p, t), H(q, p)\} = 0, \quad (3.11)$$

equivalente clássica à equação de Schrödinger independente do tempo.

Outro caso importante são os estados coerentes, estes descritos pela equação:

$$-\frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} = \{\rho(q, p, t), H(q, p)\}, \quad (3.12)$$

onde a derivada parcial no tempo esta associada ao movimento dos pontos médios de posição e momentum no espaço de fases.

Como exemplo de aplicação da equação (3.12), nas subseções seguintes, iremos analisar dois sistemas conservativos: a partícula livre e o oscilador harmônico. Nestes sistemas também começamos a mostrar como os resultados esperados são obtidos no formalismo de Moyal no espaço de fases.

3.1 Partícula Livre

Começamos pelo hamiltoniano de uma partícula livre. Este é dado simplesmente pela energia cinética da partícula:

$$H(p) = \frac{\hat{p} \star \hat{p}}{2m} = \frac{p^2}{2m}. \quad (3.13)$$

Substituindo (3.13) em (3.12) calculamos:

$$-\frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial t} = \frac{p}{m} \frac{\partial \rho(q, p, t)}{\partial q}, \quad (3.14)$$

a equação responsável pela dinâmica da partícula.

Sabemos da mecânica quântica convencional que uma partícula livre pode ser descrita por uma função de onda arbitrária, ou seja, como uma superposição de ondas planas ou, ainda, um pacote de ondas. Por sua simplicidade e aplicabilidade, estudaremos o pacote gaussiano. Propomos, então, a seguinte função densidade de probabilidade:

$$\rho(q, p, t) = A \exp\left(-\frac{(q - q_m(p, t))^2}{2\sigma_q^2}\right) \exp\left(-\frac{(p - p_m(t))^2}{2\sigma_p^2}\right). \quad (3.15)$$

Sabemos que o pacote de onda gaussiano associado a uma partícula livre sofre dispersão e, portanto, $q_m(p, t)$ deve ser uma função de p . Por outro lado, não existe nenhum potencial espacial que possa interferir no momentum, portanto $p_m(t)$ não depende de q .

Substituindo (3.15) em (3.14), obtemos a seguinte relação:

$$\frac{(q - q_m(p, t)) \left(\frac{\partial q_m(p, t)}{\partial t} - \frac{p}{m} \right)}{\sigma_q^2} = -\frac{(p - p_m(t)) \left(\frac{\partial p_m(t)}{\partial t} \right)}{\sigma_p^2}. \quad (3.16)$$

Para garantir a igualdade, podemos supor que $\frac{\partial p_m(t)}{\partial t} = 0$ e que $\frac{\partial q_m(p, t)}{\partial t} - \frac{p}{m} = 0$. Dados p_o – valor esperado de momentum em $t = 0$ – e q_o – valor esperado de posição em $t = 0$ – calculamos a normalização a partir de (3.9). Obtemos:

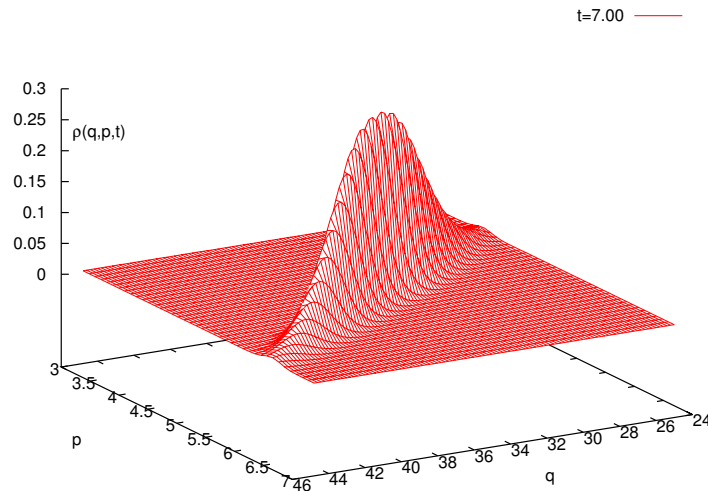


Figura 3.1: Dispersão do pacote gaussiano da partícula livre ($\hbar = m = 1$, $q_o = 0$, $p_o = 5$ e $t = 7.00$).

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\sigma_p\sigma_q} \exp\left(-\frac{(q - \frac{pt}{m} - q_o)^2}{2\sigma_q^2}\right) \exp\left(-\frac{(p - p_o)^2}{2\sigma_p^2}\right). \quad (3.17)$$

Como a normalização e o princípio de incerteza restringem os possíveis valores do produto $\sigma_p\sigma_q$, ainda podemos escrever $2\sigma_p\sigma_q = \hbar$. Porém, não podemos calcular as variâncias individualmente com o que temos.

Ainda podemos calcular as funções densidade de probabilidade para q e p separadamente a partir de (3.17). Para isso usamos as equações:

$$\rho(q) = \int dp \rho(q, p, t) \quad (3.18) \quad \rho(p) = \int dq \rho(q, p, t). \quad (3.19)$$

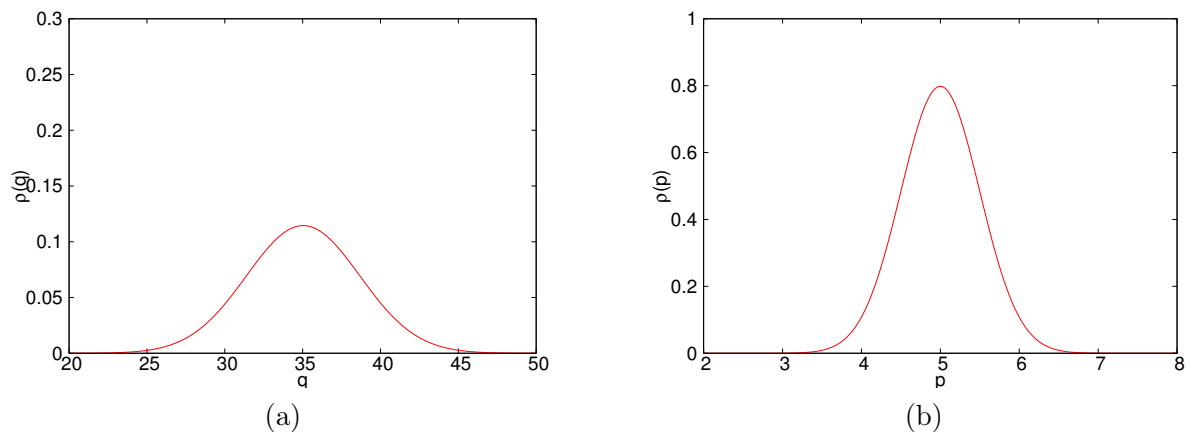


Figura 3.2: (a) e (b) representam, respectivamente, as equações (3.18) e (3.19) para o sistema em estudo ($\hbar = m = 1$, $q_o = 0$, $p_o = 5$ e $t = 7.00$).

Com a densidade de probabilidades (3.17), podemos calcular alguns valores esperados do sistema. Primeiramente, calculemos o valor esperado do primeiro e segundo momento do momentum.

$$\langle \hat{p} \rangle = \iint dqdp p\rho(q, p, t) = p_o, \quad (3.20)$$

$$\langle \hat{p} \star \hat{p} \rangle = \iint dqdp p^2\rho(q, p, t) = p_o^2 + \sigma_p^2. \quad (3.21)$$

Com estes resultados, podemos calcular o desvio padrão do momentum da partícula livre. Partindo da definição [4] temos:

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p} \star \hat{p} \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2} = \sigma_p \quad (3.22)$$

Repetindo os mesmos cálculos para a posição temos:

$$\langle \hat{q} \rangle = \iint dqdp q\rho(q, p, t) = \frac{p_o t}{m} + q_o, \quad (3.23)$$

$$\langle \hat{q} \star \hat{q} \rangle = \iint dqdp q^2\rho(q, p, t) = \left(\frac{p_o t}{m} + q_o\right)^2 + \left(\frac{\sigma_p t}{m}\right)^2 + \sigma_q^2, \quad (3.24)$$

$$\Delta q = \sqrt{\langle \hat{q} \star \hat{q} \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2} = \sqrt{\left(\frac{\sigma_p t}{m}\right)^2 + \sigma_q^2}. \quad (3.25)$$

Analisando (3.25) percebemos que o valor mínimo de Δq ocorre em $t = 0$. Temos, portanto, ao multiplicar (3.22) e (3.25), no instante $t = 0$, juntamente com o fato de que $\sigma_p \sigma_q \geq \frac{\hbar}{2}$, que o princípio de incerteza é, portanto, satisfeito.

$$\Delta p \Delta q \geq \frac{\hbar}{2} \quad (3.26)$$

A energia média da partícula livre em questão é dada por:

$$\langle \hat{H} \rangle = \iint dqdp H\rho(q, p, t) = \frac{1}{2m}(p_o^2 + \sigma_p^2). \quad (3.27)$$

E o desvio padrão da energia dado pela raiz quadrada de $\langle \hat{H} \star \hat{H} \rangle - \langle H \rangle^2$ é igual a

$$\Delta H = \frac{\sigma_p}{m} \sqrt{p_o^2 + \frac{\sigma_p^2}{2}}. \quad (3.28)$$

Como σ_p é proporcional à \hbar e m tende para infinito no limite clássico, temos que (3.27) tende para o resultado esperado no regime de altas energias ao mesmo passo que (3.28) tende para zero.

3.2 Oscilador Harmônico

Embora a MQ afirme que há uma quantização de energia para sistemas com algum tipo de delimitação espacial (vínculos), na MC não a detectamos. Este resultado surge devido ao regime de altas energias tradicional da MC, onde \hbar simplesmente não existe. Além desta quantização de energia imposta pela MQ, o princípio de incerteza impõe um limite de precisão nas mensurações destes sistemas.

Outro resultado exclusivamente quântico e bastante não intuitivo é a energia de ponto zero, onde não podemos afirmar precisamente sobre o comportamento do sistema em estudo. No caso do oscilador harmônico, temos que esta energia de ponto zero depende da frequência de oscilação da partícula, apresentando a seguinte forma: $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$.

Analisando esta energia do ponto de vista da MC, ou seja, em um regime de altas energias, \hbar torna-se desprezível em comparação a qualquer outro parâmetro do sistema e, por fim, afirmamos que o oscilador harmônico com esta energia de ponto zero encontra-se em repouso. Entretanto, do ponto de vista da MQ, isto é apenas uma aproximação muito boa. Na verdade, o momentum desta partícula clássica pode ser nulo em média, mas ela ainda pode estar se movimentando de modo a não detectarmos experimentalmente.

Sendo assim, do ponto de vista quântico, devemos tratar este sistema físico com auxílio de uma função densidade de probabilidade dinâmica no espaço de fases, onde o caráter probabilístico torna-se cada vez mais importante a medida que a escala dos parâmetros do sistema diminui. Com base nestas informações podemos supor que a forma desta função densidade de probabilidade seja uma gaussiana com desvios padrão σ_p e σ_q proporcionais a \hbar . De modo geral tomamos:

$$\rho(q, p, t) = A \exp\left(-\frac{(q - q_m(t))^2}{2\sigma_q^2}\right) \exp\left(-\frac{(p - p_m(t))^2}{2\sigma_p^2}\right), \quad (3.29)$$

onde $q_m(t)$ e $p_m(t)$ são os responsáveis pela dinâmica do oscilador e “A” é uma constante de normalização a ser calculada.

Substituindo o Hamiltoniano:

$$H(q, p) = \frac{1}{2m} \hat{p} \star \hat{p} + \frac{mw^2}{2} \hat{q} \star \hat{q} = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{mw^2}{2} q^2, \quad (3.30)$$

e (3.29) em (3.12) obtemos a relação:

$$\frac{q - q_m(t)}{\sigma_q^2} \left(\frac{\partial q_m(t)}{\partial t} - \frac{p}{m} \right) + \frac{p - p_m(t)}{\sigma_p^2} \left(\frac{\partial p_m(t)}{\partial t} + mw^2 q \right) = 0. \quad (3.31)$$

A fim de garantirmos a igualdade, podemos separar, usando-nos do princípio de incerteza, a equação (3.31) em:

$$\frac{\partial q_m(t)}{\partial t} = \frac{p_m(t)}{m}, \quad (3.32a) \quad \frac{\partial p_m(t)}{\partial t} = -mw^2 q_m(t). \quad (3.32b)$$

Com estas equações, calculamos as funções referentes as posições médias deste oscilador harmônico clássico. Resolvendo o sistema (3.32) obtemos:

$$q_m(t) = q_o \cos(wt) + \frac{p_o}{mw} \sin(wt), \quad (3.33a)$$

$$p_m(t) = p_o \cos(wt) - mwq_o \sin(wt), \quad (3.33b)$$

onde q_o e p_o representam os valores esperados em $t = 0$ de posição e de momentum respectivamente. Embora este resultado seja coerente com o resultado clássico, sabemos da MQ que existe uma quantização da energia, portanto q_o e p_o devem satisfazer:

$$\frac{p_o^2}{2m} + \frac{mw^2 q_o^2}{2} = n\hbar w, \quad (3.34)$$

onde n é um número real, maior ou igual à zero. O caso $n = 0$ está exposto nas figuras (3.3). Ao estudarmos a energia esperada deste oscilador, este resultado ficará claro.

A fim de calcular os desvios padrão de posição e momentum, substituímos (3.33) em (3.31). Como resultado obtemos (3.35) que associamos ao princípio de incerteza para adquirir σ_p e σ_q explicitamente como exposto em (3.36).

$$\sigma_p = mw\sigma_q \quad (3.35)$$

$$\sigma_q = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} \quad (3.36a) \quad \sigma_p = \sqrt{\frac{mw\hbar}{2}} \quad (3.36b)$$

Para calcular a constante de normalização “A” em (3.29) usamos (3.9). Substituindo (3.36) e a normalização em (3.29), obtemos a seguinte expressão para função densidade de probabilidade do oscilador harmônico:

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{mw}{\hbar}(q - q_m(t))^2\right) \exp\left(-\frac{1}{mw\hbar}(p - p_m(t))^2\right) \quad (3.37)$$

Na figura (3.3-c) apresentamos o gráfico do oscilador harmônico com uma energia igual à energia de ponto zero. Note que, neste caso, a função densidade é estática, mas com um desvio padrão considerável. No limite de altas energias, esta gaussiana pode ser aproximada por uma função Delta de Dirac e, por fim, dizemos que a partícula está em repouso.

Nas figuras (3.3-a) e (3.3-b) temos as representações de (3.37) nos espaços de posição e momentum com energia de ponto zero. Estas representações são, mais uma vez, calculadas a partir das equações (3.18) e (3.19). Por praticidade, nas figuras citadas foram tomados $m = w = \hbar = 1$.

Antes de prosseguir é importante ressaltar para fins futuros que o resultado obtido está em completo acordo com os estados coerentes de Glauber (Apêndice B):

$$|\psi_\alpha(q, t)|^2 = \langle \alpha | q \rangle \langle q | \alpha \rangle = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{-\beta(q - q_o \cos(\omega t))^2}, \quad (3.38)$$

onde $\beta = \frac{mw}{\hbar}$. Este resultado pode ser obtido aplicando (3.37) em (3.18) e selecionando $p_o = 0$.

Usando a função densidade de probabilidade (3.37) podemos calcular os valores esperados do oscilador clássico do ponto de vista quântico. Começando pelo primeiro e segundo momento de posição, obtemos o desvio padrão.

$$\langle \hat{q} \rangle = \iint dqdp \, q\rho(q, p, t) = q_o \cos(\omega t) + \frac{p_o}{mw} \sin(\omega t) = q_m(t) \quad (3.39)$$

$$\langle \hat{q} \star \hat{q} \rangle = \iint dqdp \, q^2 \rho(q, p, t) = q_m(t)^2 + \frac{\hbar}{2mw} \quad (3.40)$$

$$\Delta q = \sqrt{\langle \hat{q} \star \hat{q} \rangle - \langle \hat{q} \rangle^2} = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} \quad (3.41)$$

Um cálculo análogo para o momentum leva a

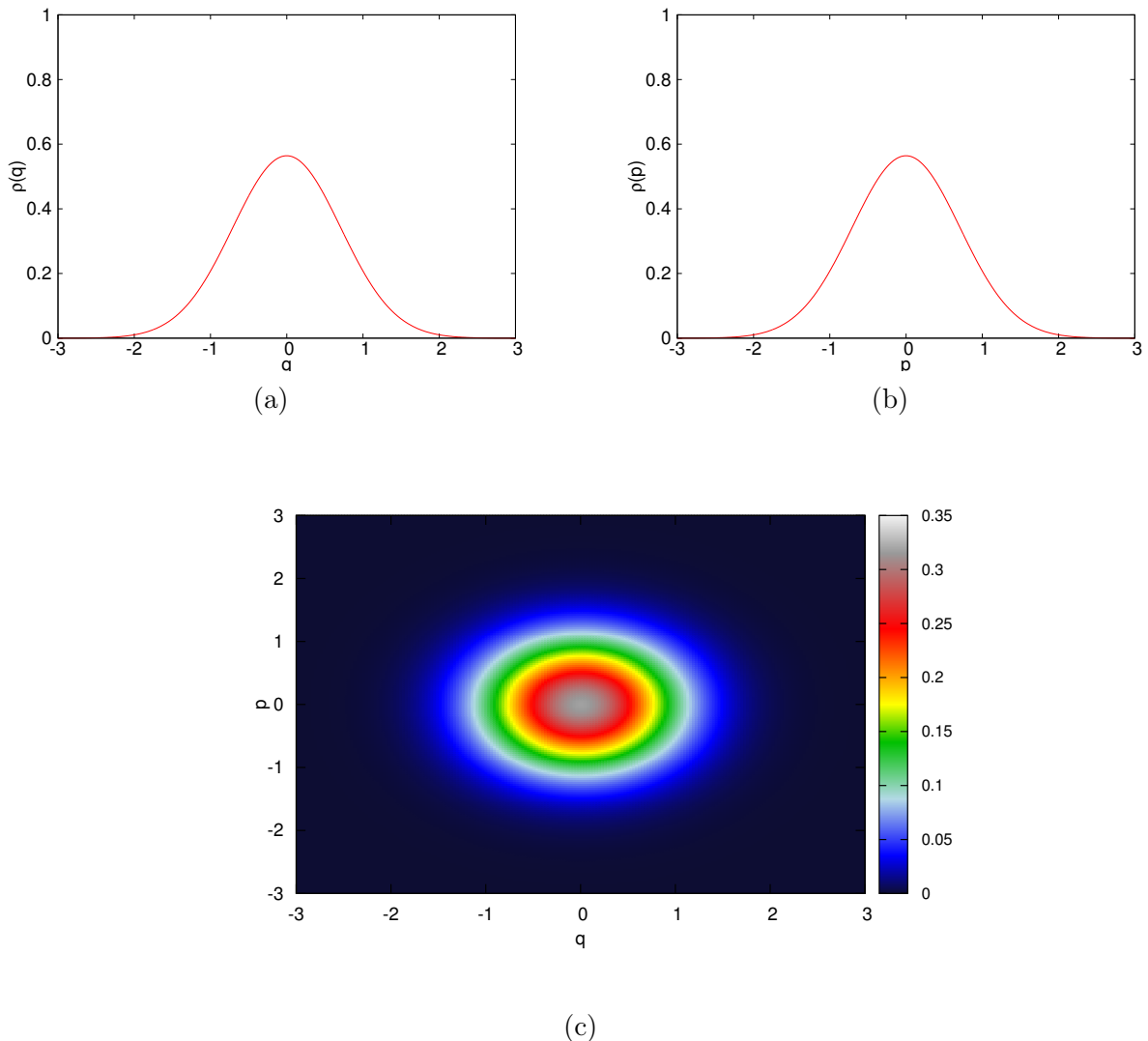


Figura 3.3: Em (a) e (b) temos as funções densidade probabilidade nos espaços de posição e momentum respectivamente, em (c) correspondente a função densidade de probabilidade no espaço de fases com energia igual a energia mínima. $m = w = \hbar = 1$

$$\langle \hat{p} \rangle = \iint dqdp p\rho(q, p, t) = p_o \cos(wt) - q_o m w \sin(wt) = p_m(t) \quad (3.42)$$

$$\langle \hat{p} \star \hat{p} \rangle = \iint dqdp p^2 \rho(q, p, t) = p_m(t)^2 + \frac{m\hbar w}{2} \quad (3.43)$$

$$\Delta p = \sqrt{\langle \hat{p} \star \hat{p} \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2} = \sqrt{\frac{m\hbar w}{2}} \quad (3.44)$$

Podemos, assim, verificar que o princípio de incerteza é satisfeito, pois multiplicando-se os resultados (3.44) e (3.41) obtemos $\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{2}$. Por fim podemos calcular a energia média do oscilador:

$$\langle \hat{H} \rangle = \iint dqdp H(q, p)\rho(q, p, t) = \frac{p_o^2}{2m} + \frac{mw^2q_o^2}{2} + \frac{\hbar w}{2}. \quad (3.45)$$

Note que no limite de altas energias, ou número quântico “n” muito grande (veja (3.34)), $\frac{\hbar w}{2}$ torna-se desprezível e, por decorrência, obtemos o resultado clássico. Para calcular o segundo momento da energia, precisamos tomar um cuidado extra. Como (3.30) não é linear, o produto de Moyal não retorna um resultado igual ao esperado classicamente.

$$\hat{H} \star \hat{H} = \left(\frac{1}{2m}p^2 + \frac{mw^2}{2}q^2 \right)^2 - \frac{\hbar^2 w^2}{4} \quad (3.46)$$

Usando (3.46) podemos calcular $\langle \hat{H} \star \hat{H} \rangle$ do mesmo modo que os outros resultados foram calculados. O importante é analisarmos o desvio padrão de energia.

$$\Delta H = \sqrt{\hbar w \left(\frac{p_o^2}{2m} + \frac{mw^2q_o^2}{2} \right)} \quad (3.47)$$

Como o desvio padrão é proporcional à \hbar , no regime de altas energias o desvio se torna muito pequeno se comparado ao valor da energia.

4 A Transformação de Wigner

Com a equação de Liouville (3.12) podemos obter informações sobre diversos sistemas físicos. Ela, entretanto, não nos proporciona tanta informação quanto a equação de Schrödinger no espaço de Hilbert. Este fato ocorre pois a equação de Liouville se aplica apenas para sistemas clássicos. Pode-se mostrar, por exemplo, que funções de transição entre autoestados de energia bem definida não satisfazem (3.12), porém uma superposição coerente sim. Portanto, precisamos de outro método para obter informações do sistema em estudo, até porque nem todo sistema quântico tem um correspondente clássico.

Existem duas formas para resolver este problema. Podemos deduzir uma equação equivalente à Equação de Schrödinger para o espaço de fases [7, 8] ou obter uma forma de transformar os autoestados da Equação de Schrödinger para funções no espaço de fases. Neste trabalho optaremos pela segunda opção, conhecida como *Transformação de Wigner*.

Partindo da transformação de Weyl – equação (2.1) com o kernel (2.2)–, queremos transformar a função densidade de probabilidade quântica, dada pelo produto de uma função de onda com sua complexa conjugada, em uma função densidade apropriada do espaço de fases. Matematicamente temos a seguinte relação:

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int dx dy dq' dp' e^{\frac{i}{\hbar}(q'y+p'x)} e^{-\frac{i}{\hbar}(qy+px)} \Psi^\dagger(q', t) \Psi(q', t). \quad (4.1)$$

Como o objeto em transformação é uma densidade de probabilidade, podemos separar as exponenciais de modo genérico, sem perda de informação.

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int dx dy e^{-\frac{i}{\hbar}(qy+px)} \int dp' dq' \Psi^\dagger(q', t) e^{\frac{i}{2\hbar}p'x} e^{\frac{i}{\hbar}q'y} e^{\frac{i}{2\hbar}p'x} \Psi(q', t) \quad (4.2)$$

Há na literatura especializada várias discussões a respeito desta separação de exponenciais [9, 10, 11]. Note que ao separarmos esta função, simplesmente inserimos um coeficiente $\frac{1}{2}$ em cada parte; todavia poderíamos ter usado qualquer possível par de coeficientes cuja soma seja igual a um. Embora este assunto ainda esteja em pesquisa, para nossos propósitos os coeficientes escolhidos são necessários. Pode-se mostrar que o único valor destes coeficientes cuja transformação (4.1) satisfaz a equação de Liouville para os autoestados de energia puros é, senão, $\frac{1}{2}$.

Podemos, então, substituir os operadores momentum por sua representação em termos de operadores diferenciais. Vale a pena notar que ao aplicarmos o operador momentum na função conjugada, o operador também deve ser conjugado.

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{4\pi^2\hbar^2} \int dx dy e^{-\frac{i}{\hbar}(qy+px)} \int dq' \Psi^\dagger(q', t) e^{-\frac{x}{2}\overleftarrow{\partial}_{q'}} e^{\frac{i}{\hbar}q'y} e^{\frac{x}{2}\overrightarrow{\partial}_{q'}} \Psi(q', t) \quad (4.3)$$

Integrando em y e q' e usando a identidade $e^{a\partial_x} f(x) = f(x+a)$ mostramos que $\rho(q, p, t)$ é dada por (4.4).

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dx \Psi^\dagger\left(q - \frac{x}{2}, t\right) e^{-\frac{ipx}{\hbar}} \Psi\left(q + \frac{x}{2}, t\right) \quad (4.4)$$

Analisando a expressão acima percebemos que esta função densidade pode assumir valores negativos devido ao caráter senoidal implícito em $e^{-\frac{ipx}{\hbar}}$, razão pela qual ela é chamada de uma densidade de “quase” probabilidade ¹.

4.1 Combinação Linear

Na transformação (4.4) pressupõe-se uma função de onda $\Psi(q, t)$ qualquer. Deste modo, podemos assumir um estado arbitrário dado por:

$$\Psi(q, t) = \sum_n^\infty a_n \phi_n(q, t), \quad (4.5)$$

onde $\phi_n(q, t)$ corresponde aos autoestados de energia de algum sistema particular e a_n aos seus respectivos coeficientes. Substituindo (4.5) em (4.4) mostramos que $\rho(q, p, t)$ também pode ser escrito como uma combinação linear de funções densidade:

$$\rho(q, p, t) = \sum_n^\infty \sum_m^\infty a_n^* a_m \rho_{nm}(q, p, t), \quad (4.6)$$

onde $\rho_{nm}(q, p, t)$, denominado função de Wigner, é construído a partir de todas as possíveis combinações dois a dois dos autoestados do sistema.

$$\rho_{nm}(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int dy \phi_n^\dagger\left(q - \frac{y}{2}, t\right) e^{-\frac{ipy}{\hbar}} \phi_m\left(q + \frac{y}{2}, t\right) \quad (4.7)$$

¹Integrando esta função “quase” probabilidade para q ou p voltamos a obter uma função probabilidade usual.

Note que para $n \neq m$, $\rho_{nm}(q, p, t)$ pode ser uma função complexa², assim como $a_n^* a_m$. Estas funções são responsáveis pela dinâmica do sistema físico. O importante é que a superposição (4.6) seja real. Podemos, ainda, mostrar que para os casos em que $n = m$, $\rho_{nm}(q, p, t)$ satisfaz³ (3.11).

Quando temos um pacote de ondas inicial no espaço de fases – $F(q, p, t)$ – e desejamos escrevê-lo como uma superposição de funções de Wigner precisamos calcular a constante $c_{nm} \equiv a_n^* a_m$ de modo que tenhamos:

$$F(q, p, t) = \sum_n \sum_m c_{nm} \rho_{nm}(q, p, t). \quad (4.8)$$

Para tal podemos utilizar a ortogonalidade das funções de onda do espaço de Hilbert implícitas nas funções de Wigner. Multiplicando $\rho_{kl}(q, p, t)$ em ambos lados e integrando no espaço de fases obtemos:

$$\int dqdp \rho_{kl}(q, p, t) F(q, p, t) = \sum_n \sum_m c_{nm} \int dqdp \rho_{kl}(q, p, t) \rho_{nm}(q, p, t). \quad (4.9)$$

Podemos expandir as duas integrais de Wigner do lado direito da equação do seguinte modo:

$$\begin{aligned} \int dqdp \rho_{kl}(q, p, t) \rho_{nm}(q, p, t) &= \frac{1}{4\pi^2 \hbar^2} \int dqdpdydy' e^{\frac{ip(y'-y)}{\hbar}} \times \\ &\times \phi_n^\dagger \left(q - \frac{y}{2}, t \right) \phi_m \left(q + \frac{y}{2}, t \right) \phi_k^\dagger \left(q + \frac{y'}{2}, t \right) \phi_l \left(q - \frac{y'}{2}, t \right). \end{aligned} \quad (4.10)$$

Ao integrarmos para p e y' ou y temos como resultado:

$$\int dqdp \rho_{kl}(q, p, t) \rho_{nm}(q, p, t) = \frac{1}{2\pi \hbar} \delta_{nl} \delta_{mk}. \quad (4.11)$$

Deste modo os coeficientes da expansão (4.8) são dados por:

$$c_{lk} = 2\pi \hbar \int dqdp \rho_{kl}(q, p, t) F(q, p, t). \quad (4.12)$$

Como exemplo de aplicação de (4.6), na próxima seção estudaremos o oscilador harmônico composto pela combinação linear de autoestados de energia $\frac{\hbar\omega}{2}$ e $\frac{3\hbar\omega}{2}$. No próximo capítulo estudaremos os estados coerentes do oscilador onde, com auxílio das equações (4.8) e (4.12), projetaremos o resultado clássico obtido em (3.37) nas funções de Wigner.

²Funções de transição entre autoestados de energia.

³Quando o Hamiltoniano é independente do tempo.

4.2 Oscilador Harmônico

Nesta seção estudaremos uma aplicação direta de (4.6) para o exemplo de uma superposição equiprovável do estado fundamental ϕ_0 e do primeiro estado excitado ϕ_1 (apêndice A).

$$\phi_0(q, t) = \left(\frac{mw}{\pi\hbar}\right)^{1/4} e^{-\frac{mw}{2\hbar}q^2} e^{-\frac{i}{2}wt} \quad (4.13)$$

$$\phi_1(q, t) = \sqrt{2} \left(\frac{mw}{\pi^{1/3}\hbar}\right)^{3/4} q e^{-\frac{mw}{2\hbar}q^2} e^{-\frac{3i}{2}wt} \quad (4.14)$$

Deste modo, temos que a função de onda completa e normalizada é

$$\Psi(q, t) = \frac{\sqrt{2}}{2} (\phi_0(q, t) + \phi_1(q, t)). \quad (4.15)$$

De (4.6) obtemos:

$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^1 \sum_{m=0}^1 \rho_{nm}(q, p, t) \quad (4.16)$$

Portanto, precisamos calcular⁴ $\rho_{00}(q, p, t)$, $\rho_{01}(q, p, t)$, $\rho_{10}(q, p, t)$ e $\rho_{11}(q, p, t)$. Estes seguem:

$$\rho_{00}(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\frac{mwq^2}{\hbar} - \frac{p^2}{\hbar mw}} \quad (4.17)$$

$$\rho_{01}(q, p, t) = \sqrt{\frac{2}{mw\hbar^3\pi^2}} (mwq - ip) e^{-\frac{mwq^2}{\hbar} - \frac{p^2}{\hbar mw}} e^{-iwt} \quad (4.18)$$

$$\rho_{10}(q, p, t) = \sqrt{\frac{2}{mw\hbar^3\pi^2}} (mwq + ip) e^{-\frac{mwq^2}{\hbar} - \frac{p^2}{\hbar mw}} e^{iwt} \quad (4.19)$$

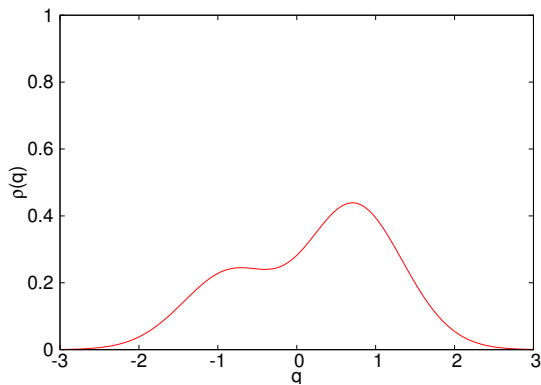
$$\rho_{11}(q, p, t) = \frac{1}{\hbar\pi} \left(2\frac{mw}{\hbar}q^2 + 2\frac{p^2}{mw\hbar} - 1 \right) e^{-\frac{mwq^2}{\hbar} - \frac{p^2}{\hbar mw}} \quad (4.20)$$

Para fins de comparação, podemos observar que o resultado (4.17) é idêntico à (3.37), calculado a partir da equação de Liouville para a energia mínima como exposto na figura (3.3). Ainda podemos mostrar que o resultado (4.20) satisfaz a equação de Liouville, mas (4.18) e (4.19) não. Podemos reescrever (4.16) em função de senos e cossenos a fim de

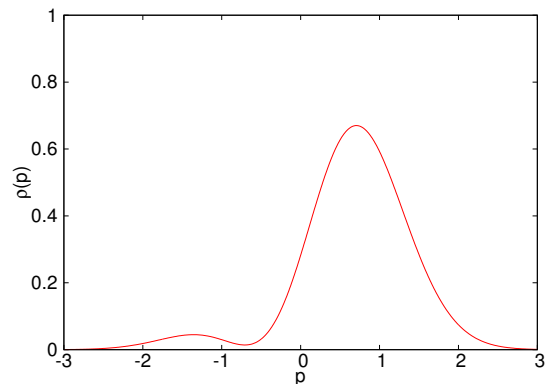
⁴No apêndice C, demonstramos a forma geral de uma ρ_{nm} no caso do oscilador.

remover a dependência complexa da equação. Ainda podemos mostrar que este resultado satisfaz (3.10) como esperado.

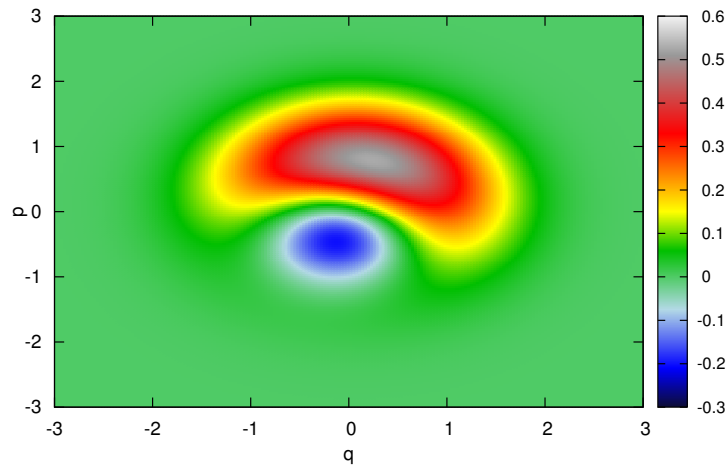
$$\rho(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar^2} \left(mwq^2 + \frac{p^2}{mw} + \sqrt{2mw\hbar} q \cos(wt) - \sqrt{\frac{2\hbar}{mw}} p \sin(wt) \right) e^{-\frac{mw}{\hbar}q^2 - \frac{p^2}{\hbar mw}} \quad (4.21)$$



(a)



(b)



(c)

Figura 4.1: Em (a) e (b) temos as funções densidade probabilidade próprias da mecânica quântica convencional nos espaços de posição e momentum respectivamente. (c) correspondente à função densidade de quasi-probabilidade (4.21). $\hbar = m = w = 1$ e $t = 5$.

A fim de comparar os resultados com a MQ de Schrödinger podemos calcular a partir de (4.21) as funções densidade de probabilidade nos espaços de momentum e posição, usando (3.18) e (3.19) respectivamente.

$$\rho(q) = \sqrt{\frac{mw}{\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{mw}{\hbar}q^2\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{mw}{\hbar}q^2 + \sqrt{\frac{2mw}{\hbar}} q \cos(wt)\right) \quad (4.22)$$

$$\rho(p) = \sqrt{\frac{1}{mw\pi\hbar}} \exp\left(-\frac{p^2}{mw\hbar}\right) \left(\frac{1}{2} + \frac{p^2}{mw\hbar} - \sqrt{\frac{2}{mw\hbar}} p \sin(wt)\right) \quad (4.23)$$

Por fim calculamos os valores esperados para este sistema. O método é idêntico ao apresentado no capítulo anterior. Primeiramente valores esperados de posição seguidos pelos valores esperados de momentum:

$$\langle \hat{q} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}} \cos(wt), \quad (4.24) \quad \langle \hat{p} \rangle = -\sqrt{\frac{\hbar mw}{2}} \sin(wt), \quad (4.27)$$

$$\langle \hat{q} \star \hat{q} \rangle = \frac{\hbar}{mw}, \quad (4.25) \quad \langle \hat{p} \star \hat{p} \rangle = mw\hbar, \quad (4.28)$$

$$\Delta q = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw} (1 + \sin^2(wt))}, \quad (4.26) \quad \Delta p = \sqrt{\frac{mw\hbar}{2} (1 + \cos^2(wt))}. \quad (4.29)$$

Com efeito, temos que o produto de desvios padrão de momentum e posição é dado pela equação (4.30). Embora o resultado seja senoidal, com diversos pontos de mínimo e máximo, o resultado nunca é menor que $\sim 0.707\hbar$.

$$\Delta p \Delta q = \frac{\hbar}{4} \sqrt{8 + \sin(2wt)^2} \quad (4.30)$$

Como estamos estudando um sistema composto pela combinação linear de dois autoestados de energias diferentes mas com mesma probabilidade, esperamos que a energia média deste sistema seja simplesmente $\hbar w$. Pelo mesmo motivo, tendo em vista as energias dos autoestados, temos que o desvio padrão de energia deve ser $\frac{\hbar w}{2}$. Podemos calcular estes resultados a partir do espaço de fases.

$$\langle \hat{H} \rangle = \iint dqdp H(q,p)\rho(q,p) = \hbar w \quad (4.31)$$

$$\langle \hat{H} \star \hat{H} \rangle = \iint dqdp \hat{H} \star \hat{H} \rho(q,p) = \frac{5}{4} \hbar^2 w^2 \quad (4.32)$$

$$\Delta H = \sqrt{\langle \hat{H} \star \hat{H} \rangle - \langle H \rangle^2} = \frac{1}{2} \hbar w \quad (4.33)$$

5 Estados Coerentes do Oscilador Harmônico

O objetivo deste capítulo é estudar os estados coerentes do oscilador harmônico valendo-nos das ferramentas e resultados até então obtidos. Comparando os resultados (3.31) para o oscilador via equação de Liouville (3.12) e a função densidade de probabilidade (B.11) obtida quanticamente via estados de Glauber, percebemos que existe uma transição entre os mundos clássico e quântico para este caso. Deste modo, existe a possibilidade de estudar este sistema através da superposição de autoestados de energia advindos da equação de Schrödinger em um limite clássico.

Vimos no capítulo 3 que a equação densidade de probabilidade para o oscilador harmônico que satisfaz a equação de Liouville (3.12) é dada por:

$$F(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} \exp\left(-\frac{mw}{\hbar}(q - q_m(t))^2\right) \exp\left(-\frac{1}{mw\hbar}(p - p_m(t))^2\right), \quad (5.1)$$

com $q_m(t)$ e $p_m(t)$ dados por (3.33). No capítulo 4 estudamos como uma superposição de funções de Wigner deve ser feita e como podemos calcular os coeficientes ou pesos de cada função. Por fim, no apêndice C obtemos a função de Wigner $\rho_{nm}(q, p, t)$ de forma geral para o oscilador.

A próxima pergunta é: qual a forma dos coeficientes na superposição (4.8) para $F(q, p, t)$ dada por (5.1)? Para tal partiremos de (C.5) onde $\beta = \frac{mw}{\hbar}$.

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n!m!}} e^{i(m-n)wt} \rho_{nm}(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\beta q^2 - \frac{p^2}{\beta\hbar^2}} e^{4\sqrt{\beta}q-2} \quad (5.2)$$

Multiplicando (5.2) por $F(q, p, t)$, integrando ambos lados para q e p e substituindo o resultado (4.12), obtemos:

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n!m!}} e^{i(m-n)wt} c_{mn} = e^{-\frac{\beta}{2}q_0^2 - \frac{p_0^2}{2\beta\hbar^2}} e^{2\sqrt{\beta}q_0 \cos(wt) + \frac{2p_0}{\hbar\sqrt{\beta}} \sin(wt)} \quad (5.3)$$

Como esperamos que a dependência $e^{i(m-n)wt}$ desapareça, é aconselhável reescrever o lado direito desta expressão como:

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n!m!}} e^{i(m-n)wt} c_{mn} = e^{-\frac{\beta}{2}q_0^2 - \frac{p_0^2}{2\beta\hbar^2}} e^{iwt\left(\sqrt{\beta}q_0 - \frac{ip_0}{\hbar\sqrt{\beta}}\right) + e^{-iwt\left(\sqrt{\beta}q_0 + \frac{ip_0}{\hbar\sqrt{\beta}}\right)}}. \quad (5.4)$$

O próximo passo é isolar c_{mn} desta equação. Para tal podemos expandir o lado direito

em série de potência e, fazendo uso da recursão, comparamos a igualdade termo a termo. Temos assim que:

$$\sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^M \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n! m!}} e^{i(m-n)wt} c_{mn} = e^{-\frac{\beta}{2}q_o^2 - \frac{p_o^2}{2\beta\hbar^2}} \times \sum_{k=0}^M \frac{1}{k!} \left(e^{iwt} \left(\sqrt{\beta}q_o - \frac{ip_o}{\hbar\sqrt{\beta}} \right) \right)^k \sum_{l=0}^N \frac{1}{l!} \left(e^{-iwt} \left(\sqrt{\beta}q_o + \frac{ip_o}{\hbar\sqrt{\beta}} \right) \right)^l. \quad (5.5)$$

Logo:

$$c_{nm} = \frac{1}{\sqrt{2^{n+m}n!m!}} \left(\sqrt{\beta}q_o - \frac{ip_o}{\hbar\sqrt{\beta}} \right)^n \left(\sqrt{\beta}q_o + \frac{ip_o}{\hbar\sqrt{\beta}} \right)^m e^{-\frac{\beta}{2}q_o^2 - \frac{p_o^2}{2\beta\hbar^2}}. \quad (5.6)$$

Na figura (5.1) mostramos a trajetória realizada por este oscilador coerente no espaço de fases com energia igual à $\frac{3}{2}\hbar w$. Por fim, podemos mostrar que c_{nm} é uma generalização dos coeficientes de Glauber (Apêndice B).

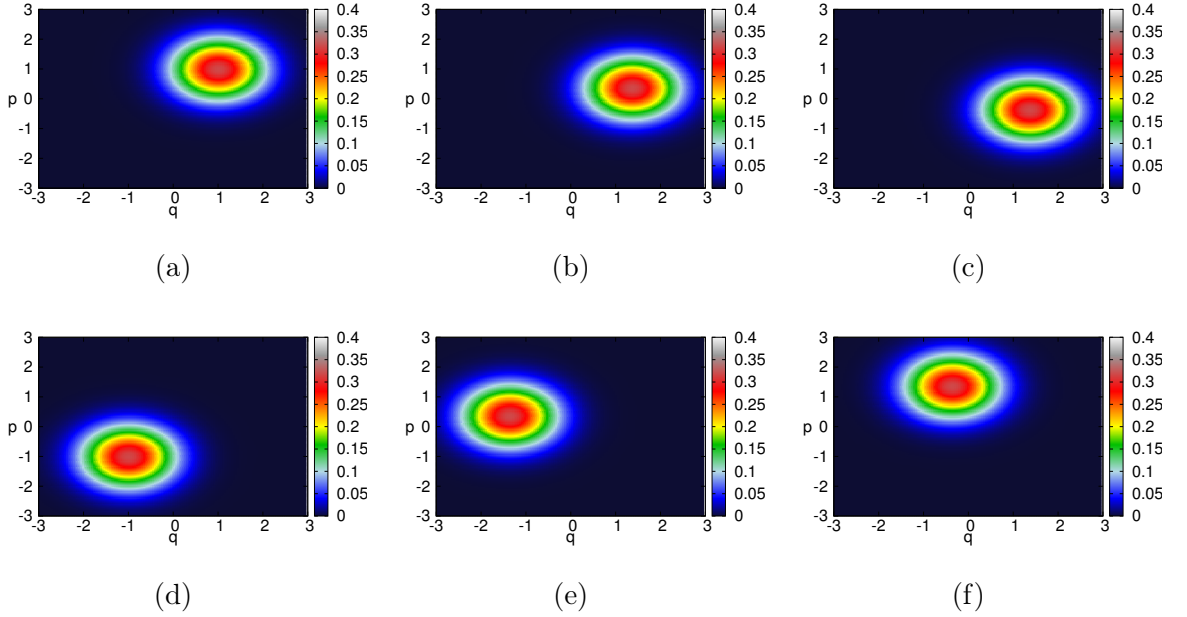


Figura 5.1: Trajetória de um oscilador clássico com energia igual a $\frac{3}{2}\hbar w$. Em (a) $t = 0.00$ adicionando-se $\frac{\pi}{6}$ até (f). $\hbar = m = w = p_o = q_o = 1$

Como os coeficientes de Glauber são números reais podemos simplesmente tomar $n = m$ e tirarmos uma raiz quadrada ao final. Partindo disso e do fato que, neste caso, $p_o = 0$ podemos escrever:

$$\langle n|\alpha \rangle^2 = c_{nn} = \frac{1}{2^n n!} (\beta q_o^2)^n e^{-\frac{\beta}{2}q_o^2}. \quad (5.7)$$

Usando (B.6) e (3.34) podemos mostrar que $\alpha^2 = \frac{\beta}{2} q_0^2$. Sendo assim:

$$\langle n|\alpha\rangle^2 = c_{nn} = \frac{1}{n!} \alpha^{2n} e^{-\alpha^2}. \quad (5.8)$$

Tirando a raiz quadrada:

$$\langle n|\alpha\rangle = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} e^{-\frac{\alpha^2}{2}}. \quad (5.9)$$

Que são exatamente os coeficientes da superposição (B.5) apresentado no Apêndice B.

6 Conclusões

Da mesma maneira que a MC não relativística foi estendida por Einstein e precursores – hoje podemos dizer que aquela é um caso particular desta última no limite $v/c \ll 1$ – assume-se, por hipótese, que a MC esteja incorporada à MQ no limite de altas energias ou números quânticos grandes. Embora esta hipótese seja bastante aceitável do ponto de vista prático, ainda não existem muitos resultados que a corroborem. Um destes resultados são os estados coerentes para o oscilador harmônico discutidos por Glauber (Apêndice B) ou, ainda, sua versão para o espaço de fases como discutido no capítulo 5.

Embora nem todo sistema quântico tenha um equivalente clássico temos, pela hipótese feita, que todo sistema clássico deve ter um equivalente ou correspondente quântico. O principal problema, portanto, é determinar qual o correspondente quântico de um sistema clássico ou ainda como tratar um sistema clássico quanticamente. Neste trabalho utilizamos as ferramentas desenvolvidas buscando determinar um método que simplifique esta transição entre clássica e quântica.

O método utilizado foi o cálculo de uma função densidade de probabilidade clássica para um determinado sistema em estudo através da equação de Liouville (3.12) e sua projeção no formalismo quântico do espaço de fases desenvolvido por Moyal e Wigner. Entretanto, existem algumas propriedades quânticas que precisaram ser levadas em consideração.

A primeira propriedade está ligada ao fato de que: sistemas físicos que apresentam algum tipo de delimitação espacial (vínculos) têm energia quantizada. Sendo assim, qualquer sistema físico, mesmo no limite clássico, deve ter uma energia condizente com esta ideia. Por conseguinte, esperamos que a soma das energias cinética e potencial de qualquer sistema (no limite quântico ou clássico) seja igual a soma $n\hbar w$, ou seja,

$$\frac{p_o^2}{2m} + V(q_o) = n\hbar w, \quad (6.1)$$

onde w é uma frequência característica de cada sistema físico e p_o e q_o são os valores de momentum e posição esperados em $t=0$.

Analisando a escala de \hbar nota-se o motivo de usarmos uma distribuição contínua de energia no mundo clássico. Neste regime um quantum de energia $\hbar w$ é completamente desprezível, ou seja, não existe uma diferença relevante entre um determinado n ou qualquer valor próximo à ele.

O segundo ponto a ressaltar, pela hipótese, é a transição necessária de uma física determinística proposta por Newton e Hamilton para uma física probabilística. Este caráter probabilístico se torna cada vez menos importante a medida que a energia do sistema aumenta ao ponto das aproximações determinísticas funcionarem perfeitamente bem para sistemas macroscópicos.

Esta ideia probabilística associada ao princípio de incerteza nos traz um resultado bastante não intuitivo: a energia de ponto zero. No sistema estudado – oscilador harmônico – assim como outros velhos conhecidos da mecânica quântica tradicional, temos que mesmo escolhendo momentum e posição iniciais médios iguais a zero, não podemos afirmar que nosso sistema esteja exatamente em repouso.

Com base nestas ideias e na hipótese inicialmente feita, torna-se aceitável supor que qualquer sistema físico clássico pode ter sua dinâmica descrita por uma função densidade de probabilidade no espaço de fases quântico e, por decorrência disso, como uma superposição de funções de Wigner, estas advindas da mecânica quântica tradicional. Entretanto, ainda existem diversas discussões de como realizar a transição clássica–quântica, ou seja, se o Hamiltoniano quântico é, de fato, equivalente ao clássico.

Apêndices

A Oscilador Harmônico via Equação de Schrödinger

De acordo com o método algébrico utilizado para a resolução da equação de Schrödinger para o oscilador harmônico, os operadores criação e aniquilação nos permitem calcular todas as autofunções necessárias para o entendimento desse sistema. Estes operadores denotados por a^\dagger e a apresentam a seguinte forma ⁵:

$$a^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2mw\hbar}}(mwq - ip), \quad (\text{A.1}) \quad a = \frac{1}{\sqrt{2mw\hbar}}(mwq + ip), \quad (\text{A.2})$$

e são conhecidos como operador criação e operador aniquilação/destruição, cuja relação de comutação pode ser facilmente demonstrada de (A.1) e (A.2), como sendo $[a, a^\dagger] = 1$. Por conseguinte, é completamente equivalente o uso dos operadores p e q ou a e a^\dagger na resolução do oscilador harmônico.

$$q = \sqrt{\frac{\hbar}{2mw}}(a + a^\dagger) \quad (\text{A.3}) \quad p = -i\sqrt{\frac{\hbar mw}{2}}(a - a^\dagger) \quad (\text{A.4})$$

Por fim podemos reescrever

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{mw^2q^2}{2}, \quad (\text{A.5})$$

como:

$$H = \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \hbar w. \quad (\text{A.6})$$

Sendo assim, se calculamos a energia média de um autoestado qualquer de H devemos obter:

$$\langle n | H | n \rangle = \langle n | \left(a^\dagger a + \frac{1}{2} \right) \hbar w | n \rangle = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar w \quad (\text{A.7})$$

A fim de determinar as autofunções de (A.6), podemos usar como ponto de partida que o operador aniquilação deve ter um autovalor nulo quando aplicado na autofunção de menor energia possível: $E_o = \frac{\hbar w}{2}$.

⁵Embora estes operadores sejam de extrema importância, não trataremos aqui de todas as suas propriedades, estas podem ser encontradas em qualquer bom livro de mecânica quântica.[4]

$$\langle q|a|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2mw\hbar}} \left(mwq + \hbar \frac{d}{dq} \right) \phi_0(q) = 0 \quad (\text{A.8})$$

Esta equação diferencial pode ser facilmente resolvida, levando-nos assim à função de onda do estado de mais baixa energia do oscilador harmônico.

$$\phi_0(q) = \langle q|0\rangle = \left(\frac{mw}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{mw}{2\hbar}q^2\right) \quad (\text{A.9})$$

Com auxílio de ϕ_0 e o operador criação podemos calcular todas as autofunções correspondentes a todos os estados de energia possíveis. Ou ainda, tendo um ϕ_n qualquer podemos calcular, além dos níveis superiores, todos os níveis de energia inferiores maior que zero com o operador aniquilação. A fim de obter tal resultado usamos:

$$a^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle, \quad (\text{A.10}) \quad a |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle. \quad (\text{A.11})$$

Através de sucessivas aplicações destas equações podemos obter o estado $|n\rangle$ a partir do estado $|0\rangle$ como segue:

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} a^\dagger |n-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{n(n-1)}} (a^\dagger)^2 |n-2\rangle = \dots = \frac{1}{\sqrt{n!}} (a^\dagger)^n |0\rangle. \quad (\text{A.12})$$

Substituindo (A.1) no resultado acima temos:

$$\phi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{mw}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} \left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}} q - \sqrt{\frac{\hbar}{mw}} \frac{d}{dq} \right)^n \exp\left(-\frac{mw}{2\hbar}q^2\right). \quad (\text{A.13})$$

Por fim, podemos usar a relação:

$$H_n(x) = \exp\left(\frac{x^2}{2}\right) \left(x - \frac{d}{dx}\right)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2}\right), \quad (\text{A.14})$$

onde $H_n(x)$ são os polinômios de Hermite de ordem n , juntamente à transformação de variável $x = \sqrt{\frac{mw}{\hbar}}q$ para obtermos a forma definitiva de $\phi_n(q)$, dada por:

$$\phi_n(q) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{mw}{\pi\hbar} \right)^{\frac{1}{4}} H_n\left(\sqrt{\frac{mw}{\hbar}}q\right) \exp\left(-\frac{mw}{2\hbar}q^2\right). \quad (\text{A.15})$$

Temos, portanto, que um certo pacote de ondas para o oscilador harmônico deve ser dado pela superposição:

$$\Psi(q, t) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(q) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \quad (\text{A.16})$$

onde $\phi_n(q)$ é dada por (A.15) e $E_n = \langle n | H | n \rangle$.

B Estados de Glauber

Suponhamos a existência de um estado coerente do oscilador dado pela superposição de autofunções do hamiltoniano (A.6) onde $\langle n | \alpha \rangle$ sejam os coeficientes da expansão:

$$|\alpha\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n | \alpha \rangle. \quad (\text{B.1})$$

Para fins de cálculo pressupomos que o autovalor de $|\alpha\rangle$ para o operador aniquilação seja α , ou seja,

$$\langle n | a | \alpha \rangle = \alpha \langle n | \alpha \rangle. \quad (\text{B.2})$$

Em instantes iremos associar este autovalor à energia média do oscilador. Agora, com auxílio do adjunto de (A.10), podemos escrever:

$$\sqrt{n+1} \langle n+1 | \alpha \rangle = \alpha \langle n | \alpha \rangle \quad (\text{B.3})$$

e, a partir desta equação, podemos calcular:

$$\langle n | \alpha \rangle = \frac{\alpha}{\sqrt{n}} \langle n-1 | \alpha \rangle = \frac{\alpha^2}{\sqrt{n(n-1)}} \langle n-2 | \alpha \rangle = \dots = \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} \langle 0 | \alpha \rangle. \quad (\text{B.4})$$

Substituindo (B.4) em (B.1) temos os coeficientes da expansão sendo que $\langle 0 | \alpha \rangle$ pode ser calculado pela condição de normalização, ou seja, $\langle \alpha | \alpha \rangle = 1$.

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{\alpha^2}{2}} \sum_n \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |n\rangle. \quad (\text{B.5})$$

Valendo-nos deste resultado, podemos calcular a energia média deste estado coerente.

$$\begin{aligned} \langle \alpha | H | \alpha \rangle &= e^{-\alpha^2} \hbar \omega \sum_{n,l=0}^{\infty} \frac{\alpha^{n+l}}{\sqrt{n! l!}} \langle n | a^\dagger a + \frac{1}{2} | \alpha \rangle \\ &= e^{-\alpha^2} \hbar \omega \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^{2n}}{n!} \left(n + \frac{1}{2} \right) = \left(\alpha^2 + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

O que mostra que podemos associar α à energia média do oscilador harmônico quântico coerente e condizente ao resultado clássico.

Como último resultado a ser apresentado neste apêndice, gostaríamos de mostrar qual a forma da função densidade de probabilidade deste oscilador quântico coerente. Substituindo em (B.5) as autofunções (A.15) do oscilador juntamente com sua parte temporal obtemos:

$$\langle q|\alpha\rangle = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2+iwt+\beta q^2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\alpha}{\sqrt{2}}e^{-iwt}\right)^n H_n(\sqrt{\beta}q), \quad (\text{B.7})$$

onde $\beta = \frac{m\omega}{\hbar}$. Recorrendo à equação (C.3), podemos reescrever:

$$\langle q|\alpha\rangle = \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{1}{2}(\alpha^2+iwt+\beta q^2)} e^{\sqrt{2\beta}\alpha q(\cos(wt)-i\sin(wt))} e^{-\frac{\alpha^2}{2}(\cos(2wt)-i\sin(2wt))}. \quad (\text{B.8})$$

Calculando seu adjunto e multiplicando obtemos:

$$\langle \alpha|q\rangle \langle q|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{-\alpha^2-\beta q^2} e^{2\sqrt{2\beta}\alpha q \cos(wt)-2\alpha^2 \cos(2wt)}, \quad (\text{B.9})$$

ou ainda,

$$\langle \alpha|q\rangle \langle q|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{-\beta\left(q-\sqrt{\frac{2}{\beta}}\alpha \cos(wt)\right)^2}. \quad (\text{B.10})$$

Com auxílio de (B.6) e (6.1), com o pequeno cuidado de que nos estados de Glauber o momentum inicial médio do oscilador é sempre zero, podemos mostrar que $\sqrt{\frac{2}{\beta}}\alpha = q_0$. Portanto, temos que a função densidade de probabilidade de um oscilador harmônico quântico coerente é dada por:

$$|\psi_\alpha(q, t)|^2 = \langle \alpha|q\rangle \langle q|\alpha\rangle = \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{-\beta(q-q_0 \cos(wt))^2} \quad (\text{B.11})$$

C Função de Wigner geral: Oscilador Harmônico

Resolvendo a equação de Schrödinger para o oscilador harmônico (apêndice A) obtemos a seguinte autofunção geral:

$$\phi_n(q, t) = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \left(\frac{\beta}{\pi}\right)^{\frac{1}{4}} e^{-\frac{\beta}{2}q^2} H_n(\sqrt{\beta}q) e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}}, \quad (\text{C.1})$$

onde $\beta = \frac{m\omega}{\hbar}$, E_n são as autoenergias e H_n são os polinômios de Hermite de ordem n . Substituindo este resultado em (4.7) obtemos:

$$2\pi\hbar\rho_{nm}(q, p, t) = \sqrt{\frac{\beta}{2^{n+m}n!m!\pi}} e^{i(n-m)wt} e^{-\beta q^2} \int dy e^{-\beta\frac{y^2}{4} - \frac{ipy}{\hbar}} H_n\left\{\sqrt{\beta}\left(q - \frac{y}{2}\right)\right\} H_m\left\{\sqrt{\beta}\left(q + \frac{y}{2}\right)\right\}. \quad (\text{C.2})$$

Para continuar nosso desenvolvimento precisamos da relação (C.3), onde x e t podem assumir qualquer valor, real ou imaginário.

$$e^{2xt-t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} H_n(x) \quad (\text{C.3})$$

A fim de usar esta relação em (C.2) podemos tomar, sem perda de generalidade, $t = 1$. Inserindo fatoriais em m e n e seus respectivos somatórios teremos:

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n!m!}} e^{i(m-n)wt} \rho_{nm}(q, p, t) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{\beta}{\pi}} e^{-\beta q^2} \int dy e^{-\beta\frac{y^2}{4} - \frac{ipy}{\hbar}} e^{2\sqrt{\beta}(q-\frac{y}{2})-1} e^{2\sqrt{\beta}(q+\frac{y}{2})-1}. \quad (\text{C.4})$$

Agora podemos integrar o lado direito sem problemas, pois não temos mais dependência dos naturais m e n .

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n!m!}} e^{i(m-n)wt} \rho_{nm}(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\beta q^2 - \frac{p^2}{\beta\hbar^2}} e^{4\sqrt{\beta}q-2} \quad (\text{C.5})$$

Infelizmente para o próximo passo é necessário ter uma ideia prévia de qual é a forma das funções de Wigner para o oscilador harmônico. A julgar pelos resultados (4.17),(4.18),(4.19) e (4.20) já calculados, percebemos que é necessária a introdução de valores complexos na equação acima. Igualando $2\sqrt{\beta}q = \left(\sqrt{\beta}q - \frac{ip}{\hbar\sqrt{\beta}}\right) + \left(\sqrt{\beta}q + \frac{ip}{\hbar\sqrt{\beta}}\right)$ e expandindo em série de potência a nova exponencial formada obtemos:

$$\sum_{n,m=0}^{\infty} \sqrt{\frac{2^{n+m}}{n!m!}} e^{i(m-n)wt} \rho_{nm}(q, p, t) = \frac{1}{\pi\hbar} e^{-\beta q^2 - \frac{p^2}{\beta\hbar^2}} \times \sum_{k,l,r=0}^{\infty} (-1)^r \frac{2^{l+k+r}}{k! l! r!} \left(\sqrt{\beta}q - \frac{ip}{\hbar\sqrt{\beta}}\right)^k \left(\sqrt{\beta}q + \frac{ip}{\hbar\sqrt{\beta}}\right)^l \quad (\text{C.6})$$

O último passo é, a partir de recursão, determinar os termos que somados em cada lado provêm uma igualdade correta. Após alguns testes conseguimos determinar os valores de k , l e r respectivos para cada par m e n . Estes são $k = m - r$, $l = n - r$ e uma soma em

r até o menor dos valores m ou n . Fazendo estas alterações na equação acima e isolando $\rho_{nm}(q, p, t)$ obtemos a função de Wigner geral para o oscilador harmônico:

$$\rho_{nm}(q, p, t) = \frac{\sqrt{2^{n+m}n!m!}}{\pi\hbar} e^{-\beta q^2 - \frac{p^2}{\beta\hbar^2}} e^{i(n-m)\omega t} \sum_{r=0}^{\min(n,m)} \frac{(-1/2)^r}{(m-r)!(n-r)!r!} \left(\sqrt{\beta}q - \frac{ip}{\hbar\sqrt{\beta}} \right)^{m-r} \left(\sqrt{\beta}q + \frac{ip}{\hbar\sqrt{\beta}} \right)^{n-r} \quad (\text{C.7})$$

Na figura (C.1) estão expostas algumas das funções de Wigner para o oscilador harmônico.

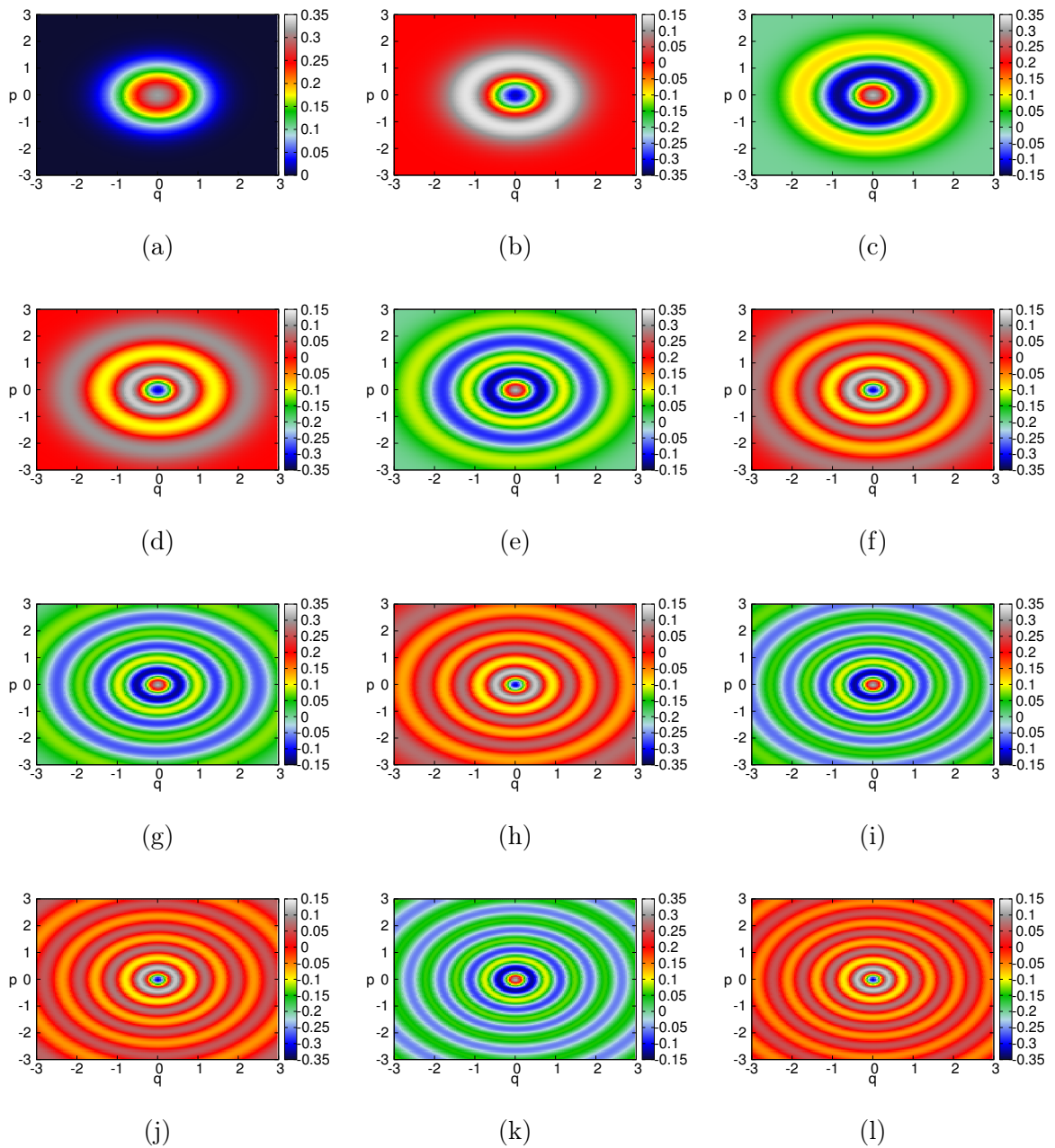


Figura C.1: As imagens correspondem aos autoestados de energia para o oscilador harmônico, ou seja, em (a) $\rho_{00}(q, p)$, (b) $\rho_{11}(q, p)$ indo até (f) com $\rho_{11,11}(q, p)$. $\hbar = m = w = 1$

Referências

- [1] Eisberg, R. e Resnick, R.; *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei and Particles* 2. Edição; ISBN 0-471-87373-X John Wiley & Sons
- [2] Groenewold, H.; *On the Principles of Elementary Quantum Mechanics, Physica* **12** (1946) 405-460
- [3] Moyal, J.; *Quantum Mechanics as a Statistical Theory, Proc Camb Phil Soc* **45** (1949) 99-124
- [4] Cohen-Tannoudji, C.; Diu, Bernard e Laloë, Franck.; *Quantum Mechanics Vol I* ISBN 978-0-471-16433-3 Wiley-VHC
- [5] Currie, I. G.; *Fundamental Mechanics of Fluids* ed 3a. (Cap. 1 – pag. 9..12) ISBN 0-8247-0886-5 Marcel Dekker, Inc.
- [6] Goldstein, H.; Poole, C. e Safko, J.; *Classical Mechanics* 3. Edição, ISBN 0-201-65-702-3 Addison Wesley
- [7] Chruściński, D. e Młodawski, K.; *Wigner function and Schrödinger equation in phase-space representation, Phys Rev A* **71** (2005) 052104
- [8] Torres-Vega, Go. e Frederick, John H.; *Quantum Mechanics in phase space: New approaches to the correspondence principle, J Chem Phys* 93(12) (1990) 8862-8874
- [9] Cohen, Leon.; *Generalized Phase-Space Distribution Functions, J Math Phys* 7(5) (1966) 781-786
- [10] Blaszkak, M. e Domański, Z.; *Phase Space Quantum Mechanics, Ann. Phys.* **327**, No. 2, (2012) 167-211
- [11] Basu, P.; Chakraborty, B. e Scholtz, F. G.; *A unifying perspective on the Moyal and Voros products and their physical meanings J Phys A Math Theor* **44**(28) (2011) 285204
- [12] Hirshfeld, Allen C. e Henselder, Peter.; *Deformation Quantization in the Teaching of Quantum Mechanics*, arXiv:quant-ph/0208163v1

- [13] Curtright, T.; Fairlie, D. e Zachos, C.; *Features of time-independent Wigner functions*
Phys Rev D **58** (1998) 025002