Transformada de Fourier de la función de onda.

El paquete de ondas más general que se puede utilizar para describir el movimiento unidimensional de una partícula libre es una superposición lineal de todas las ondas armónicas de la forma:

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} g(k)\, e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

donde ω está relacionado con k a través de la relación de dispersión y donde $g(k)$ es el peso que le damos a cada onda armónica. En este apartado vamos darle un significado físico a la función $g(k)$.

Para una función $f(x)$ se define su transformada de Fourier como la función $\tilde{f}(k)$ dada por la siguiente ecuación:

$$\tilde{f}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-ikx} dx$$

El teorema de Fourier nos dice que a partir de la transformada de Fourier de una función siempre se puede recuperar la función original mediante la siguiente ecuación:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(k) e^{ikx} dk$$

por tanto, la transformada de Fourier de una función contiene la misma información que la función original, ya que siempre se puede recuperar la función original. La ecuación anterior se puede verificar mediante la definición de la función delta de Dirac $\delta(x)$:

$$\begin{aligned} f(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{-ikx'} dx' e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f(x') e^{ik(x-x')} dk dx' = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} f(x') \delta(x'-x) dx' = f(x) \end{aligned}$$

Podemos ver que la función $g(k)$, que apareció anteriormente, está relacionada con la transformada de Fourier de la función de onda en el instante inicial:

$$g(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \tilde{\psi}(k,0)$$

donde $\tilde{\psi}(k,0)$ es la transformada de Fourier de $\psi(x,0)$. Lo que acabamos de ver nos permite encontrar la evolución temporal de la función de onda de una partícula libre para una partícula que se mueve en una sola dimensión. El problema equivalente clásico sería el de una partícula libre que se mueve en una dimensión y que parte de una posición y velocidad iniciales dadas por $x(0) = x_0$ y $v(0) = v_0$. La evolución temporal de la partícula clásica viene dada por:

$$x(t) = x_0 + v_0 t \qquad \text{y} \qquad v(t) = v_0$$

¿Cómo se resuelve el problema equivalente en mecánica cuántica? La función de onda veremos que contiene toda la información que podemos obtener sobre una partícula. Si conocemos dicha función de onda en el instante inicial $\psi(x,0)$, ¿cómo podemos calcular

$\psi(x,t)$? La forma de calcularla es la siguiente. En primer lugar, calculamos la transformada de Fourier de $\psi(x,0)$:

$$\tilde{\psi}(k,0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) e^{-ikx} dx$$

Una vez hecho este cálculo ya tenemos la función $g(k) = \tilde{\psi}(k,0)/\sqrt{2\pi}$. Ahora introducimos esta función en el paquete de ondas que vimos al principio y ya la tenemos:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k,0)\, e^{i(kx-\omega t)}\ dk = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k,0)\, e^{i\left(kx-\hbar k^2 t/2m\right)}\ dk$$

Vamos a ver a continuación el significado físico de la transformada de Fourier de la función de onda. Podemos intuir que la transformada de Fourier está relacionada con la función de distribución de velocidades, ya que la transformada nos da la distribución de números de onda de una función, es decir, cómo contribuyen los distintos valores del número de onda (k) a la función de onda. La transformada de Fourier nos ha permitido de hecho escribir la función de onda como una superposición de ondas armonicas de distinto número de onda.

Una vez que hemos visto cómo se puede obtener la evolución temporal vamos a fijarnos en un instante determinado y supongamos que en dicho instante la función de onda que describe la partícula es $\psi(x)$. En el primer tema vimos el significado físico de esta función, de modo que su módulo al cuadrado nos da la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula en la posición x. Para que la función de onda se pueda utilizar para calcular probabilidades debe estar normalizada, es decir, debemos imponer la condición de que la probabilidad de encontrar a la partícula en cualquier punto del espacio sea igual a la unidad:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\ dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2\ dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x)^* \psi(x)\ dx = 1$$

Por lo tanto, no todas las funciones pueden describir a una partícula, sino sólo aquellas que sean normalizables. Para que sea normalizable es suficiente con que la integral anterior nos de una cantidad finita. Si no vale la unidad es cuestión de multiplicar $\psi(x)$ por una constante para que sea igual a la unidad. Pues bien, se puede comprobar que si una función de onda está normalizada, también lo estará su transformada de Fourier, $\tilde{\psi}(k)$, como una función de k, de modo que si $\psi(x)$ verifica la condición anterior, entonces:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\psi}(k)\right|^2\ dk = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}^*(k)\tilde{\psi}(k)\ dk = 1$$

Ya podemos intuir que $\tilde{\psi}(k)$ será una especie de amplitud de probabilidad para los números de onda. Pero esto es muy abstracto, es más adecuado pensar en la cantidad de movimiento, que está directamente relacionada con k a partir de las relaciones de de Broglie-Einstein: $p = \hbar k$. Lo que vamos a hacer es un cambio de variable en la integral anterior de k a p:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\psi}(k)\right|^2\ dk = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right|^2\ \frac{dp}{\hbar} = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}\right)\right|^2\ dp = 1$$

Pues bien, vamos a definir la siguiente función que depende de la cantidad de movimiento p:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}(p/\hbar)$$

Tal como la hemos definido está claro que verifica la condición:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left|\bar{\psi}(p)\right|^2 \ dp = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}^*(p)\bar{\psi}(p) \ dp = 1$$

Queda claro cómo vamos a interpretar esta nueva función $\bar{\psi}\,(p)$ y es que su módulo al cuadrado será una densidad de probabilidad para el momento de la partícula, $\rho_p\,(p)$, de modo que:

$$\rho_p\,(p) \ dp = \left|\bar{\psi}(p)\right|^2 \ dp = \bar{\psi}^*(p)\bar{\psi}(p) \ dp$$

será la probabilidad de que el momento de la partícula se encuentre entre p y $p+dp$. Esta densidad de probabilidad estará normalizada si la función de onda $\psi\,(x)$ lo está.

Como la función $\bar{\psi}(p)$ es proporcional a la transformada de Fourier también contiene la misma información que la función de onda. Es decir, en lugar de trabajar con la función de onda podríamos trabajar siempre con función $\bar{\psi}(p)$.

Podemos comprobar que la relación entre la función de onda y la función de onda en la representación de momentos es la siguiente:

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

Tanto la función de onda, $\psi(x)$, como la función de onda en la representación de momentos $\bar{\psi}(p)$, nos permiten calcular, no solo la función de distribución de probabilidades para la posición o el momento, sino también valores medios de estas magnitudes. Los valores medios de la posición y del momento vienen dados por las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}
\langle x\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x\rho\,(x) \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\,|\psi\,(x)|^2 \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} x\psi^*(x)\psi(x) \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\,x\,\psi(x)\,dx \\
\langle p\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p\rho_p\,(p) \ dp = \int_{-\infty}^{\infty} p\left|\bar{\psi}\,(p)\right|^2 \ dp = \int_{-\infty}^{\infty} p\bar{\psi}^*(p)\bar{\psi}(p) \ dp = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{\psi}^*(p)\,p\,\bar{\psi}(p)\,dp
\end{aligned}$$

También podemos utilizar las funciones $\psi\,(x)$ y $\bar{\psi}\,(p)$ para calcular cualquier otro valor medio relacionado con la posición y el momento. Por ejemplo, podemos calcular los valores medios de x^2 y p^2:

$$\begin{aligned}
\left\langle x^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} x^2\rho\,(x) \ dx = \int_{-\infty}^{\infty} x^2\,|\psi\,(x)|^2 \ dx \\
\left\langle p^2\right\rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} p^2\rho_p\,(p) \ dp = \int_{-\infty}^{\infty} p^2\left|\bar{\psi}\,(p)\right|^2 \ dp
\end{aligned}$$

A partir de estos valores y los anteriores podemos calcular la dispersión de la posición y del momento:

$$\Delta x = \sqrt{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2} \qquad\qquad \Delta p = \sqrt{\langle p^2\rangle - \langle p\rangle^2}$$

Veremos que estas dos dispersiones están siempre relacionadas mediante el principio de indeterminación de Heisenberg.

Vamos, a continuación, a ver cómo es la evolución temporal de la transformada de Fourier y de la función de onda en la representación de momentos que hemos definido, de nuevo para el caso de una partícula libre.

Vimos que si en $t = 0$ conocemos la función de onda $\psi(x, 0)$ y calculamos su transformada de Fourier $\tilde{\psi}(k, 0)$, podemos encontrar la función de onda en cualquier instante posterior como:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\psi}(k,0) e^{i(kx-\omega t)}\, dk$$

Pues bien, podemos escribir esta integral de la siguiente forma:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\tilde{\psi}(k,0)e^{-i\omega t}}\, e^{ikx} dk$$

De la expresión de la transformada de Fourier inversa, podemos ver que lo que hemos señalado con una llave es la transformada de Fourier de la función de onda en el instante t, $\psi(x, t)$, y que notaremos como $\tilde{\psi}(k, t)$, de modo que:

$$\tilde{\psi}(k,t) = \tilde{\psi}(k,0)e^{-i\omega t} = \tilde{\psi}(k,0)e^{-i\hbar k^2 t/2m}$$

Esta ecuación nos da la evolución temporal de $\tilde{\psi}(k, t)$, que vemos que depende de $\tilde{\psi}(k, 0)$ multiplicada por un término armónico. Si dividimos por $\sqrt{\hbar}$ y sustituimos k por $p/\hbar$, queda:

$$\frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}, t\right) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}, 0\right) e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}$$

Podemos identificar la función de onda en la representación de momentos en el instante inicial y en el instante t:

$$\bar{\psi}(p,0) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}, 0\right) \qquad \qquad \bar{\psi}(p,t) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\tilde{\psi}\left(\frac{p}{\hbar}, t\right)$$

De modo que:

$$\bar{\psi}(p,t) = \bar{\psi}(p,0)e^{-\frac{i}{\hbar}\frac{p^2}{2m}t}$$

Teniendo en cuenta la interpretación física que hemos dado a la función de onda en la representación de momentos, el módulo al cuadrado de la función $\bar{\psi}(p, 0)$ nos dará la densidad de probabilidad para la cantidad de movimiento de la partícula en el instante inicial, $\rho_p(p, 0)$, y de la misma forma el módulo al cuadrado de la función $\bar{\psi}(p, t)$ nos dará dicha densidad de probabilidad en el instante t, $\rho_p(p, t)$. Por tanto, si tomamos el módulo al cuadrado en los dos términos de la ecuación anterior llegamos a:

$$\left|\bar{\psi}(p,t)\right|^2 = \left|\bar{\psi}(p,0)\right|^2 \qquad \Longrightarrow \qquad \rho_p(p,t) = \rho_p(p,0)$$

ya que el módulo al cuadrado de la exponencial imáginaria es igual a la unidad. La ecuación anterior es el equivalente cuántico al primer principio de Newton (conservación de la cantidad de movimiento para una partícula libre), de hecho, la ecuación anterior se puede decir que es la expresión del primer principio en mecánica cuántica. La distribución de probabilidades del momento para una partícula no varía con el tiempo. Como ejemplo, el valor medio de la cantidad de movimiento no varía con el tiempo: $\langle p\rangle (t) = \langle p\rangle (0)$, que sería el equivalente a la ecuación $v\left(t\right) = v_0$ que vimos anteriormente para la velocidad clásica, en lugar del momento. De la misma forma, la dispersión del momento se mantendrá también constante en el tiempo. Estamos viendo que existen algunas similitudes entre la mecánica cuántica y la mecánica de Newton, al menos para la descripción de una partícula libre.

Antes de terminar este apartado, vamos a estudiar algunos ejemplos concretos de transformadas de Fourier, que nos servirán para profundizar en el principio de indeterminación. Existen dos tipos especiales de funciones que aunque no pueden ser propiamente funciones de onda, puesto que no se pueden normalizar, son muy utilizadas en mecánica cuántica.

El primer ejemplo es la función delta de Dirac: $\psi(x) = \delta(x - x_0)$

La transformada de Fourier de esta función y la función de onda en la representación de momentos se pueden calcular fácilmente:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx_0} \qquad \text{y} \qquad \bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{-\frac{i}{\hbar}px_0}$$

Esta función de onda podría corresponder a una partícula perfectamente localizada en el espacio, $\Delta x = 0$. Lo que hemos encontrado es que $\rho_p\left(p\right) = \left|\bar{\psi}(p)\right|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$. Es decir, que si medimos la cantidad de movimiento de la partícula podemos obtener cualquier valor entre $-\infty$ e ∞ con igual probabilidad. Por tanto, la partícula tiene una cantidad de movimiento totalmente indeterminada ($\Delta p \to \infty$), tal como corresponde de acuerdo con el principio de indeterminación.

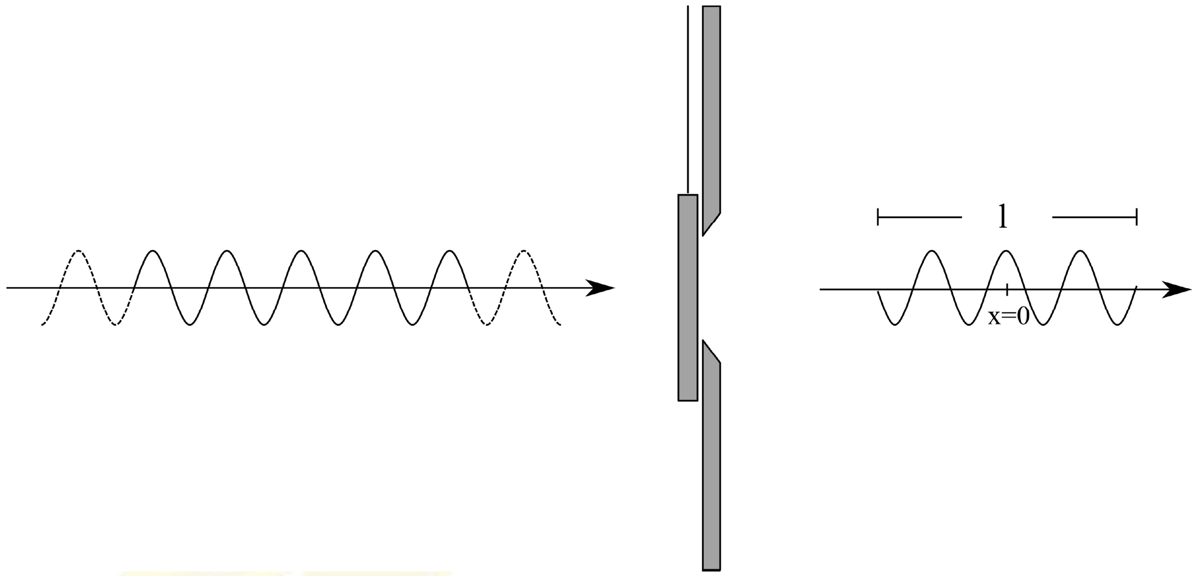
El segundo ejemplo es la función $\psi(x) = \dfrac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{ik_0x}$.

Del mismo modo podemos calcular de nuevo la transformada y la función de onda en la representación de momentos y se obtienen las siguientes funciones:

$$\tilde{\psi}(k) = \frac{1}{\sqrt{\hbar}}\delta(k - k_0) \qquad \text{y} \qquad \bar{\psi}(p) = \delta(p - p_0)$$

donde $p_0 = \hbar k_0$. Esta función de onda podría corresponder a una partícula de momento bien definido, $\Delta p = 0$, y, en este caso, lógicamente, la partícula esta totalmente deslocalizada en el espacio ($\Delta x \to \infty$).

Por último, vamos a suponer que partimos de una partícula que viene descrita mediante una función de onda similar a la anterior y que, mediante algún dispositivo imaginario, truncamos su función de onda, de modo que sólo sea distinta de cero en el intervalo comprendido entre $x = -l/2$ y $x = l/2$. Esta función de onda se podría conseguir mediante algún dispositivo similar al de la figura. Hay una trampilla que podemos abrir y cerrar durante un pequeño intervalo de tiempo, de modo que si la partícula pasa a la región de la derecha su función de onda habrá quedado truncada.



Vamos a suponer que nos queda la siguiente función de onda:

$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < -\frac{l}{2} \\ \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} & \text{para } -\frac{l}{2} \leq x \leq \frac{l}{2} \\ 0 & \text{para } x > \frac{l}{2} \end{cases}$$

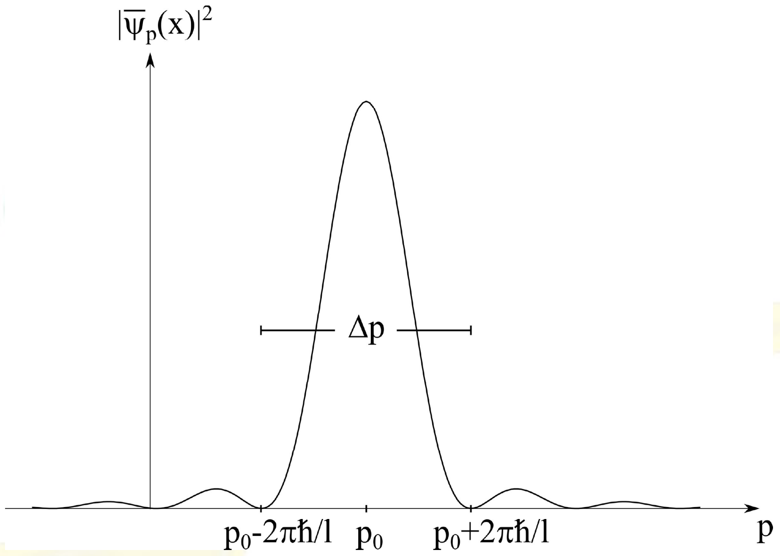
La partícula está por tanto localizada dentro del intervalo de anchura $\Delta x = l$ y dentro de dicho intervalo, la densidad de probabilidad de encontrar a la partícula es constante, $\rho(x) = |\psi(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar}$. Vamos a ver que como consecuencia, de acuerdo con el principio de indeterminación, la partícula no tendrá un momento bien definido como ocurría anteriormente. Vamos a calcular la función de onda en la representación de momentos:

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-l/2}^{l/2} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar}p_0 x} e^{-\frac{i}{\hbar}px} dx = \frac{1}{\pi} \frac{\sin\left[l(p-p_0)/2\hbar\right]}{p-p_0}$$

La densidad de probabilidad para la cantidad de movimiento de la partícula viene dada, por tanto, por:

$$\rho_p(p) = \left|\bar{\psi}(p)\right|^2 = \frac{1}{\pi^2} \frac{\sin^2\left[l(p-p_0)/2\hbar\right]}{(p-p_0)^2}$$

Se trata del cuadrado de una función sinc, que tiene su máximo en $p = p_0$. Podemos ver la representación gráfica de esta función en la siguiente figura.



Podemos estimar la anchura de esta función de distribución, tal como se muestra en la figura, como la distancia entre los dos primeros ceros que aparecen a derecha e izquierda del máximo central, de modo que $\Delta p \simeq 4\pi\hbar/l$. Por tanto, se verifica que $\Delta x \Delta p \simeq 4\pi\hbar = 2h$, resultado que se encuentra de acuerdo con el pricipio de indeterminación.

En la aplicación "Función de ondas en la representación coordenadas y de momentos" de la página https://www.hbarra.es se puede ver cómo al aumentar Δx disminuye Δp y viceversa, de modo que el producto de los dos se mantiene siempre constante.

Para terminar este apartado, veamos qué ocurre cuando queremos describir el movimiento de una partícula libre en el espacio ordinario de tres dimensiones. Supongamos que en un determinado momento la partícula está descrita mediante una función de onda $\psi(\vec{r}) = \psi(x, y, z)$. Para esta función podemos hacer la misma integral en x que en la transformada de Fourier:

$$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z)\, e^{-ik_x x} dx$$

lo único es que a k le hemos llamado k_x para poder definir magnitudes análogas para la dirección y y z. Si ahora hacemos lo mismo para las otras dos direcciones, nos va a quedar la siguiente integral triple:

$$\tilde{\psi}(k_x, k_y, k_z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x, y, z)\, e^{-ik_x x} e^{-ik_y y} e^{-ik_z z}\; dxdydz$$

Esta es la transformada de Fourier en tres dimensiones. Podemos escribirla de forma más sencilla utilizando la notación vectorial:

$$\tilde{\psi}\left(\vec{k}\right) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\vec{r}\; \psi(\vec{r})\;\; e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

A partir de la función $\tilde{\psi}\left(\vec{k}\right)$ podemos recuperar la función original realizando la transformada inversa para las tres direcciones del espacio:

$$\psi(\vec{r}) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\vec{k}\; \tilde{\psi}\left(\vec{k}\right)\;\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Por último, podemos definir también una función de onda en la representación de momentos que dependerá de tres variables $(p_x, p_y, p_z) \equiv \vec{p}$:

$$\bar{\psi}\left(\vec{p}\right) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3\vec{r}\ \psi(\vec{r})\ e^{-\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}} \qquad\qquad \psi(\vec{r}) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \int d^3\vec{p}\ \bar{\psi}\left(\vec{p}\right)\ e^{\frac{i}{\hbar}\vec{p}\cdot\vec{r}}$$

La interpretación física de la función $\bar{\psi}\left(\vec{p}\right)$ es que su módulo al cuadrado multiplicada por un elemento de volumen en el espacio de momentos $d^3\vec{p}$ nos da la probabilidad de que si medimos la cantidad de movimiento de la partícula obtengamos un valor comprendido dentro del elemento $d^3\vec{p}$ dibujado alrededor del vector $\vec{p}$.

Para terminar, podemos ver cómo obtener la evolución temporal de la función de onda de una partícula libre en el espacio ordinario de tres dimensiones. Si conocemos la función de onda en el instante inicial $\psi\left(\vec{r}, 0\right)$, podemos calcular su transformada de Fourier:

$$\tilde{\psi}\left(\vec{k}, 0\right) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\vec{r}\ \psi\left(\vec{r}, 0\right)\ e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}}$$

Una vez calculada esta función, la función de onda en el instante t vendrá dada por:

$$\psi\left(\vec{r}, t\right) = (2\pi)^{-3/2} \int d^3\vec{k}\ \tilde{\psi}\left(\vec{k}, 0\right)\ e^{i\left(\vec{k}\cdot\vec{r} - \omega t\right)}$$

donde ω estará relacionada con k_x, k_y y k_z mediante la siguiente relación de dispersión, que se obtiene de la misma forma que hicimos para una sola dimensión:

$$\omega = \frac{\hbar\left(k_x^2 + k_y^2 + k_z^2\right)}{2m}$$