Clase 7 - Martes 07/09/2021

La clase pasada vimos:

- Postulados de la mecánica cuántica
- Reglas de cuantización

En esta clase veremos:

- Valor medio de un observable en un estado
- Desviación cuadrática media de un observable en un estado
- Relación de incerteza de Heisenberg
- Estado Gaussiano: mínima incerteza
- Algo de representaciones $|\mathbf{r}\rangle$ y $|\mathbf{p}\rangle$

Los 6 postulados de la Mecánica Cuántica

REPASO

First Postulate: At a fixed time t_0, the state of a physical system is defined by specifying a ket $|\psi(t_0)\rangle$ belonging to the state space $\mathscr{E}$.

Second Postulate: Every measurable physical quantity $\mathscr{A}$ is described by an operator A acting in $\mathscr{E}$; this operator is an observable.

Third Postulate: The only possible result of the measurement of a physical quantity $\mathscr{A}$ is one of the eigenvalues of the corresponding observable A.

Los 6 postulados de la Mecánica Cuántica

REPASO

Fourth Postulate (case of a discrete non-degenerate spectrum)

$$\mathscr{P}(a_n) = |\langle u_n | \psi \rangle|^2$$

Fourth Postulate (case of a discrete spectrum)

$$\mathscr{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i | \psi \rangle|^2$$

Fourth Postulate (case of a continuous non-degenerate spectrum)

$$\mathrm{d}\mathscr{P}(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2 \,\mathrm{d}\alpha$$

Los 6 postulados de la Mecánica Cuántica

REPASO

Fifth Postulate: If the measurement of the physical quantity $\mathscr{A}$ on the system in the state $|\psi\rangle$ gives the result a_n, the state of the system immediately after the measurement is the normalized projection, $\frac{P_n|\psi\rangle}{\sqrt{\langle\psi|P_n|\psi\rangle}}$, of $|\psi\rangle$ onto the eigensubspace associated with a_n.

Sixth Postulate: The time evolution of the state vector $|\psi(t)\rangle$ is governed by the Schrödinger equation:

$$i\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\psi(t)\rangle = H(t)|\psi(t)\rangle$$

where $H(t)$ is the observable associated with the total energy of the system.

REPASO

Reglas de cuantización para operadores

With the position $\mathbf{r}(x, y, z)$ of the particle is associated the observable $\mathbf{R}(X, Y, Z)$. With the momentum $\mathbf{p}(p_x, p_y, p_z)$ of the particle is associated the observable $\mathbf{P}(P_x, P_y, P_z)$.

The observable A which describes a classically defined physical quantity $\mathscr{A}$ is obtained by replacing, in the suitably symmetrized expression for $\mathscr{A}$, $\mathbf{r}$ and $\mathbf{p}$ by the observables $\mathbf{R}$ and $\mathbf{P}$ respectively.

Valor medio de un observable en un dado estado

Valor medio de un observable en un estado $|\psi\rangle$

Supongamos que preparamos N veces el estado $|\psi\rangle$ y medimos el observable A

En las mediciones obtenemos $\mathcal{N}(a_n)$ veces el autovalor a_n

Cuarto postulado : $\dfrac{\mathcal{N}(a_n)}{N} \xrightarrow{N \longrightarrow \infty} \mathcal{P}(a_n)$ con $\sum_n \mathcal{N}(a_n) = N$

Valor medio obtenido en las N mediciones:

$$\frac{1}{N}\sum_n a_n \mathcal{N}(a_n) \xrightarrow{N \longrightarrow \infty} \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) = \langle A \rangle_\psi$$

Valor medio de un observable en un estado $|\psi\rangle$

Según el cuarto postulado: $\mathcal{P}(a_n) = \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$

$$\langle A\rangle_\psi = \sum_n a_n \mathcal{P}(a_n) = \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} |\langle u_n^i|\psi\rangle|^2$$

$$= \sum_n a_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|a_n|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$$

$$= \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} \langle\psi|A|u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle$$

$$= \langle\psi|A \sum_n \sum_{i=1}^{g_n} |u_n^i\rangle\langle u_n^i|\psi\rangle = \langle\psi|A|\psi\rangle$$

Valor medio de un observable en un estado $|\psi\rangle$

Caso de un observable A con espectro continuo

$$\frac{\mathrm{d}\mathcal{N}(\alpha)}{N} \xrightarrow[N\to\infty]{} \mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha)$$

$$\langle A \rangle_\psi = \int \alpha \, \mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha)$$

$$\mathrm{d}\mathcal{P}(\alpha) = \rho(\alpha)\, \mathrm{d}\alpha$$

$$\rho(\alpha) = |c(\alpha)|^2 = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2$$

$$\langle A \rangle_\psi = \int \alpha \langle \psi | v_\alpha \rangle \langle v_\alpha | \psi \rangle \, \mathrm{d}\alpha$$

$$\langle A \rangle_\psi = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Valor medio de un observable en un estado $|\psi\rangle$

Ejemplos:

$$\langle X \rangle_\psi = \langle \psi | X | \psi \rangle$$
$$= \int d^3r \, \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | X | \psi \rangle$$
$$= \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}) \, x \, \psi(\mathbf{r})$$

$$\langle P_x \rangle_\psi = \langle \psi | P_x | \psi \rangle$$
$$= \int d^3p \, \bar{\psi}^*(\mathbf{p}) \, p_x \, \bar{\psi}(\mathbf{p})$$

$$\updownarrow$$

$$\langle P_x \rangle_\psi = \int d^3r \, \langle \psi | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | P_x | \psi \rangle$$
$$= \int d^3r \, \psi^*(\mathbf{r}) \left[\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) \right]$$

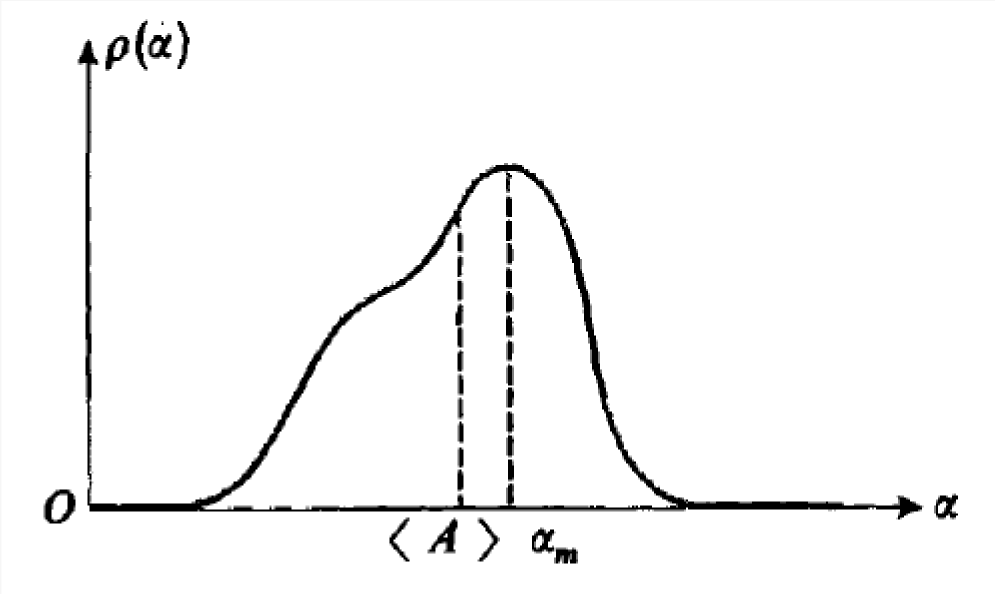
Desviación cuadrática media de A en un estado

Desviación cuadrática media de A en $|\psi\rangle$

Supongamos que el observable A tiene un espectro contínuo α

La densidad de probabilidad de medir α está dada por la curva:

$$\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2$$



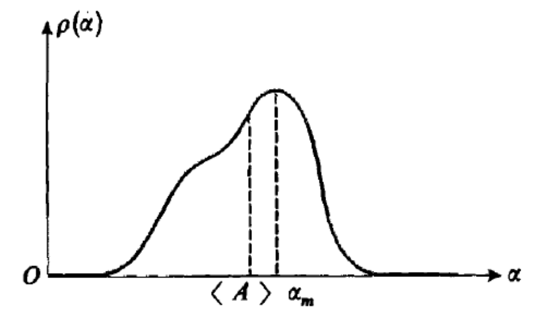
Desviación cuadrática media de A en $|\psi\rangle$

Querríamos una expresión que refleje el ancho de la curva alrededor de <A>

Varianza:

$$(\Delta A)^2 = \langle \underbrace{(A - \langle A \rangle)}_{\text{Desviación respecto de la media}}{}^2 \rangle$$

$$\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2$$

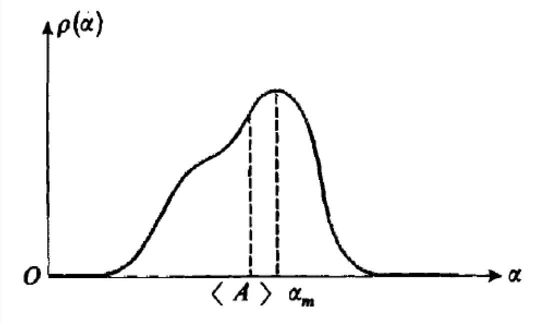


$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$$

Desviación cuadrática media

Desviación cuadrática media

$$\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2$$



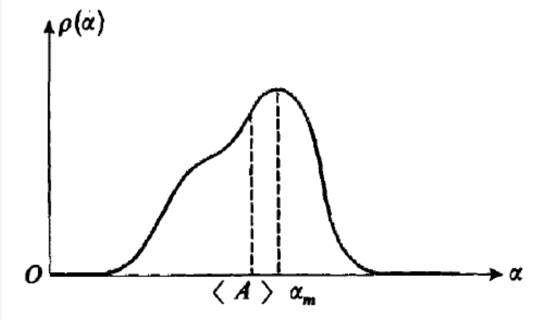
$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$$

$$\Delta A = \sqrt{\langle \psi | (A - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle}$$

$$\begin{aligned} \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle &= \langle (A^2 - 2\langle A \rangle A + \langle A \rangle^2) \rangle \\ &= \langle A^2 \rangle - 2\langle A \rangle^2 + \langle A \rangle^2 \\ &= \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \quad \Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

Desviación cuadrática media de A en $|\psi\rangle$



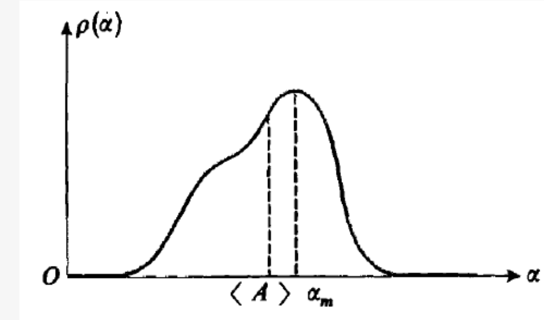
$$\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2$$

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2\rangle - \langle A\rangle^2}$$

$$\begin{aligned}\langle A^2\rangle &= \langle\psi|A^2|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\int d\alpha\,|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|A^2|\psi\rangle \\ &= \int d\alpha\,\alpha^2\,\langle\psi|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle \\ &= \int d\alpha\,\alpha^2\,|\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 \\ &= \int d\alpha\,\alpha^2\rho(\alpha)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle A\rangle &= \langle\psi|A|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\mathbf{1}A|\psi\rangle \\ &= \langle\psi|\int d\alpha\,|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|A|\psi\rangle \\ &= \int d\alpha\,\alpha\,\langle\psi|v_\alpha\rangle\langle v_\alpha|\psi\rangle \\ &= \int d\alpha\,\alpha\,|\langle v_\alpha|\psi\rangle|^2 \\ &= \int d\alpha\,\alpha\,\rho(\alpha)\end{aligned}$$

Desviación cuadrática media de A en $|\psi\rangle$



$$\rho(\alpha) = |\langle v_\alpha | \psi \rangle|^2$$

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

$$\langle A^2 \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle = \int d\alpha\, \alpha^2 \rho(\alpha)$$

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \int d\alpha\, \alpha\, \rho(\alpha)$$

$$(\Delta A)^2 = \int d\alpha\, \alpha^2 \rho(\alpha) - \left[\int d\alpha\, \alpha \rho(\alpha) \right]^2$$

Relaciones de incerteza de Heisenberg

Relaciones de incerteza de Heisenberg

Para un estado dado $|\psi\rangle$ se cumple que:

$$\begin{cases} \Delta X \,.\, \Delta P_x \geqslant \hbar/2 \\ \Delta Y \,.\, \Delta P_y \geqslant \hbar/2 \\ \Delta Z \,.\, \Delta P_z \geqslant \hbar/2 \end{cases}$$

Donde:

$$\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

$$\langle A^2 \rangle = \langle \psi | A^2 | \psi \rangle$$

$$\langle A \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle$$

Relaciones de incerteza de Heisenberg

Para un estado dado $|\psi\rangle$ se cumple que:
$$\begin{cases} \Delta X \,.\, \Delta P_x \geqslant \hbar/2 \\ \Delta Y \,.\, \Delta P_y \geqslant \hbar/2 \\ \Delta Z \,.\, \Delta P_z \geqslant \hbar/2 \end{cases}$$

Son un caso particular del siguiente teorema sobre **Observables canónicamente conjugados**

Sean dos observables, P y Q, tales que: $[Q, P] = i\hbar$

$$\longrightarrow \quad \Delta P \,.\, \Delta Q \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

Relaciones de incerteza de Heisenberg

Complement C_{III}

ROOT-MEAN-SQUARE DEVIATIONS OF TWO CONJUGATE OBSERVABLES

1. The uncertainty relation for P and Q
2. The "minimum" wave packet

Sean dos observables, P y Q, tales que: $[Q, P] = i\hbar$

Consideremos: $|\varphi\rangle = (Q + i\lambda P)|\psi\rangle$

$$\begin{aligned}
\langle\varphi|\varphi\rangle &= \langle\psi|(Q - i\lambda P)(Q + i\lambda P)|\psi\rangle \\
&= \langle\psi|Q^2|\psi\rangle + \langle\psi|(i\lambda QP - i\lambda PQ)|\psi\rangle + \langle\psi|\lambda^2 P^2|\psi\rangle \\
&= \langle Q^2\rangle + i\lambda\langle[Q, P]\rangle + \lambda^2\langle P^2\rangle \\
&= \langle Q^2\rangle - \lambda\hbar + \lambda^2\langle P^2\rangle \geqslant 0
\end{aligned}$$

$\Rightarrow$ $\hbar^2 - 4\langle P^2\rangle\langle Q^2\rangle \leqslant 0$ $\Rightarrow$ $\langle P^2\rangle\langle Q^2\rangle \geqslant \dfrac{\hbar^2}{4}$

Relaciones de incerteza de Heisenberg

$[Q, P] = i\hbar$ → $\langle P^2 \rangle \langle Q^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$

Introducimos dos nuevos observables, P' y Q', definidos como:

$$P' = P - \langle P \rangle = P - \langle \psi | P | \psi \rangle$$
$$Q' = Q - \langle Q \rangle = Q - \langle \psi | Q | \psi \rangle$$

P' y Q' también son observables conjugados:

$[Q', P'] = [Q, P] = i\hbar$ → $\langle P'^2 \rangle \langle Q'^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$

Relaciones de incerteza de Heisenberg

$$P' = P - \langle P \rangle = P - \langle \psi | P | \psi \rangle$$
$$Q' = Q - \langle Q \rangle = Q - \langle \psi | Q | \psi \rangle$$

$$\Delta A = \sqrt{\langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle}$$

$$\Delta P = \sqrt{\langle P'^2 \rangle}$$
$$\Delta Q = \sqrt{\langle Q'^2 \rangle}$$

$$\langle P'^2 \rangle \langle Q'^2 \rangle \geqslant \frac{\hbar^2}{4}$$

$$\Delta P = \sqrt{\langle P'^2 \rangle}$$
$$\Delta Q = \sqrt{\langle Q'^2 \rangle}$$

$$\Delta P \,.\, \Delta Q \geqslant \frac{\hbar}{2}$$

Relaciones de incerteza de Heisenberg

$$[Q, P] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta P \, . \, \Delta Q \geqslant \frac{\hbar}{2}}$$

Generalización:

$$\Delta A \, . \, \Delta B \geqslant \frac{1}{2} \left| \langle \, [A, B] \, \rangle \right|$$

Estado con mínima incerteza: paquete Gaussiano

$$[Q, P] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta P \,.\, \Delta Q \geqslant \frac{\hbar}{2}}$$

Hay un estado |Ψ> particular para el cual vale la igualdad: $\Delta P \,.\, \Delta Q = \frac{\hbar}{2}$

$$\psi(q) = C\, e^{i\langle P\rangle q/\hbar}\, e^{-\left[\frac{q-\langle Q\rangle}{2\,\Delta Q}\right]^2} \qquad C = [2\pi(\Delta Q)^2]^{-1/4}$$

En la representación |q>

$$\bar{\psi}(p) = [2\pi(\Delta P)^2]^{-1/4}\, e^{-i\langle Q\rangle p/\hbar}\, e^{-\left[\frac{p-\langle P\rangle}{2\,\Delta P}\right]^2}$$

En la representación |p>

Representaciones |**r**> y |**p**> : Operadores **R** y **P**

Representaciones |**r**> y |**p**> : Operadores **R** y **P**

Operador posición $\vec{R} = (x, y, z)$

Sabemos como actúa sobre las funciones de onda:

$$\hat{X}\,\psi(\vec{r}) = x\,\psi(\vec{r}) = \psi'(\vec{r})$$

Su acción sobre el ket $|\psi\rangle$ está dada por eso:

$$\hat{X}\,|\psi\rangle = |\psi'\rangle$$

$$\langle\vec{r}|\,\hat{X}\,|\psi\rangle = \langle\vec{r}|\psi'\rangle = \psi'(\vec{r}) = x\,\psi(\vec{r})$$

Representaciones |**r**> y |**p**> : Operadores **R** y **P**

<u>Operador momento</u> $\vec{P} = (P_x, P_y, P_z)$

Se define $\vec{P}$ por su acción en la representación $\{|\vec{p}\rangle\}$:

$$\langle \vec{p} | P_x | \psi \rangle = p_x \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_x \bar{\psi}(\vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | P_y | \psi \rangle = p_y \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_y \bar{\psi}(\vec{p})$$

$$\langle \vec{p} | P_z | \psi \rangle = p_z \langle \vec{p} | \psi \rangle = p_z \bar{\psi}(\vec{p})$$

Representaciones |r> y |p> : Operadores R y P

Es importante conocer su acción en la representación $\{|\vec{r}\rangle\}$

$$\langle \vec{r}\,|\,P_x\,|\,\psi\rangle = \int d^3p\, \langle \vec{r}\,|\,\vec{p}\rangle\langle \vec{p}\,|\,P_x\,|\,\psi\rangle$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\; e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}/\hbar}\; \underbrace{p_x\;\bar{\psi}(\bar{p})}$$

$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\,\bar{\psi}(\mathbf{p})$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int d^3p\, e^{i\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}/\hbar}\,\bar{\psi}(\mathbf{p})$$

$$= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}\psi(\mathbf{r})$$

Resumen de la Clase 7

En esta clase vimos:

- Valor medio de un observable en un estado
- Desviación cuadrática media de un observable en un estado
- Relación de incerteza de Heisenberg
- Estado Gaussiano: mínima incerteza
- Algo de representaciones |**r**> y |**p**>