Bases ortonormales discretas. Componentes de una función de onda.

Uno de los elementos más importantes dentro de los espacios vectoriales es el concepto de base y, al igual que para el espacio ordinario, vamos a definir el concepto de base en nuestros espacios de Hilbert. En primer lugar, vamos a considerar un conjunto numerable de funciones que las etiquetaremos mediante un índice real discreto i (por ejemplo, $i = 1, 2, \ldots, n, \ldots$):

$$u_1(\mathbf{r}), u_2(\mathbf{r}), \ldots u_n(\mathbf{r}), \ldots$$

Diremos que este conjunto de funciones $\{u_i(x)\}$ es un conjunto ortonormal si se verifica la siguiente condición:

$$u_i \bullet u_j = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_i^*(x)\, u_j(x) = \delta_{ij}$$

Por otro lado, diremos que el conjunto de funciones $\{u_i(x)\}$ constituye una base si cualquier función $\psi(x)$ se puede escribir de forma única como una combinación lineal de las funciones $u_i(x)$:

$$\psi(x) = \sum_i c_i u_i(x)$$

es decir, que sólo existe un conjunto de coeficientes c_i de modo que se verifique la ecuación anterior. Los coeficientes c_i se denominan las componentes, o la representación, de $\psi(x)$ en la base $\{u_i(x)\}$. Ya nos podemos hacer una idea del significado de la palabra "representación" cuando hablamos de función de onda en la representación coordenadas o función de onda en la representación de momentos.

Vamos a ver cómo se pueden obtener las componentes de una función de onda $\psi(x)$. En la última ecuación el índice i es una variable muda (estamos sumando sobre ella) y podemos cambiarla sin ningún problema por j:

$$\psi(x) = \sum_j c_j u_j(x)$$

Si multiplicamos ambos miembros por $u_i^*(x)$ e integramos en x nos queda:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_i^*(x)\, \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_i^*(x) \sum_j c_j u_j(x) = \sum_j c_j \int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_i^*(x)\, u_j(x) = \sum_j c_j \delta_{ij} = c_i$$

Por tanto:

$$c_i = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_i^*(x)\ \ \psi(x) = u_i \bullet \psi$$

Es decir, que los coeficientes c_i no son otra cosa que los productos escalares de las funciones $u_i(x)$ por nuestra función. Este resultado era de esperar ya que es lo mismo que ocurre en el espacio ordinario. Si tenemos la base de vectores $\{\vec{e}_i\}$, con $i = 1, 2, 3$, cualquier vector $\vec{v}$ se puede escribir como combinación lineal de los vectores $\{\vec{e}_i\}$:

$$\vec{v} = v_1\vec{e}_1 + v_2\vec{e}_2 + v_3\vec{e}_3 = \sum_i v_i \vec{e}_i$$

Las componentes v_i del vector $\vec{v}$ en la base $\{\vec{e}_i\}$ valen:

$$v_1 = \vec{e}_1 \cdot \vec{v}, \quad v_2 = \vec{e}_2 \cdot \vec{v}, \quad v_3 = \vec{e}_3 \cdot \vec{v}$$

o, en general, $v_i = \vec{e}_i \cdot \vec{v}$, exáctamente igual que en las bases que hemos definido en el espacio de Hilbert.

Los coeficientes c_i se dice que son las componentes o la representación de la función $\psi(x)$ en la base $\{u_i(x)\}$ porque permiten hacer los mismos cálculos que con la propia función. Como ejemplo vamos a ver cómo calcular un producto escalar utilizando las componentes. Supongamos que tenemos otra función $\varphi(x)$ cuyas componentes en la base $\{u_i(x)\}$ valen b_i, de modo que:

$$\varphi(x) = \sum_i b_i u_i(x)$$

Podemos calcular el producto escalar $\varphi \bullet \psi$ de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \varphi \bullet \psi &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \varphi^*(x)\ \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \sum_i b_i^* u_i^*(x) \sum_j c_j u_j(x) = \\ &= \sum_{i,j} b_i^* c_j \int_{-\infty}^{\infty} dx\ u_i^*(x)\, u_j(x) = \sum_{i,j} b_i^* c_j\ \delta_{ij} = \sum_i b_i^* c_i \end{aligned}$$

Por tanto, es equivalente trabajar con las funciones $\varphi(x)$ y $\psi(x)$ que trabajar con sus componentes en una determinada base. De la misma forma se puede actuar con un operador utilizando las componentes, para lo cual se definen los elementos de matriz de un operador en la base. Pero eso lo dejaremos para más adelante cuando introduzcamos la notación de Dirac.

Un ejemplo de base ortonormal discreta es el conjunto de funciones formado por las autofunciones del hamiltoniano de una partícula que se mueve en un pozo infinito de potencial entre $x = 0$ y $x = a$. Este conjunto es de la forma $\{\varphi_n(x)\}$, con $n = 1, 2, 3, \cdots$ y donde:

$$\varphi_n(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ \sqrt{\frac{2}{a}} \sin(n\pi x/a) & \text{para } 0 \leq x \leq a \\ 0 & \text{para } x > a \end{cases}$$

Cualquier función de onda $\psi(x)$ que sea distinta de cero únicamente en el intervalo $x \in (0, a)$ se puede escribir de la forma:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \varphi_n(x)$$

donde los coeficientes c_n valen:

$$c_n = \varphi_n \bullet \psi = \int_0^a \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(n\pi \frac{x}{a}\right)\ \psi(x)\ dx$$

La serie anterior no es sino el desarrollo en serie de Fourier de la función $\psi(x)$.

Bases ortonormales continuas. Representaciones de momentos y coordenadas.

Los espacios de Hilbert nos ofrecen un tipo de bases que no tienen lugar en los espacios vectoriales de dimensión finita, como el espacio ordinario, y es el hecho de que podemos formar una base con funciones que se etiquetan con un índice real continuo, en lugar de discreto. Supongamos un conjunto de funciones $\{v_\alpha(x)\}$ que etiquetamos mediante una variable real, α. Lo primero que vamos a hacer es definir el equivalente al concepto de ortonormalidad para este conjunto. El hecho es que estas funciones no pueden ser normalizables. Supongamos que son ortogonales, de modo que:

$$v_\alpha \bullet v_{\alpha'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; v_\alpha^*\left(x\right) v_{\alpha'}\left(x\right) = 0 \qquad \text{si } \alpha \neq \alpha'$$

Pues bien, para el caso $\alpha = \alpha'$ este producto no puede ser finito ya que tendríamos una discontinuidad evitable y se evita imponiendo $v_\alpha \bullet v_\alpha = 0$, pero vimos que eso ocurre solo si $v_\alpha(x) = 0$ en todos los puntos, es decir, que no existe la función. La forma de evitar esta contradicción es que $v_\alpha \bullet v_\alpha$ sea infinito, de modo que la función $v_\alpha(x)$ no es normalizable y, por tanto, no puede representar la función de onda de una partícula. Esto quiere decir que la función $v_\alpha(x)$ no pertenecerá a $\mathfrak{F}$, pero, como veremos, sí que será útil para realizar cálculos.

Pues bien, vamos a definir el concepto de "ortonormalidad en el sentido de Dirac", de modo que diremos que el conjunto de funciones $\{v_\alpha(x)\}$ es ortonormal en el sentido de Dirac si se verifica que:

$$v_\alpha \bullet v_{\alpha'} = \int_{-\infty}^{\infty} dx \; v_\alpha^*\left(x\right) v_{\alpha'}\left(x\right) = \delta\left(\alpha - \alpha'\right)$$

Por otro lado, diremos que el conjunto de funciones $\{v_\alpha(x)\}$ constituye una base si cualquier función $\psi(x)$ se puede escribir de forma única como una combinación lineal de las funciones $v_\alpha(x)$ de la forma:

$$\psi\left(x\right) = \int d\alpha \; c\left(\alpha\right) \; v_\alpha(x)$$

La función $c\left(\alpha\right)$ se dice que es la representación de $\psi\left(x\right)$ en la base $\{v_\alpha(x)\}$. La función $c\left(\alpha\right)$ se calcula de forma similar a como hicimos con las bases ortonormales discretas. La variable α en la última ecuación es muda ya que estamos integrando sobre ella. La podemos llamar α' y no cambia:

$$\psi\left(x\right) = \int d\alpha' \; c\left(\alpha'\right) \; v_{\alpha'}(x)$$

Multiplico ahora los dos miembros por $v_\alpha^*(x)$ e intetramos en x:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \; v_\alpha^*(x) \; \psi\left(x\right) &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \; v_\alpha^*(x) \int d\alpha' \; c\left(\alpha'\right) \; v_{\alpha'}(x) = \\ \int d\alpha' \; c\left(\alpha'\right) \int_{-\infty}^{\infty} dx \; v_\alpha^*(x) \; v_{\alpha'}(x) &= \int d\alpha' \; c\left(\alpha'\right) \delta\left(\alpha - \alpha'\right) = c\left(\alpha\right) \end{aligned}$$

Por tanto:

$$c(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ v_\alpha^*(x)\ \psi(x) = v_\alpha \bullet \psi$$

De nuevo nos queda el producto escalar de las funciones de la base por nuestra función. Al igual que ocurría con las bases ortonormales discretas podemos hacer cualquier cálculo utilizando la representación de las funciones en una determinada base. Vamos a calcular el producto escalar de dos funciones. Supongamos que tenemos otra función $\varphi(x)$ que está representada en la base $\{v_\alpha(x)\}$ por la función $b(\alpha)$, de modo que:

$$\varphi(x) = \int d\alpha\ b(\alpha)\ \ v_\alpha(x)$$

Pues bien, el producto escarlar $\varphi \bullet \psi$ se puede calcular del siguiente modo:

$$\begin{aligned}
\varphi \bullet \psi &= \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \varphi^*(x)\ \ \psi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dx\ \ \int d\alpha\ b^*(\alpha)\ \ v_\alpha^*(x) \int d\alpha'\ c(\alpha')\ \ v_{\alpha'}(x) = \\
&= \int d\alpha\ b^*(\alpha) \int d\alpha'\ c(\alpha') \int_{-\infty}^{\infty} dx\ v_\alpha^*(x)\ \ v_{\alpha'}(x) = \\
&= \int d\alpha\ b^*(\alpha) \int d\alpha'\ c(\alpha')\ \ \delta(\alpha - \alpha') = \int d\alpha\ b^*(\alpha)\, c(\alpha)
\end{aligned}$$

Por tanto, es equivalente trabajar directamente con las funciones $\varphi(x)$ y $\psi(x)$ que con sus representaciones en la base $\{v_\alpha(x)\}$.

Vamos a ver dos ejemplos de base ortonormales continuas. Comenzaremos por la base de la representación de momentos. Vamos a considerar el siguiente conjunto de funciones $\left\{v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}px}\right\}$, donde p varía de forma continua $p \in (-\infty, \infty)$. Pues bien, cualquier función $\psi(x)$ se puede expresar de la siguiente forma:

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \bar{\psi}(p)\, e^{\frac{i}{\hbar}px} = \int_{-\infty}^{\infty} dp\ \bar{\psi}(p)\, v_p(x)$$

La función $\bar{\psi}(p)$ es la representación de la función $\psi(x)$ en la base $\{v_p(x)\}$ y se denomina función de onda en la representación de momentos! Es decir, que cuando trabajamos con la función $\bar{\psi}(p)$ lo único que estamos haciendo es utilizar una base concreta. Se puede comprobar fácilmente que $v_p \bullet v_{p'} = \delta(p - p')$.

Del mismo modo podemos hacer con la representación coordenadas aunque pueda parecer más rebuscado. Vamos a considerar el conjunto de funciones $\{w_{x'}(x) = \delta(x - x')\}$, donde x' varía de forma continua $x' \in (-\infty, \infty)$. Cualquier función $\psi(x)$ se puede escribir de la forma:

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

La función $\psi(x')$ es la representación de la función $\psi(x)$ en la base $\{w_{x'}(x)\}$ y se denomina función de onda en la representación coordenadas. Es decir, que podemos considerar que la propia función $\psi(x)$ ya se puede considerar como la función en una determinada base.

Como ejemplo de uso de estas bases, se puede demostrar fácilmente que:

$$\varphi \bullet \psi = \int_{-\infty}^{\infty} dp \ \bar{\varphi}^* (p) \, \bar{\psi} (p) = \int_{-\infty}^{\infty} dx' \ \varphi^* (x') \ \ \psi (x')$$

La segunda parte de la igualdad es obvia puesto que es la propia definición del producto escalar.