

Introdução ao Princípio da Incerteza de Heisenberg

Sandro Vitenti

Lei de Newton e momento

A mecânica clássica descreve o movimento de uma partícula pela segunda lei de Newton:

$$m\ddot{x}(t) = F(x, t),$$

onde $\ddot{x} = d^2x/dt^2$ é a aceleração, m a massa, e F a força resultante.

Definimos o momento linear como

$$p(t) \equiv m\dot{x}(t).$$

Derivando em relação ao tempo:

$$\dot{p}(t) = m\ddot{x}(t) = F(x, t).$$

Portanto, $m\ddot{x} = F$ é equivalente a $\dot{p} = F$.

Sistema de primeira ordem

Podemos reescrever a equação de segunda ordem em x como um sistema de primeira ordem para as variáveis $x(t)$ e $p(t)$:

$$\dot{x}(t) = \frac{p(t)}{m}, \quad \dot{p}(t) = F(x, t).$$

Expansão temporal para δt

Para um pequeno intervalo δt , expandindo por Taylor de primeira ordem:

$$x(t + \delta t) \approx x(t) + \frac{p(t)}{m}\delta t,$$

$$p(t + \delta t) \approx p(t) + F(x, t)\delta t.$$

Força conservativa e potencial

Se a força for conservativa, existe uma função potencial $V(x)$ tal que

$$F(x) = -\frac{dV}{dx}.$$

Formulação Hamiltoniana

Definimos o Hamiltoniano

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x).$$

As equações de movimento são obtidas pelas derivadas parciais:

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{dV}{dx}.$$

Note que $\frac{p^2}{2m}$ depende apenas de p , e $V(x)$ depende apenas de x , o que simplifica os cálculos.

Estrutura matricial

Podemos condensar o sistema na forma matricial:

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} x \\ p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial x} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix}.$$

A matriz

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

é chamada de matriz simplética e codifica a estrutura da mecânica Hamiltoniana.

Exemplo: Oscilador harmônico

Para $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$, temos:

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2,$$
$$\dot{x} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -kx.$$

Combinando: $m\ddot{x} = -kx$, que é a equação do oscilador harmônico.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# parâmetros
m = 2.0
k = 0.34
omega = np.sqrt(k / m)

# tempo
t = np.linspace(0, 2 * np.pi / omega, 400)

# condições iniciais
x0 = 1.0
p0 = 0.0

# soluções analíticas
x = x0 * np.cos(omega * t) + (p0 / (m * omega)) * np.sin(omega * t)
p = p0 * np.cos(omega * t) - m * omega * x0 * np.sin(omega * t)

# gráfico no espaço de fases
plt.figure(figsize=(6, 6))
plt.plot(x, p, lw=2)

plt.xlabel("$x$")
plt.ylabel("$p$")
plt.title("Espaço de fases do oscilador harmônico")
plt.grid(alpha=0.3)
plt.axis("equal")
plt.show()
```

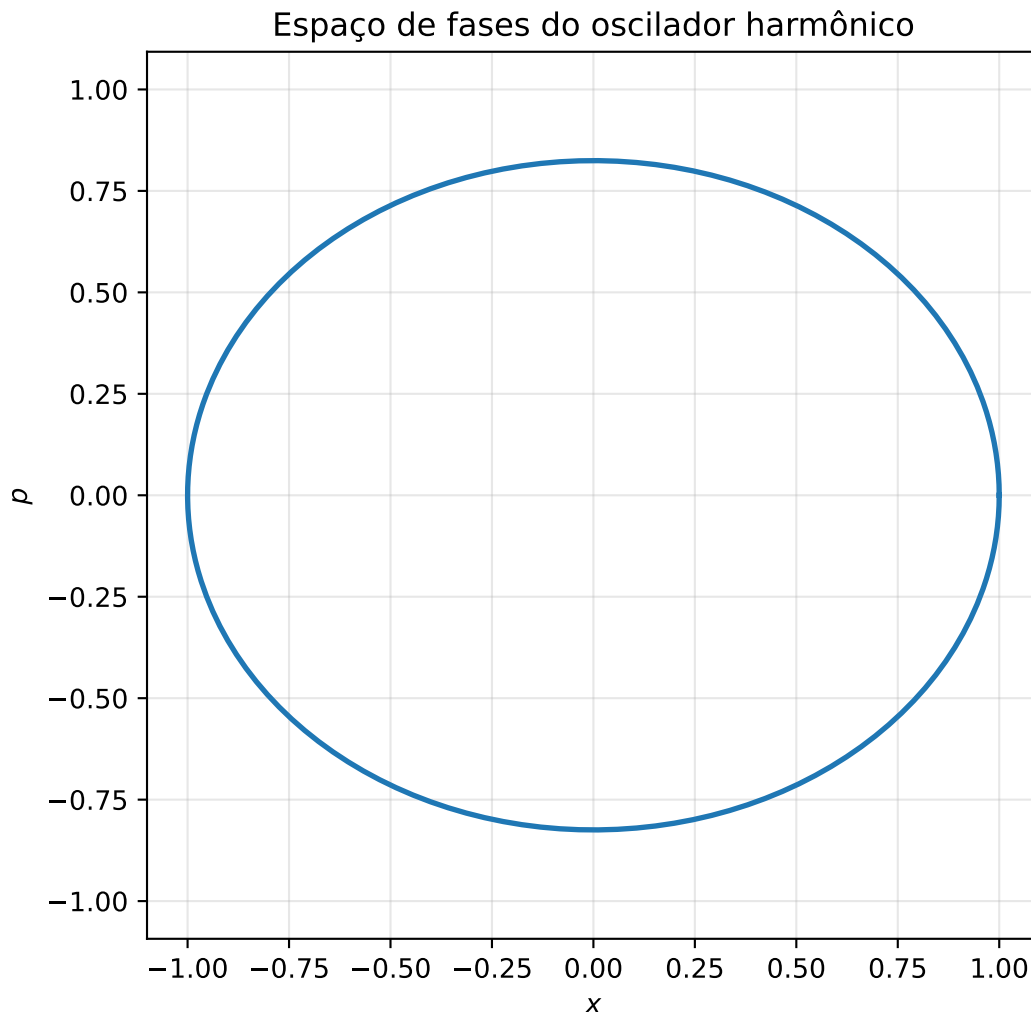


Figure 1: Evolução de uma trajetória no espaço de fases (x, p) para o oscilador harmônico.

Exercícios

1. Mostre que a segunda lei de Newton $m\ddot{x} = F(x, t)$ é equivalente à equação $\dot{p} = F(x, t)$ usando a definição de momento linear $p = m\dot{x}$.
2. Reescreva a equação $m\ddot{x} = F(x, t)$ como um sistema de primeira ordem em termos de $x(t)$ e $p(t)$ e explique por que isso pode ser útil para métodos numéricos.
3. Considere um pequeno intervalo de tempo δt . Derive a expansão de Taylor de primeira ordem para $x(t + \delta t)$ e $p(t + \delta t)$ a partir das equações de primeira ordem.
4. Uma força é dita conservativa se existe um potencial $V(x)$ tal que $F(x) = -dV/dx$. Dê dois exemplos de forças conservativas e dois exemplos de forças não conservativas.
5. Verifique que para o Hamiltoniano $H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + V(x)$, as equações de Hamilton

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x}$$

são equivalentes às equações clássicas de movimento.

6. Explique qualitativamente como a forma elíptica da trajetória no espaço de fases do oscilador harmônico reflete a conservação de energia.

Álgebra e Produto Vetorial

Em duas dimensões, a matriz

$$J = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

aparece naturalmente na formulação Hamiltoniana. Ela atua como uma rotação de 90° , e pode ser usada para construir um produto bilinear que captura a noção de área orientada:

$$\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2.$$

De forma explícita, se $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ p_1 \end{pmatrix}$ e $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ p_2 \end{pmatrix}$, então

$$\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2 = x_1 p_2 - p_1 x_2.$$

Note que, ao escrever a equação acima, estamos tratando (x, p) como coordenadas de um plano e interpretando esse determinante como uma área orientada. Essa interpretação, porém, exige certo cuidado: x e p não têm as mesmas unidades físicas nem o mesmo significado geométrico. O espaço de fase não é um espaço euclidiano comum, mas sim um espaço com estrutura própria, onde a matriz J define uma forma bilinear antissimétrica (a chamada forma simplética). Assim, falar em “área” aqui é uma analogia geométrica útil para construir intuição, mas ela só se torna rigorosa quando entendemos que o espaço (x, p) é dotado dessa estrutura simplética, que substitui o produto interno usual.

Esse determinante mede a área orientada do paralelogramo formado pelos dois vetores:

- Se o valor é zero, os vetores são linearmente dependentes, pois não formam área.
- Se é positivo ou negativo, ele indica tanto o tamanho da área quanto a orientação relativa entre $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{v}_2$.

Assim, J fornece um critério geométrico para independência linear e orientação no espaço de fase. Essa construção é análoga ao produto vetorial em três dimensões, que também mede áreas e orientações.

Conexão com os Parênteses de Poisson

A mesma estrutura aparece nas equações da mecânica Hamiltoniana. Dadas duas funções $f(x, p)$ e $g(x, p)$ no espaço de fase, seus parênteses de Poisson são definidos por

$$\{f, g\} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f}{\partial x} & \frac{\partial f}{\partial p} \end{pmatrix} J \begin{pmatrix} \frac{\partial g}{\partial x} \\ \frac{\partial g}{\partial p} \end{pmatrix}.$$

Ou seja, a mesma operação $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2$ que mede área entre vetores também mede a “independência” entre funções no espaço de fase. Essa estrutura é o coração da mecânica Hamiltoniana, e mais adiante veremos como ela se conecta às relações de comutação na mecânica quântica.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Vetores
v1 = np.array([2, 1])
v2 = np.array([1, 2])

# Matriz J
J = np.array([[0, 1], [-1, 0]])

# Área orientada
area = v1 @ J @ v2
```

```

# Plot
fig, ax = plt.subplots(figsize=(5, 5))
ax.quiver(
    0,
    0,
    v1[0],
    v1[1],
    angles="xy",
    scale_units="xy",
    scale=1,
    color="blue",
    label=r"$\vec{v}_1$",
)
ax.quiver(
    0,
    0,
    v2[0],
    v2[1],
    angles="xy",
    scale_units="xy",
    scale=1,
    color="red",
    label=r"$\vec{v}_2$",
)

# Preenche o paralelogramo
parallelogram = np.array([[0, 0], v1, v1 + v2, v2])
ax.fill(parallelogram[:, 0], parallelogram[:, 1], alpha=0.3, color="gray")

ax.set_xlim(0, 3)
ax.set_ylim(0, 3)
ax.set_aspect("equal")
ax.axhline(0, color="black", linewidth=0.5)
ax.axvline(0, color="black", linewidth=0.5)
ax.legend()
ax.set_title(rf"$\vec{v}_1^T \cdot \vec{v}_2 = \text{{area}}$")

plt.show()

```

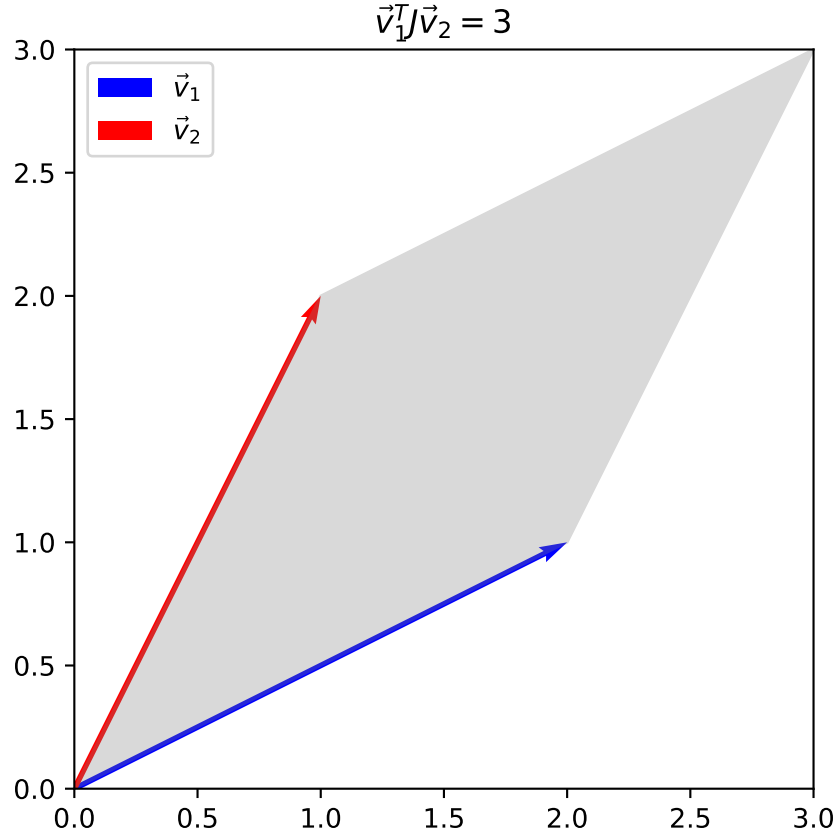


Figure 2: Área orientada gerada por dois vetores no plano de fase. O sinal de $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2$ indica a orientação.

Exercícios

1. Verifique que, para $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ p_1 \end{pmatrix}$ e $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ p_2 \end{pmatrix}$, o produto $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2$ é antissimétrico, ou seja, $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2 = -\mathbf{v}_2^T J \mathbf{v}_1$.
2. Mostre que $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2 = 0$ se e somente se os vetores $\mathbf{v}_1$ e $\mathbf{v}_2$ forem linearmente dependentes.
3. Para os vetores $\mathbf{v}_1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $\mathbf{v}_2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$, calcule $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2$ e interprete o resultado geometricamente.
4. Considere as funções $f(x, p) = x^2 p$ e $g(x, p) = x p^2$. Calcule os parênteses de Poisson f, g explicitamente.
5. Demonstre que os parênteses de Poisson satisfazem a antissimetria: $f, g = -g, f$.
6. Explique como a interpretação de “área orientada” do determinante $\mathbf{v}_1^T J \mathbf{v}_2$ se relaciona com a independência de funções no espaço de fase.

Parênteses de Poisson e Mecânica Hamiltoniana

A evolução temporal de uma função $f(x, p)$ que depende de posição e momento é obtida pela regra da cadeia:

$$\frac{d}{dt} f(x(t), p(t)) = \frac{\partial f}{\partial x} \dot{x} + \frac{\partial f}{\partial p} \dot{p}.$$

Essas funções são chamadas de observáveis físicos. Ou seja, definimos como observável qualquer quantidade que pode ser medida a partir do estado do sistema.

Substituindo as equações de Hamilton, essa expressão pode ser reescrita em termos do parêntese de Poisson:

$$\frac{d}{dt} f = \{f, H\}, \quad \text{com} \quad \{f, H\} = \frac{\partial f}{\partial x} \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p} \frac{\partial H}{\partial x}.$$

O papel gerador dos parênteses de Poisson

O parêntese de Poisson não é apenas uma notação conveniente: ele descreve como um observável gera transformações em outro.

- O Hamiltoniano H gera a evolução temporal:

$$\frac{d}{dt} = \{\cdot, H\}.$$

- O momento p gera translações em x :

$$\{x, p\} = 1 \quad \Rightarrow \quad \delta x = \epsilon \{x, p\} = \epsilon.$$

- A posição x gera translações em p :

$$\{p, x\} = -1 \quad \Rightarrow \quad \delta p = \epsilon \{p, x\} = -\epsilon.$$

Assim, podemos pensar nos observáveis como “geradores de transformações” uns sobre os outros. Essa é uma das ideias centrais da mecânica Hamiltoniana e antecipa a estrutura da mecânica quântica, onde os observáveis passam a gerar transformações via comutadores.

Conservação da energia

Quando o Hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, ele mesmo é um integral de movimento. Isso fica claro porque

$$\frac{dH}{dt} = \{H, H\} = 0.$$

Portanto, a energia é sempre conservada. Lembrando que isso é verdade pois consideramos H como uma função de x e p e não de t .

Estrutura algébrica

Os parênteses de Poisson satisfazem ainda a identidade de Jacobi, que garante a consistência da álgebra:

$$\{\{A, B\}, C\} + \{\{C, A\}, B\} + \{\{B, C\}, A\} = 0.$$

onde A , B e C são funções de x e p . Essa propriedade assegura que os observáveis formam uma estrutura matemática bem definida (uma álgebra de Lie), algo que será fundamental ao fazer a transição para a mecânica quântica.

Campo de Hamilton

A ideia central da mecânica Hamiltoniana consiste em estudar o fluxo no espaço de fase gerado pela evolução temporal do Hamiltoniano. A figura abaixo ilustra o fluxo gerado pelo Hamiltoniano do oscilador harmônico. Os vetores indicam a direção da evolução temporal:

$$\mathbf{V} = J \begin{pmatrix} \frac{\partial H}{\partial x} \\ \frac{\partial H}{\partial p} \end{pmatrix}$$

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Parâmetros
m, k = 1.0, 1.0
x = np.linspace(-2.5, 2.5, 30)
```

```

p = np.linspace(-2.5, 2.5, 30)
X, P = np.meshgrid(x, p)

# Equações de Hamilton
dxdt = P / m
dpdt = -k * X

# Energia (curvas de nível)
H = P**2 / (2 * m) + 0.5 * k * X**2

plt.figure(figsize=(7, 6))
# Curvas de nível de energia
contours = plt.contour(X, P, H, levels=6, colors="gray", linewidths=1)
plt.clabel(contours, inline=True, fontsize=8, fmt="E=%.1f")

# Campo vetorial (fluxo de Hamilton)
plt.quiver(X, P, dxdt, dpdt, color="blue", alpha=0.6)

plt.xlabel("x (posição)")
plt.ylabel("p (momento)")
plt.title("Fluxo Hamiltoniano no Espaço de Fase")
plt.grid(alpha=0.3)
plt.axhline(0, color="black", linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color="black", linewidth=0.5)
plt.show()

```

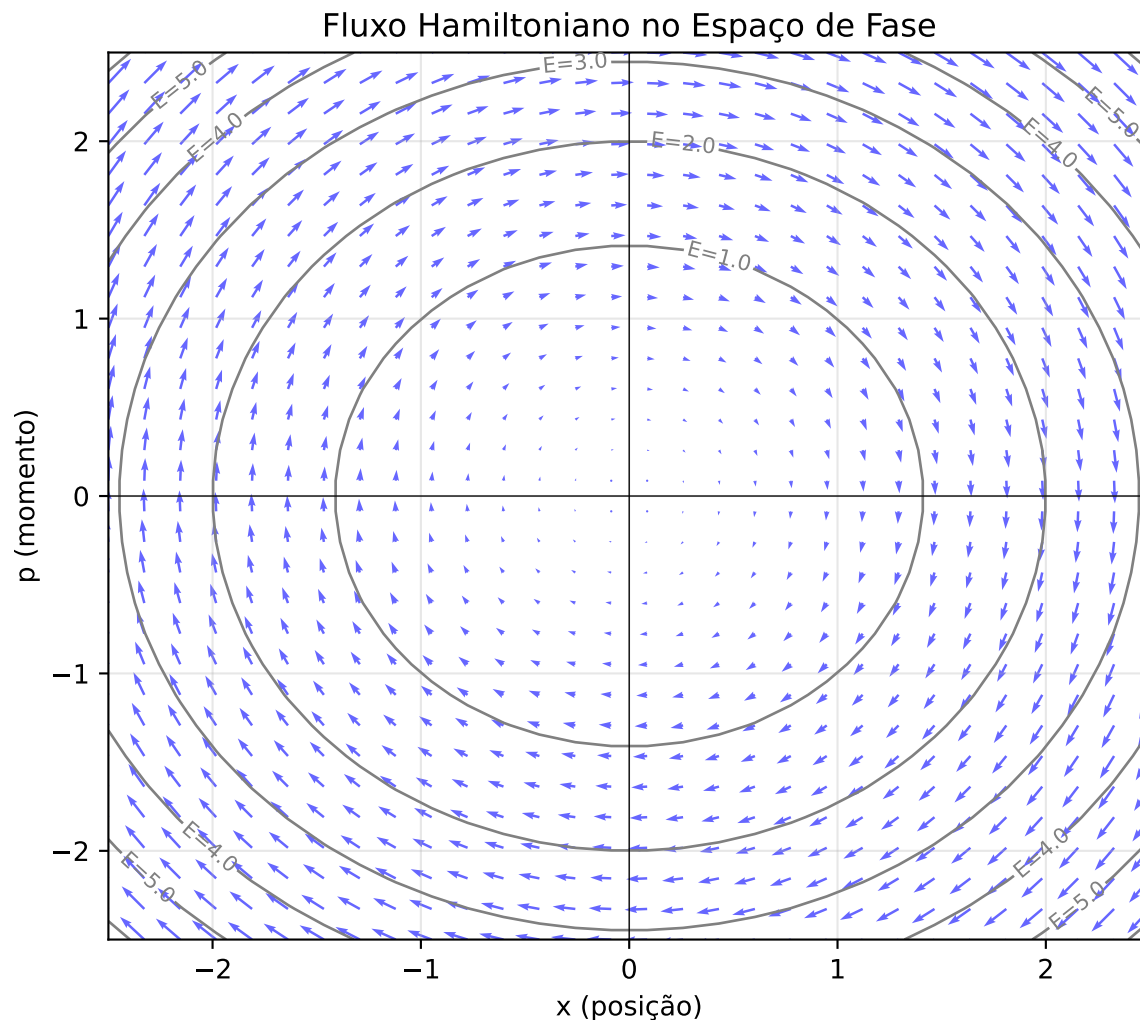



Figure 3: Fluxo no espaço de fase gerado pelo Hamiltoniano do oscilador harmônico. As curvas representam níveis de energia constante e os vetores indicam a direção da evolução temporal.

Note que as curvas de nível de energia, como mostrado na Figure 3, sinalizam os níveis de energia, enquanto o campo vetorial ilustra o fluxo no espaço de fase. As curvas de nível coincidem com as trajetórias clássicas. Essa visualização reforça a interpretação de que o Hamiltoniano atua como gerador de transformações temporais: ao calcular $\dot{f} = \{f, H\}$, vemos que o parêntese de Poisson com H fornece a regra de evolução de qualquer observável no tempo.

Exercícios

1. Mostre que a regra da cadeia aplicada a uma função $f(x(t), p(t))$ leva a $\dot{f} = \{f, H\}$ usando as equações de Hamilton.
2. Verifique explicitamente que $\{x, p\} = 1$ e $\{p, x\} = -1$, e explique o significado físico dessas relações.
3. Considere o Hamiltoniano $H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2$. Calcule $\dot{x}$ e $\dot{p}$ usando parênteses de Poisson e confirme que obtém as equações de movimento do oscilador harmônico.
4. Mostre que se H não depende explicitamente do tempo, então $\dot{H} = 0$, garantindo a conservação da energia.
5. Para três funções $A = x$, $B = p$, $C = H$, verifique a identidade de Jacobi:

$$\{\{A, B\}, C\} + \{\{C, A\}, B\} + \{\{B, C\}, A\} = 0.$$

6. Explique qualitativamente como o fluxo Hamiltoniano no espaço de fase, representado por $\mathbf{V} = J \left(\frac{\partial H}{\partial x}, \frac{\partial H}{\partial p} \right)$, garante que as curvas de nível de energia sejam percorridas pelas trajetórias clássicas.

Quantização

O formalismo da mecânica quântica é construído promovendo as variáveis clássicas a operadores lineares sobre funções de onda. A regra de correspondência fundamental, inspirada pelos parênteses de Poisson, é:

$$[x, p] = i\hbar\{x, p\}.$$

No caso canônico, isso leva à relação de comutação:

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar,$$

onde $[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$. Essa relação não apenas substitui a noção de variável clássica por operador, mas também codifica a estrutura de incerteza da mecânica quântica.

Note que, em uma álgebra não comutativa, o produto de dois operadores $\hat{A}$ e $\hat{B}$ pode sempre ser decomposto em uma parte simétrica e uma parte antissimétrica:

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2}.$$

- O primeiro termo, $\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}$, é o anti-comutador, definido como

$$\{\hat{A}, \hat{B}\} \equiv \hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A},$$

e representa a parte simétrica do produto. Para operadores hermitianos, essa parte é real quando calculada em um estado.

- O segundo termo, $\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, é o comutador, definido como

$$[\hat{A}, \hat{B}] \equiv \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A},$$

e representa a parte antissimétrica do produto. Para operadores hermitianos, essa parte é puramente imaginária quando calculada em um estado.

Essa decomposição é útil para entender a desigualdade de Heisenberg: a parte imaginária (comutador) determina o limite fundamental de incerteza, enquanto a parte real (anti-comutador) pode aumentar o módulo do produto, mas não reduz o limite mínimo.

Não confunda com a notação do parêntese de Poisson, que é usado na mecânica clássica; o contexto normalmente indica se estamos tratando de comutadores quânticos ou parênteses de Poisson.

Representação de posição

Na representação em que usamos funções de onda $\psi(x)$, os operadores agem como:

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(x).$$

Aqui, $\hat{x}$ atua multiplicando pela coordenada, enquanto $\hat{p}$ se torna um **operador diferencial**. Essa escolha garante que a relação de comutação seja satisfeita e que a evolução quântica tenha a mesma estrutura de transformação que vimos na mecânica clássica via parênteses de Poisson.

Operadores como geradores de transformações

Um dos conceitos centrais da mecânica quântica, herdado da mecânica Hamiltoniana, é que cada observável pode ser visto como um gerador de transformações.

- Na mecânica clássica, vimos que o Hamiltoniano H gera a evolução temporal através do parêntese de Poisson: $\dot{f} = \{f, H\}$.
- Em mecânica quântica, essa ideia é promovida para operadores: um operador $\hat{A}$ gera uma transformação unitária sobre estados $|\psi\rangle$ via o operador exponencial $e^{-i\epsilon\hat{A}/\hbar}$.
- Por exemplo, o momento $\hat{p}$ gera translações em posição, enquanto a posição $\hat{x}$ gera translações em momento, refletindo a mesma estrutura observável $\rightarrow$ transformação que vimos no espaço de fase clássico.

Essa interpretação é crucial, porque mostra que os operadores não são apenas “valores para medir”, mas agentes de transformação dentro do espaço de Hilbert (que é o espaço de funções de onda). Ela estabelece a ponte para o formalismo estatístico e para a evolução temporal, e é uma das ideias centrais para entender por que a mecânica quântica difere da clássica.

- Cada operador representa um observável físico, como posição ou momento.
- O comutador $[\hat{x}, \hat{p}]$ mostra que não podemos medir x e p simultaneamente com precisão arbitrária.
- A ação de um operador sobre a função de onda determina a distribuição de valores possíveis de um observável.

Essas definições estabelecem a base da mecânica quântica e preparam o terreno para introduzir **conceitos estatísticos**, como valor esperado, variância e, mais adiante, o princípio da incerteza de Heisenberg.

Exercícios

1. Mostre que a decomposição de um produto de operadores

$$\hat{A}\hat{B} = \frac{\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A}}{2} + \frac{\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}}{2}$$

é sempre válida, identificando explicitamente o anti-comutador e o comutador.

2. Verifique que, na representação de posição, os operadores

$$\hat{x}\psi(x) = x\psi(x), \quad \hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\psi(x)$$

satisfazem a relação de comutação $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.

Valor Esperado e Probabilidade

Na mecânica quântica, o valor de uma grandeza não é determinístico, mas probabilístico. Para entender isso, recordamos primeiro o caso clássico de variáveis aleatórias.

Exemplo discreto: dado de seis lados

O valor esperado de uma variável discreta é uma média ponderada pelas probabilidades:

$$\langle m \rangle = \sum_{i=1}^6 m_i P_i,$$

onde m_i são os valores possíveis (1, 2, ..., 6) e P_i é a probabilidade de cada valor. Para um dado justo, $P_i = 1/6$, então:

$$\langle m \rangle = \frac{1 + 2 + 3 + 4 + 5 + 6}{6} = 3.5.$$

Exemplo contínuo: medindo a posição

Para um sistema contínuo, como a posição de uma partícula confinada em um intervalo $[a, b]$, podemos dividir o intervalo em N “caixas” de comprimento $\Delta x = (b - a)/N$. A posição média pode ser escrita como soma ponderada:

$$\langle x \rangle \approx \sum_{i=1}^N x_i P(x_i) \Delta x,$$

onde $P(x_i)$ é a probabilidade de encontrar a partícula na caixa i . No limite $N \rightarrow \infty$ (ou $\Delta x \rightarrow 0$), isso se transforma na integral usual:

$$\langle x \rangle = \int_a^b x P(x) dx.$$

Para a distribuição uniforme $P(x) = 1/(b - a)$, temos:

$$\langle x \rangle = \frac{1}{b - a} \int_a^b x dx = \frac{a + b}{2}.$$

Esse exemplo mostra claramente a **transição do discreto para o contínuo**, que é exatamente o que ocorre ao medir observáveis em mecânica quântica: valores possíveis discretos ou contínuos, mas sempre ponderados por uma probabilidade derivada da função de onda.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Intervalo e distribuição
a, b = 0, 1
N = 5 # número de caixas discretas
x_discrete = np.linspace(a + (b-a)/(2*N), b - (b-a)/(2*N), N)
dx = (b-a)/N
P_discrete = np.full(N, 1/(b-a))

# Valores esperados
expected_discrete = np.sum(x_discrete * P_discrete * dx)
x_cont = np.linspace(a, b, 1000)
P_cont = np.ones_like(x_cont)/(b-a)

plt.figure(figsize=(8,5))
# Barras discretas
plt.bar(x_discrete, P_discrete, width=dx, alpha=0.4, color='orange', label='Soma discreta')
# Linha contínua
plt.plot(x_cont, P_cont, 'b-', linewidth=2, label='Densidade contínua')
# Valor esperado
plt.axvline(expected_discrete, color='r', linestyle='--', label=f'Valor esperado {expected_discrete:.2f}')

plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Probabilidade")
plt.title("Valor esperado: discreto vs contínuo")
plt.legend()
plt.grid(alpha=0.3)
plt.show()
```

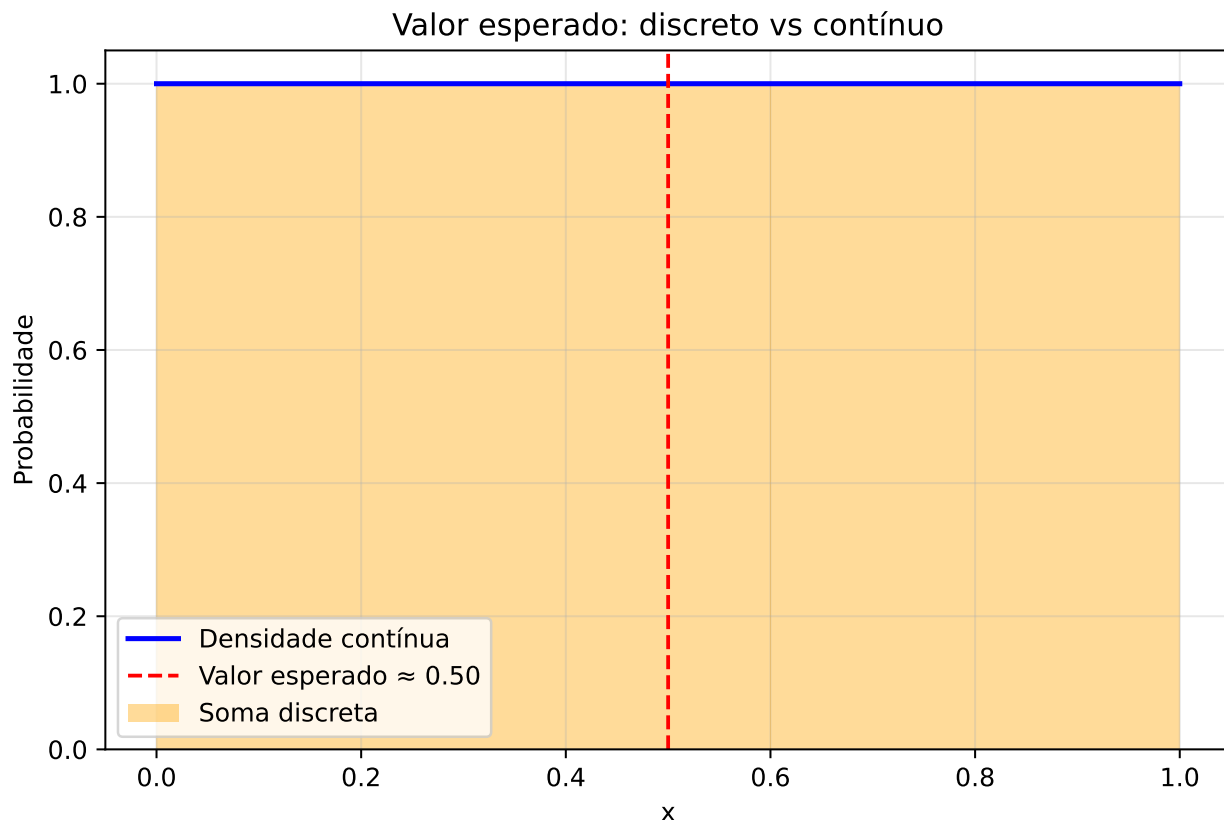


Figure 4: Ilustração do valor esperado: barras representam a soma discreta das probabilidades em caixas, enquanto a linha azul mostra a função de densidade contínua.

Na figura, as barras laranjas representam a soma discreta das probabilidades em caixas de mesmo tamanho, enquanto a linha azul mostra a densidade contínua correspondente. À medida que aumentamos o número de caixas, a soma discreta se aproxima da integral contínua, ilustrando o limite $x \rightarrow 0$. O valor esperado, indicado pela linha vermelha tracejada, é a média ponderada pela probabilidade, seja na forma discreta ou contínua. Esse conceito é diretamente aplicável à mecânica quântica, onde a função de onda fornece a densidade de probabilidade e o valor esperado de um observável é obtido como integral ponderada.

Exercícios

1. Calcule o valor esperado de um dado justo de seis lados e de um dado viciado, onde $P_6 = 1/2$ e os outros cinco lados têm probabilidades iguais.
2. Divida o intervalo $[0, 2]$ em $N = 4$ caixas e considere uma distribuição de probabilidade $P(x_i) = x_i / (\sum_j x_j)$. Calcule o valor esperado $\langle x \rangle$ usando a soma discreta e compare com o limite contínuo.
3. Demonstre que, para uma distribuição uniforme em $[a, b]$, o valor esperado é $\langle x \rangle = (a + b)/2$.

Variância e Desvio Padrão

Além do valor esperado, é importante caracterizar a dispersão dos valores possíveis de uma variável aleatória. Uma medida natural é a variância, definida como

$$\text{Var}(x) \equiv \langle (x - \mu)^2 \rangle,$$

onde $\mu = \langle x \rangle$ é o valor esperado. Essa definição garante que:

1. A variância é sempre positiva ou zero.

2. Medidas como $\langle |x - \mu| \rangle$ também existem, mas $(x - \mu)^2$ tem propriedades matemáticas convenientes, como ser aditiva para variáveis independentes.

Expandindo o quadrado, obtemos:

$$\text{Var}(x) = \langle x^2 - 2\mu x + \mu^2 \rangle = \langle x^2 \rangle - 2\mu \langle x \rangle + \mu^2 = \langle x^2 \rangle - \mu^2.$$

Exemplo: distribuição uniforme em $[a, b]$

Para uma distribuição uniforme, $P(x) = 1/(b - a)$. O valor esperado é

$$\mu = \langle x \rangle = \int_a^b x P(x) dx = \frac{1}{b - a} \int_a^b x dx = \frac{a + b}{2}.$$

O segundo momento é

$$\langle x^2 \rangle = \int_a^b x^2 P(x) dx = \frac{1}{b - a} \int_a^b x^2 dx = \frac{b^3 - a^3}{3(b - a)} = \frac{a^2 + ab + b^2}{3}.$$

Portanto, a variância é

$$\text{Var}(x) = \langle x^2 \rangle - \mu^2 = \frac{a^2 + ab + b^2}{3} - \left(\frac{a + b}{2} \right)^2 = \frac{(b - a)^2}{12}.$$

O desvio padrão é a raiz quadrada da variância:

$$\sigma = \sqrt{\text{Var}(x)} = \frac{b - a}{2\sqrt{3}}.$$

Caso particular: $[0, 1]$

Substituindo $a = 0$ e $b = 1$:

$$\mu = \frac{0 + 1}{2} = \frac{1}{2}, \quad \text{Var}(x) = \frac{(1 - 0)^2}{12} = \frac{1}{12}, \quad \sigma = \frac{1}{2\sqrt{3}} \approx 0.2887.$$

Essa forma mostra que a dispersão é invariante sob deslocamentos lineares e que o desvio padrão fornece uma medida intuitiva do “tamanho típico do desvio” em torno da média.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Intervalo da distribuição uniforme
a, b = 0, 1
mu = (a + b) / 2
sigma = (b - a) / (2 * np.sqrt(3))

# Função de densidade
x = np.linspace(-0.1, 1.1, 500)
P = np.where((x >= a) & (x <= b), 1 / (b - a), 0)

plt.figure(figsize=(8, 5))
plt.plot(x, P, "b-", lw=2, label="Densidade uniforme")
# Média
plt.axvline(mu, color="r", linestyle="--", label=rf"Média $\mu$={mu:.2f}$")
# Região $\pm\sigma$
plt.fill_between(
```

```

x,
0,
P,
where=((x >= mu - sigma) & (x <= mu + sigma)),
color="green",
alpha=0.3,
label=rf"$\pm\sigma \approx$ {sigma:.2f}",
)

plt.xlabel("x")
plt.ylabel("Probabilidade")
plt.title("Variância e Desvio Padrão da Distribuição Uniforme [0,1]")
plt.legend()
plt.grid(alpha=0.3)
plt.show()

```

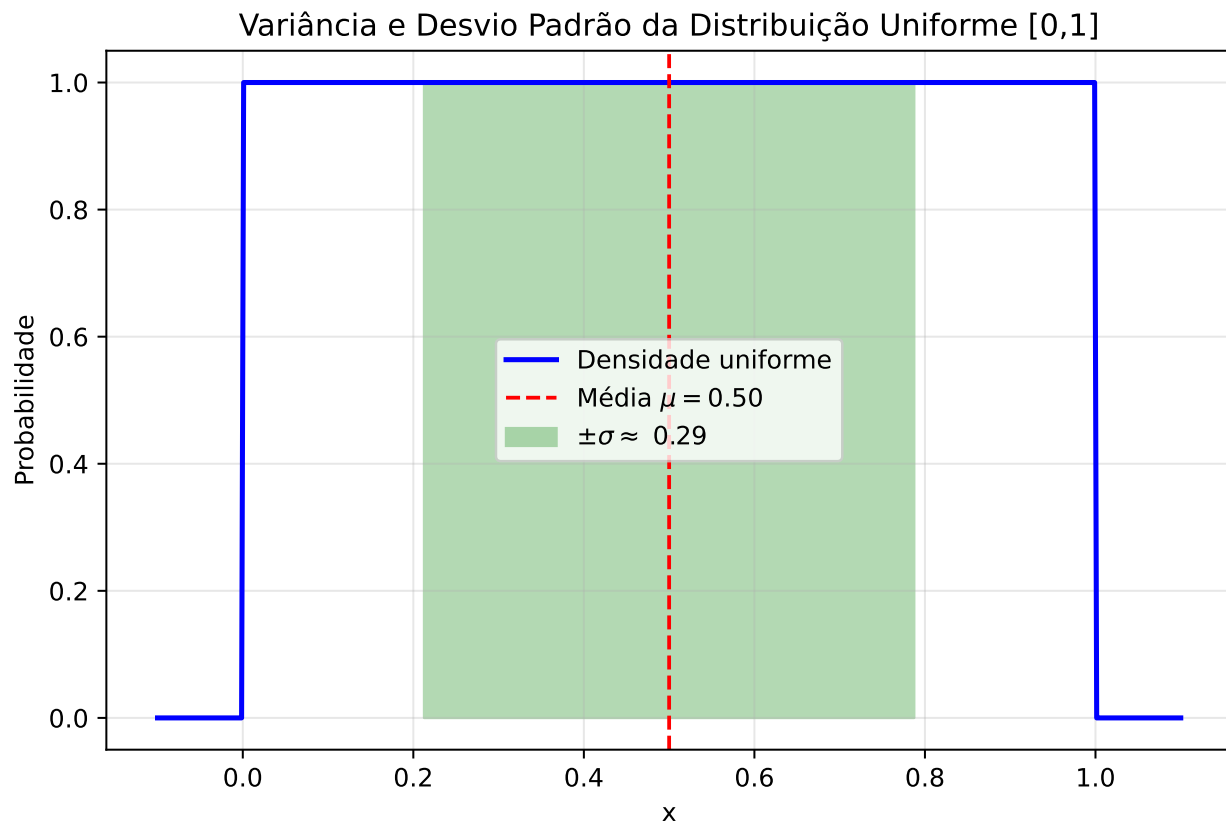


Figure 5: Distribuição uniforme em $[0,1]$ mostrando média (linha vermelha) e região $\pm\sigma$ (sombras verdes).

A linha vermelha indica a média da distribuição uniforme, enquanto a região sombreada verde mostra o intervalo $\pm\sigma$ em torno da média. Mesmo que todos os valores tenham a mesma probabilidade, essa região fornece uma medida típica da dispersão dos valores possíveis.

Exercícios

1. Mostre que, para qualquer distribuição, $\text{Var}(x) = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2$.
2. Calcule a variância e o desvio padrão de uma distribuição uniforme no intervalo $[2, 5]$.

3. Para uma variável discreta com valores $x_i = 1, 2, 3, 4$ e probabilidades $P_i = 1/10, 2/10, 3/10, 4/10$, calcule o valor esperado, a variância e o desvio padrão.
4. Demonstre que a variância é sempre não negativa e explique por que isso é consistente com a definição de dispersão.
5. Explique qualitativamente como o desvio padrão fornece uma medida típica do “tamanho do desvio” dos valores em torno da média, usando o exemplo da distribuição uniforme em $[0, 1]$.

Desigualdade de Cauchy-Schwarz

A desigualdade de Cauchy-Schwarz é uma ferramenta fundamental em álgebra linear e mecânica quântica. Ela estabelece que, para quaisquer vetores $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ em um espaço vetorial com produto interno, temos:

$$|\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle|^2 \leq \langle \mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle \langle \mathbf{v}, \mathbf{v} \rangle,$$

ou equivalentemente,

$$|\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle| \leq |\mathbf{u}| |\mathbf{v}|.$$

Interpretação geométrica em $\mathbb{R}^2$

Para vetores em $\mathbb{R}^2$, o produto interno é o produto escalar usual $\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = u_1 v_1 + u_2 v_2$. A desigualdade garante que o quadrado do produto escalar nunca é maior que o produto dos quadrados das normas:

$$(u_1 v_1 + u_2 v_2)^2 \leq (u_1^2 + u_2^2)(v_1^2 + v_2^2).$$

Geometricamente, isso significa que o cosseno do ângulo entre os vetores sempre está entre -1 e 1:

$$\cos \theta = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{|\mathbf{u}| |\mathbf{v}|}.$$

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Vetores u e v
u = np.array([2, 1])
v = np.array([1, 2])

# Origem
origin = np.array([0, 0])

plt.figure(figsize=(6, 6))
plt.quiver(
    *origin, u[0], u[1], color="blue", scale=1, scale_units="xy", angles="xy", label="u"
)
plt.quiver(
    *origin,
    v[0],
    v[1],
    color="orange",
    scale=1,
    scale_units="xy",
    angles="xy",
    label="v",
)

# Ângulo
theta = np.arccos(np.dot(u, v) / (np.linalg.norm(u) * np.linalg.norm(v)))
```



```
plt.text(0.3, 0.3, rf"$\theta \approx {np.degrees(theta):.1f}^\circ$", fontsize=12, color="purple")
plt.xlim(-0.5, 3)
plt.ylim(-0.5, 3)
plt.gca().set_aspect("equal", adjustable="box")
plt.grid(True, alpha=0.3)
plt.xlabel("x")
plt.ylabel("y")
plt.title("Desigualdade de Cauchy-Schwarz em  $\mathbb{R}^2$ ")
plt.legend()
plt.show()
```

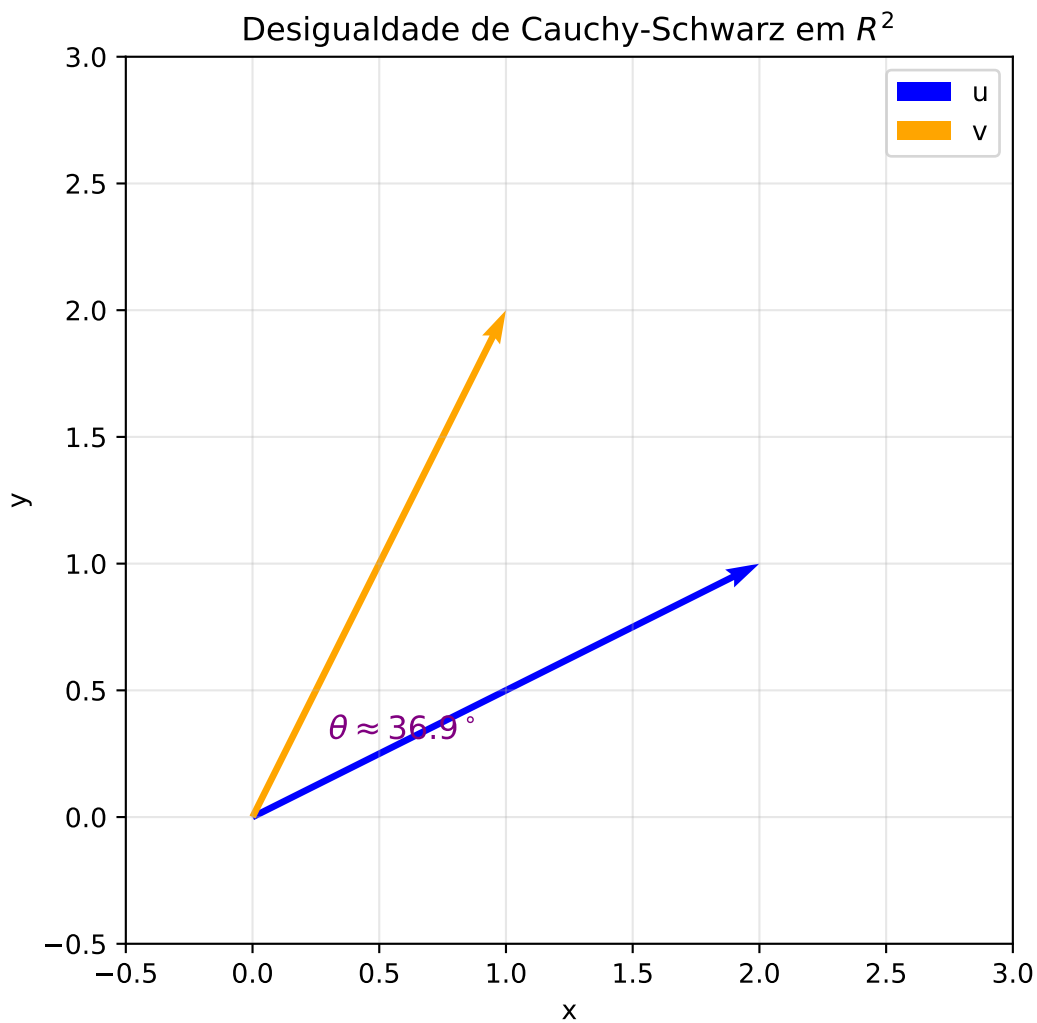


Figure 6: Ilustração geométrica da desigualdade de Cauchy-Schwarz em $\mathbb{R}^2$. O ângulo θ entre u e v está relacionado ao produto interno e às normas dos vetores.

Generalização

A desigualdade de Cauchy-Schwarz vale **em qualquer espaço vetorial com produto interno**, inclusive o espaço de Hilbert da mecânica quântica. Para vetores $|\psi\rangle$ e $|\phi\rangle$:

$$|\langle\psi|\phi\rangle|^2 \leq \langle\psi|\psi\rangle \langle\phi|\phi\rangle.$$

Essa propriedade é fundamental para provar o princípio da incerteza e para várias outras desigualdades envolvendo valores esperados de operadores.

Exercícios

1. Verifique a desigualdade de Cauchy-Schwarz para os vetores $\mathbf{u} = (3, 1)$ e $\mathbf{v} = (1, 2)$ em $\mathbb{R}^2$.
2. Para vetores $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathbb{R}^3$, mostre que

$$|\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}| \leq |\mathbf{u}| |\mathbf{v}|$$

usando a definição do produto interno e das normas.

3. Prove que a igualdade em Cauchy-Schwarz ocorre se e somente se $\mathbf{u}$ e $\mathbf{v}$ são linearmente dependentes.

Princípio da Incerteza

Na mecânica quântica, os valores de posição ($\hat{x}$) e momento ($\hat{p}$) não podem ser determinados simultaneamente com precisão arbitrária. Isso decorre da estrutura dos operadores quânticos e não de limitações experimentais.

O valor esperado de uma observável $\hat{A}$ em um estado $|\psi\rangle$ é:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle,$$

e a variância, que mede a dispersão em torno do valor médio, é:

$$\sigma_A^2 = \langle (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle \psi | (\hat{A} - \langle A \rangle)^2 | \psi \rangle.$$

Definimos os estados deslocados para posição e momento:

$$|f\rangle = (\hat{x} - \langle x \rangle) |\psi\rangle, \quad |g\rangle = (\hat{p} - \langle p \rangle) |\psi\rangle,$$

com

$$\sigma_x^2 = \langle f | f \rangle, \quad \sigma_p^2 = \langle g | g \rangle.$$

Aplicando a desigualdade de Cauchy-Schwarz:

$$\langle f | f \rangle, \langle g | g \rangle \geq |\langle f | g \rangle|^2 \implies \sigma_x^2 \sigma_p^2 \geq |\langle f | g \rangle|^2.$$

O produto $\langle f | g \rangle$ pode ser decomposto em comutador e anti-comutador:

$$\langle f | g \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \hat{x} - \langle x \rangle, \hat{p} - \langle p \rangle \} | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | [\hat{x} - \langle x \rangle, \hat{p} - \langle p \rangle] | \psi \rangle,$$

onde $\cdot, \cdot$ é o anti-comutador e $[\cdot, \cdot]$ é o comutador.

- O anti-comutador é hermitiano e, portanto, produz um número real.
- O comutador é anti-hermitiano e, portanto, produz um número imaginário puro.

Se considerarmos apenas a contribuição do comutador, que fornece o limite fundamental, temos:

$$|\langle f | g \rangle|^2 \geq \left| \frac{1}{2} \langle [\hat{x}, \hat{p}] \rangle \right|^2 = \frac{\hbar^2}{4},$$

o que leva à forma usual da desigualdade de Heisenberg:

$$\sigma_x, \sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

A interpretação é clara: quanto mais preciso conhecemos a posição (σ_x pequeno), menos preciso é o momento (σ_p grande), e vice-versa. O termo do anti-comutador pode aumentar a desigualdade, mas não diminui o limite fundamental estabelecido pelo comutador.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Valores ilustrativos
anticom_real = 0.3 # Parte real (anti-comutador)
comm_imag = 0.5 # Parte imaginária (comutador,  $\hbar/2$ )

plt.figure(figsize=(6, 6))
plt.axhline(0, color="black", linewidth=0.5)
plt.axvline(0, color="black", linewidth=0.5)

# Plotando o vetor  $f|g$ 
plt.quiver(
    0,
    0,
    anticom_real,
    comm_imag,
    angles="xy",
    scale_units="xy",
    scale=1,
    color="purple",
    label="  $f|g$  ",
)

# Componentes real e imaginária
plt.plot([0, anticom_real], [0, 0], "r--", label="Parte real (anti-comutador)")
plt.plot(
    [anticom_real, anticom_real],
    [0, comm_imag],
    "b--",
    label="Parte imaginária (comutador)",
)

plt.xlim(-0.1, 0.6)
plt.ylim(-0.1, 0.6)
plt.xlabel("Parte real")
plt.ylabel("Parte imaginária")
plt.title("Visualização de  $f|g$  no plano complexo")
plt.grid(True, alpha=0.3)
plt.legend()
plt.gca().set_aspect("equal", adjustable="box")
plt.show()
```

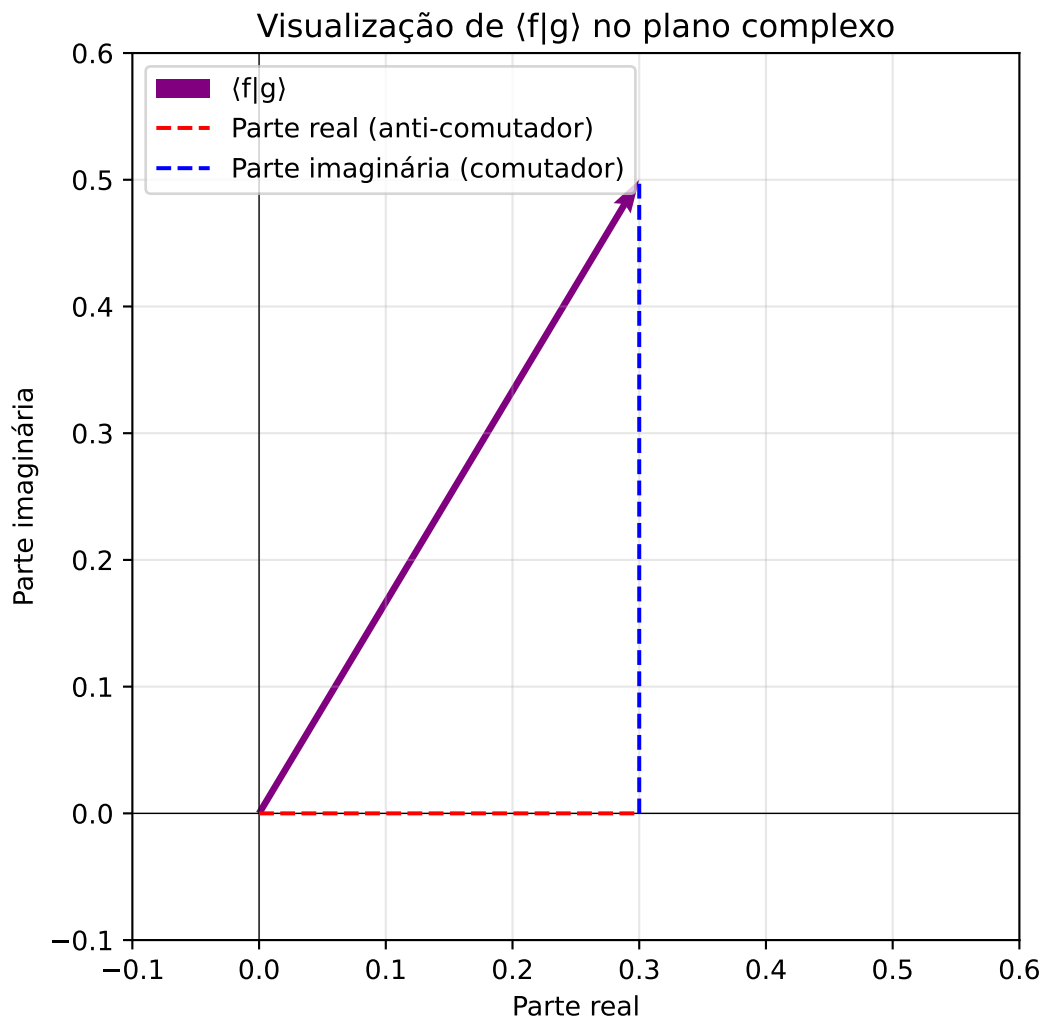


Figure 7: Representação de $\langle f|g \rangle$ no plano complexo. A parte real (anti-comutador) e a parte imaginária (comutador) ilustram a origem da desigualdade de Heisenberg.

- O vetor roxo representa $\langle f|g \rangle$ como um número complexo.
- A parte real (vermelha tracejada) corresponde ao anti-comutador, que pode variar dependendo do estado, mas não determina o limite fundamental.
- A parte imaginária (azul tracejada) corresponde ao comutador, que define o limite mínimo ($\hbar/2$) da desigualdade de Heisenberg. Note que essa parte está sempre presente, independentemente do estado.

Exercícios

1. Para operadores hermitianos $\hat{A}$ e $\hat{B}$ quaisquer, defina

$$|f\rangle = (\hat{A} - \langle A \rangle)|\psi\rangle, \quad |g\rangle = (\hat{B} - \langle B \rangle)|\psi\rangle.$$

Mostre que a desigualdade de Cauchy-Schwarz leva a

$$\sigma_A^2 \sigma_B^2 \geq |\langle f|g \rangle|^2.$$

2. Explique por que o anti-comutador não diminui o limite mínimo da desigualdade de Heisenberg.