Valores Esperados

Aula 7

Supondo um número N de partículas num dado estado $|\psi\rangle$, a interpretação probabilística nos permite calcular a probabilidade de obter um resultado ao fazermos medimos uma grandeza Ω.

Mas também podemos calcular a média dos resultados a serem obtidos, o chamado valor esperado $\langle\Omega\rangle$. Ele é definido por

$$\langle\Omega\rangle \equiv \sum_i P(\omega_i)\,\omega_i$$

dada a forma das probabilidades é

$$\langle\Omega\rangle = \sum_i |\langle\omega_i|\psi\rangle|^2\,\omega_i = \sum_i \langle\psi|\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle\,\omega_i$$

Usando que

$$\Omega|\omega_i\rangle = \omega_i|\omega_i\rangle$$

$$\langle\Omega\rangle = \sum_i \langle\psi|\Omega|\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle$$

$$\boxed{\langle\Omega\rangle = \langle\psi|\Omega|\psi\rangle}$$

onde na última igualdade usamos

$$\sum_i |\omega_i\rangle\langle\omega_i| = \mathbb{I}$$

- Para calcular $\langle\Omega\rangle$ não é preciso saber os autovetores $\{|\omega_i\rangle\}$ e autovalores ω_i. Só os componentes do estado $|\psi\rangle$ e os elementos de matriz dele mesmo que em outra base.

- Se $|\psi\rangle$ é um autoestado de Ω (ie $\Omega|\psi\rangle = \omega|\psi\rangle$) então

$$\langle\Omega\rangle = \omega$$

o valor esperado será um dos autovalores.

Mas em geral $\langle\Omega\rangle$ não tem porque coincidir com um dos autovalores de Ω.

Incerteza: Ela é definida com

$$(\Delta\Omega)^2 \equiv \left\langle (\Omega - \langle\Omega\rangle)^2 \right\rangle = \langle\Omega^2\rangle - \langle\Omega\rangle^2$$

$$= \sum_i \langle\psi|(\Omega - \langle\Omega\rangle)^2|\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle$$

Então para um espetro discreto temos

$$(\Delta\Omega)^2 = \sum_i (\omega_i - \langle\Omega\rangle)^2 \underbrace{\langle\psi|\omega_i\rangle\langle\omega_i|\psi\rangle}_{P(\omega_i)}$$

$$\Rightarrow \boxed{(\Delta\Omega)^2 = \sum_i P(\omega_i)\,(\omega_i - \langle\Omega\rangle)^2}$$

A expressão para o caso de um espetro contínuo é então

$$\boxed{(\Delta\Omega)^2 = \int P(\omega)\,(\omega - \langle\Omega\rangle)^2\, d\omega}$$

Em particular, se $|\psi\rangle$ é um autoestado de Ω

$$\Rightarrow (\Delta\Omega)^2 = 0 \quad \text{(PROVAR!)}$$

e $|\psi\rangle$ é um <u>estado determinado</u>

Princípio de Incerteza

Consideramos dois operadores hermitianos incompatíveis Ω e Λ com comutador

$$[\Omega, \Lambda] = i\Gamma$$

é fácil provar que então $\Gamma^\dagger = \Gamma \Rightarrow \Gamma$ é hermitiano.

Queremos calcular o produto das incertezas

$$(\Delta\Omega)^2 (\Delta\Lambda)^2 = \langle (\Omega - \langle\Omega\rangle)^2 \rangle \langle (\Lambda - \langle\Lambda\rangle)^2 \rangle$$

$$= \langle \psi | (\Omega - \langle\Omega\rangle)^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Lambda - \langle\Lambda\rangle)^2 | \psi \rangle$$

Mas usando que

$$(\Delta\Omega)^2 = \langle \psi | (\Omega - \langle\Omega\rangle)(\Omega - \langle\Omega\rangle | \psi \rangle$$

$$= \langle \psi (\Omega - \langle\Omega\rangle)^\dagger (\Omega - \langle\Omega\rangle) | \psi \rangle$$

$$= \langle (\Omega - \langle\Omega\rangle)\psi | (\Omega - \langle\Omega\rangle)\psi \rangle$$

$$\equiv \langle f | f \rangle$$

Onde definimos

$$|f\rangle \equiv (\Omega - \langle\Omega\rangle)|\psi\rangle$$

E, analogamente, escrevemos

$$(\Delta\Lambda)^2 \equiv \langle g|g\rangle \qquad \text{com}$$

$$|g\rangle \equiv (\Lambda - \langle\Lambda\rangle)|\psi\rangle$$

Então obtemos,

$$(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 = \langle f|f\rangle\langle g|g\rangle$$

Mas a desigualdade de Schwarz para um produto interno num espaço vetorial diz que

$$\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

Mas $$|\langle f|g\rangle|^2 \geq \left(\mathrm{Im}[\langle f|g\rangle]^2\right)$$

$$|\langle f|g\rangle|^2 \geq \left(\frac{1}{2i}(\langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle)\right)^2$$

$$\langle f|g\rangle = \langle\psi|(\Omega-\langle\Omega\rangle)(\Lambda-\langle\Lambda\rangle)|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|\Omega\Lambda - \Omega\langle\Lambda\rangle - \langle\Omega\rangle\Lambda + \langle\Omega\rangle\langle\Lambda\rangle|\psi\rangle$$

$$= \langle\Omega\Lambda\rangle - \langle\Omega\rangle\langle\Lambda\rangle - \langle\Omega\rangle\langle\Lambda\rangle + \langle\Omega\rangle\langle\Lambda\rangle$$

$$\boxed{\langle f|g\rangle = \langle\Omega\Lambda\rangle - \langle\Omega\rangle\langle\Lambda\rangle}$$

analogamente,

$$\boxed{\langle g|f\rangle = \langle\Lambda\Omega\rangle - \langle\Omega\rangle\langle\Lambda\rangle}$$

$$\Rightarrow \langle f|g\rangle - \langle g|f\rangle = \langle[\Omega,\Lambda]\rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{(\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq \left(\frac{1}{2i}\langle[\Omega,\Lambda]\rangle\right)^2}$$

↳ princípio de incerteza generalizado

Comentário:

$$[\Omega,\Lambda] = i\Gamma$$

$$\Rightarrow (\Delta\Omega)^2(\Delta\Lambda)^2 \geq \left(\frac{\langle\Gamma\rangle}{2}\right)^2$$ onde $\langle\Gamma\rangle$ é um número real γ

$$\Rightarrow \quad (\Delta\Omega)^2 (\Delta\Lambda)^2 \geq \frac{\gamma^2}{4}$$

Eg $\begin{matrix}\Omega = X \\ \Lambda = P\end{matrix} \quad > \quad [X, P] = i\hbar$

$$\Rightarrow \quad (\Delta X)^2 (\Delta P)^2 \geq \frac{\hbar^2}{4}$$

ou

$$\boxed{\Delta X \cdot \Delta P \geq \frac{\hbar}{2}}$$

Em geral, dois observáveis conjugados Ω e Λ satisfazem $[\Omega, \Lambda] = i\hbar$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\Delta\Omega \, \Delta\Lambda \geq \frac{\hbar}{2}}$$

O "pacote de ondas" com incerteza mínima?

Voltando à desigualdade de Schwarz:

$$\langle f|f\rangle\langle g|g\rangle \geq |\langle f|g\rangle|^2$$

vemos que a igualdade acontece quando os vetores $|f\rangle$ e $|g\rangle$ estão na mesma "direção". Por exemplo, no caso de vetores em duas dimensões

$$\langle f|g\rangle \longrightarrow \vec{f}\cdot\vec{g} = |f||g|\cos\theta$$

$$\Rightarrow \quad |f|^2|g|^2 \geq |f|^2|g|^2\cos^2\theta$$

a igualdade acontece para $\cos^2\theta = 1$.

No nosso caso $|f\rangle$ e $|g\rangle$ são "paralelos" se

$$\boxed{|g\rangle = c|f\rangle}$$

onde c é um número (em geral complexo).

Mas essa só foi uma das fontes de desigualdade final quando derivamos o princípio de incerteza.

A outra foi usar que

$$|\langle f|g\rangle|^2 \geq \left(\mathrm{Im}[\langle f|g\rangle]\right)^2$$

Essa outra desigualdade vira uma igualdade quando

$$\boxed{Re[\langle f|g\rangle] = 0}$$

Combinando as duas termos

$$\langle f|g\rangle = c\,\langle f|f\rangle$$

$$\Rightarrow Re[\langle f|g\rangle] = Re[c\,\langle f|f\rangle] = 0$$

Mas $Re[\langle f|f\rangle] \neq 0$ dado que $\langle f|f\rangle$ é real!

$\Rightarrow$ c deve ser puramente imaginário

vamos escrever c como

$$c = i\,a \qquad \text{com } a \text{ real}$$

$$\Rightarrow \boxed{|g\rangle = i\,a\,|f\rangle}$$

Vamos, como exemplo, a considerar o caso $\Omega = X$ e $\Lambda = P$. Então

$$|f\rangle = (X - \langle x\rangle)|\psi\rangle \quad \text{e}$$

$$|g\rangle = (P - \langle p\rangle)|\psi\rangle$$

Queremos obter o estado $|\psi\rangle$ tal que a incerteza seja mínima.

$$\Rightarrow \quad \Delta X \, \Delta P = \frac{\hbar}{2}$$

Então para isso impomos a condição

$$(P - \langle P\rangle)|\psi\rangle = i a \,(X - \langle X\rangle)|\psi\rangle$$

Para obter a solução dessa equação para $|\psi\rangle$ é melhor projetar numa base em particular. Vamos projetar em $\{|x\rangle\}$.

$$\Rightarrow \quad \langle x|(P - \langle P\rangle)|\psi\rangle = i a \langle x|(X - \langle X\rangle)|\psi\rangle$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{\left(-i\hbar \frac{d}{dx} - \langle P\rangle\right)\psi(x) = i a \,(x - \langle X\rangle)\,\psi(x)}$$

da variável x!
Não o operador!

$\Rightarrow$ equação diferencial para $\psi(x) \Leftrightarrow |\psi\rangle$ com incerteza mínima.

(Nota: provar que $\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx}$; lista!)

Então,

$$-i\hbar \frac{d\psi(x)}{dx} = ia(x-\langle x\rangle)\psi(x) + \langle p\rangle \psi(x)$$

$$\Rightarrow \quad \frac{d\psi}{\psi} = \frac{i}{\hbar}\left\{ ia(x-\langle x\rangle) + \langle p\rangle \right\} dx$$

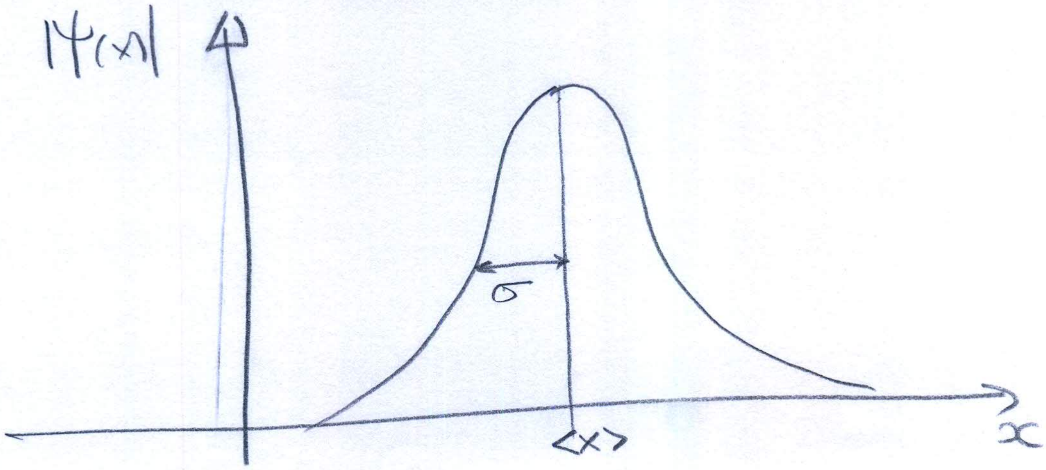
A solução geral tem a forma (mostrar!)

$$\psi(x) = A\, e^{-\frac{a}{2\hbar}(x-\langle x\rangle)^2} \cdot e^{\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle x}$$

Onde A é uma constante.
Vemos que $\psi(x)$ resultando em mínima incerteza é uma Gaussiana! centrada em $\langle x\rangle$, e com

$$\sigma_x^2 = \frac{\hbar}{a}$$

Então a dispersão da Gaussiana, $\sigma^2 \longrightarrow 0$ no limite clássico.



No limite $\hbar \to 0$ a partícula fica localizada em $\langle x\rangle$!

Se impomos

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 \, dx = 1 = \int_{-\infty}^{\infty} |A|^2 \, e^{-\frac{a}{\hbar}(x - \langle x \rangle)^2} dx$$

$$= |A|^2 \sqrt{\pi \frac{\hbar}{a}} = 1$$

$$\Rightarrow \quad A = \frac{1}{(\pi \hbar/a)^{1/4}}$$ (escolhimos A real, arbitrário)

$\Rightarrow$ a densidade de probabilidade é uma Gaussiana

$$P(x)\, dx = |\psi(x)|^2 \, dx = \frac{1}{\sqrt{\pi \hbar/a}} \, e^{-\frac{a}{\hbar}(x - \langle x \rangle)^2}$$

Claramente, se calcularmos

$$\langle X \rangle = \langle \psi | X | \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi | x \rangle \langle x | X | \psi \rangle \, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x) \, x \, \psi(x) \, dx = \langle x \rangle$$ (conferir!)

A $\psi(x)$ (ou $|\psi(x)|^2$) define a probabilidade da variável X. E a variável P? Como fica a sua distribuição de probabilidade?

O operador P na base $\{|x\rangle\}$

$$\langle x|P|\psi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|P|x'\rangle\langle x'|\psi\rangle\, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar)\delta'(x-x')\,\psi(x')\, dx'$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} (-i\hbar)\,\delta(x-x')\,\frac{d\psi(x')}{dx'}\,.\,dx'$$

$$\Rightarrow \boxed{\langle x|P|\psi\rangle = -i\hbar\frac{d\psi(x)}{dx}}$$

Autovalores e Autovetores de P

Sabemos que os autovetores são definidos por

$$P|p\rangle = p\,|p\rangle$$

$\Rightarrow$ projetando na base $\{|x\rangle\}$ temos

$$\langle x|P|p\rangle = p\,\langle x|p\rangle$$

MAS

$$\langle x|P|p\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle x|P|x'\rangle\langle x'|p\rangle \, dx'$$

$$= \int (-i\hbar)\, \delta(x-x') \frac{d}{dx'} \langle x'|p\rangle \, dx'$$

se definimos

$\langle x|p\rangle \equiv \psi_p(x)$ função de onda correspondente a um autoestado do momento: $|p\rangle$

$$\Rightarrow \quad \langle x|P|p\rangle = -i\hbar \frac{d\psi_p(x)}{dx} \quad , \text{ e da equação anterior}$$

$$\Rightarrow \quad \boxed{-i\hbar \frac{d\psi_p(x)}{dx} = p\, \psi_p(x)}$$

A solução é

$$\frac{d\psi_p}{\psi_p} = \frac{i}{\hbar} p \, dx$$

$$\Rightarrow \quad \psi_p(x) = C\, e^{\frac{i}{\hbar} p x}$$

onde C é uma constante arbitrária.

Se impomos a normalização pelo delta de Dirac

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p')$$

$\Rightarrow$ Calcular $\langle p|\psi\rangle$

$\uparrow$ estado de mínima incerteza

$$\langle p|p'\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle p|x\rangle\langle x|p'\rangle\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \psi_p^*(x)\, \psi_{p'}(x)\, dx$$

$$= |c|^2 \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p'-p)x}\, dx}_{2\pi\hbar\, \delta(p-p')} \qquad \left(\delta(ax) = \frac{\delta(x)}{|a|}\,!\right)$$

$$\Rightarrow \quad c = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \qquad \text{(escolhendo c real)}$$

$$\Rightarrow \boxed{\psi_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{\frac{i}{\hbar}px}}$$

Finalmente: queremos calcular a projeção do estado $|\psi\rangle$ de mínima incerteza na base de autoestados $\{|p\rangle\}$.

$\Rightarrow$ Calcular $\langle p|\psi\rangle$

$\uparrow$ estado de mínima incerteza

$$-\frac{a}{2\hbar}\left(x^2 - 2x\langle x\rangle + \langle x\rangle^2\right) - \frac{i}{\hbar}(p-\langle p\rangle)x$$

$$-\frac{a}{2\hbar}\Bigg(x^2 - 2x\left(\langle x\rangle + \frac{i\,\cancel{2\hbar}}{\cancel{\hbar}\,2a}(p-\langle p\rangle)\right) + \langle x\rangle^2$$

$$+\left(\frac{i}{a}(p-\langle p\rangle)\right)^2 + \frac{2i\langle x\rangle}{a}(p-\langle p\rangle)$$

$$- \quad '' \quad - \quad '' \Bigg)$$

$$= -\frac{a}{2\hbar}\Bigg[\left(x - \left(\langle x\rangle + \frac{i}{a}(p-\langle p\rangle)\right)\right)^2$$

$$- \left[\frac{i}{a}(p-\langle p\rangle)\right]^2 + \frac{2i\langle x\rangle}{a}(p-\langle p\rangle)\Bigg]$$

$$\Rightarrow \int e^{-\frac{a}{2\hbar}\left(x - \langle x\rangle - \frac{i}{a}(p-\langle p\rangle)\right)^2} dx$$

$$\underbrace{e^{-\frac{(p-\langle p\rangle)^2}{2\hbar a}} \; e^{-\frac{i}{\hbar}\langle x\rangle(p-\langle p\rangle)}}$$

$$\times \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{a}}$$

$$\langle p|\psi\rangle = \int \langle p|x\rangle\langle x|\psi\rangle\, dx$$

$$= \int \psi_p^*(x)\, \psi(x)\, dx$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, e^{-\frac{i p x}{\hbar}}\; \frac{1}{\left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^{1/4}}\, e^{-\frac{a}{2\hbar}(x-\langle x\rangle)^2}\; e^{\frac{i}{\hbar}\langle p\rangle x}\, dx$$

$$\langle p|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\frac{1}{\left(\frac{\pi\hbar}{a}\right)^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{a}{2\hbar}(x-\langle x\rangle)^2}\; e^{-\frac{i}{\hbar}(p-\langle p\rangle)x}\, dx$$

completando o quadrado a integral dá

$$\langle p|\psi\rangle = \left(\frac{a}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{a}}\; e^{-\frac{1}{2\hbar a}(p-\langle p\rangle)^2}\; e^{-\frac{i}{\hbar}\langle x\rangle(p-\langle p\rangle)}$$

$\Rightarrow$ é uma Gaussiana em p também!

Porém! A dispersão agora é

$$\sigma_p^2 = \hbar \times a$$

$\Rightarrow$ quando a dispersão em x diminue
a dispersão em p aumenta e viceversa!