Juan Pablo Paz 2020

3

22 de abril de 2020

Formalismo en dimensión infinita. Operadores posición y momento.

En el capítulo anterior presentamos las herramientas matemáticas necesarias para representar a los estados cuánticos y operadores de dimensión finita. Como vimos, los estados están asociados a vectores que pertenecen a un espacio vectorial con producto interno hermitiano. En este capítulo nos concentraremos en la representación de estados y operadores en espacios de dimensión infinita. Estos espacios aparecen naturalmente por ejemplo en la descripción de la posición y momento de una partícula que se mueve bajo la acción de un dado potencial. En efecto, a diferencia de lo que ocurre con el spin, estos observables pueden tomar infinitos valores (no numerables). Para estos sistemas, la mecánica cuántica provee una descripción de los estados en términos de la función de onda. Veremos aquí cómo es posible conciliar la descripción ondulatoria con el formalismo de Dirac introducido en el capítulo precedente.

3.1. El espacio de las funciones $\mathcal{L}^2$

El espacio vectorial que usaremos para representar los estados físicos de una partícula que se mueve en una dimensión es el espacio de funciones continuas y de cuadrado integrable. Este espacio se denomina $\mathcal{L}^2$ y sus elementos son las funciones $f : \mathbb{R} \to \mathbb{C}$ (con dominio real e imagen compleja), tales que: $\int dx\, |f(x)|^2$ es finita (a menos que se indique lo contrario el dominio de integración de todas las integrales se extiende entre $-\infty$ y $+\infty$). A continuación presentaremos algunas de las propiedades más importantes de este espacio:

1. $\mathcal{L}^2$ es un *espacio vectorial lineal*. En efecto, es un conjunto cerrado frente a la suma y el producto por escalares complejos. No es sorprendente que este espacio tenga dimensión infinita: para especificar completamente una función hay que dar infinitos números complejos. A los vectores de este espacio también los podemos (y vamos a) denotar como
$$|f\rangle. \tag{3.1}$$

2. En $\mathcal{L}^2$ se puede definir un *producto interno hermitiano*. Diremos que el producto escalar entre dos funciones f y g es: $(f,g) = \int dx\, f^*(x)\, g(x)$. Este producto satisface las mismas propiedades que mencionamos en el capítulo anterior: es lineal en la segunda entrada, es hermitiano ($(f,g) = (g,f)^*$), el producto de cualquier función consigo misma es real y positivo, etc. Por lo tanto puede usarse para definir una *norma* $\|f\| = \sqrt{(f,f)}$, una noción de distancia y de ortogonalidad entre funciones. Se cumplen además la desigualdad de Cauchy-Schwarz y triangular. También es posible definir *funcionales lineales* sobre $\mathcal{L}^2$. Tal como sucede en el caso de dimensión finita, la existencia de un producto interno nos permite asociar una funcional lineal a todo elemento del espacio. En efecto, una funcional lineal asociada a la función $f \in \mathcal{L}^2$, se define como aquella funcional F_f tal que $F_f(g) = \int dx\, f^*(x)g(x)$. Tal como vimos en el caso de dimensión finita se puede mostrar que existe un isomorfismo entre funcionales lineales y funciones en $\mathcal{L}^2$. De manera que todo funcional lineal puede ser representado en notación de Dirac como $\langle f|$ y por lo tanto
$$\langle f|g\rangle = \int dx\, f^*(x)g(x). \tag{3.2}$$
El espacio de las funcionales se denomina espacio dual y se denota $\mathcal{L}^{2*}$.

3. $\mathcal{L}^2$ es un espacio vectorial que además es *completo*. Esto significa que toda sucesión de Cauchy converge a un elemento del propio espacio. $\mathcal{L}^2$ es entonces un *espacio de Hilbert* (que denotaremos como $\mathcal{H}$): es un espacio vectorial completo con norma dada por el producto interno hermitiano. El axioma de completitud es no trivial para el caso de dimensión infinita, sin embargo se satisface automáticamente para dimensión finita y es por eso que los espacios vectoriales que vimos hasta ahora son espacios de Hilbert.

4. En $\mathcal{L}^2$ se pueden construir *bases ortonormales completas* numerables. Los espacios de Hilbert que cumplen con esta propiedad se los llama *separables*. Por lo tanto, existe una secuencia $\{|u_n\rangle\}_{n=1}^{\infty} \in \mathcal{L}^2$ tal que para todo $|f\rangle \in \mathcal{L}^2$ hay una única secuencia de coeficientes c_n donde
$$|f\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n\, |u_n\rangle, \tag{3.3}$$
y $\langle u_n|u_m\rangle = \delta_{n,m}$ (recordemos que bajo la notación de Dirac la Ec. (3.3) equivale a $f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n u_n(x)$). Es decir, en la base $\{|u_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$ la función f se representa como un vector de componentes c_n. Al igual que para dimensión finita,

los coeficientes c_n se obtienen como:

$$c_n = \langle u_n | f \rangle = \int dx\, u_n^*(x)\, f(x). \tag{3.4}$$

5. También es posible definir *operadores lineales* que actúan sobre los elementos del espacio. Un ejemplo importante de ellos es la identidad que, dada una base ortonormal, se representa como:

$$\mathbb{1} = \sum_{j=1}^{\infty} |u_n\rangle\langle u_n|. \tag{3.5}$$

6. Nota: Para un físico es más natural suponer que los estados físicos son funciones de $\mathcal{L}^2$ que, además, son infinitamente derivables (pertenecen al conjunto C^∞). Por otro lado a la hora de calcular valores medios o incertezas es necesario además quedarnos con las funciones de C^∞ que decaen rápidamente en el infinito. Este espacio se denomina "espacio de Schwartz" y se denota como $S(\mathbb{R})$, no es un espacio de Hilbert ya que no cumple el axioma de completitud. En este caso, el espacio de las funcionales lineales sobre $S(\mathbb{R})$ que es el dual de $S(\mathbb{R})$ y se denota como $S(\mathbb{R})^*$, tiene propiedades curiosas. En efecto, $S(\mathbb{R})^*$ no es isomorfo a $S(\mathbb{R})$ ya que existen funcionales que no tienen asociada ninguna función en $S(\mathbb{R})$. La más conocida de ellas es la famosa delta de Dirac y que se define de modo siguiente. Dada cualquier función en $S(\mathbb{R})$, la funcional D_a es tal que $D_a(f) = f(a)$. No es difícil demostrar que no existe ninguna función en $S(\mathbb{R})$ tal que $\int dx f(x) D_a(x) = f(a)$ para toda función f. Como veremos más adelante, la delta de Dirac también se puede obtener como el límite de una sucesión débilmente convergente de funciones de cuadrado integrable. El espacio donde se puede definir estas funcionales y que también permite generalizar el teorema espectral a operadores no acotados, como posición y momento, se denomina espacio de Hilbert equipado.

Los observables, como vimos en el capítulo anterior, estarán asociados a operadores. Existen observables típicos que toman infinitos valores pero no numerables, como los de posición y momento, y requieren un tratamiento particular. Esto es lo que veremos en la siguiente sección.

3.2. Operador posición y funciones de onda.

En mecánica cuántica la descripción de una partícula que se mueve en una dimensión espacial se realiza en términos de lo que se denomina función de onda. No haremos una descripción detallada de este concepto, porque asumimos ya fue estudiado en algún curso introductorio a la mecánica cuántica. Sin embargo, vamos a revisar las ideas centrales bajo la luz del formalismo con el que venimos trabajando.

Toda función de onda $f(x)$ asociada a sistema físico tiene norma unidad, recordemos que el cuadrado de la norma es igual a la integral del módulo cuadrado de la función de onda en todo el espacio. Por lo tanto, como dijimos al principio, las funciones de onda pertenecen al espacio de funciones de cuadrado integrable. Vimos además que toda función de este espacio puede definirse en términos de una secuencia numerable de coeficientes $\{c_n\}_{n=1}^{\infty}$ dados por la Ec. (3.4). Esta secuencia define unívocamente la función en una cierta la base ortonormal $\{|u_n\rangle\}_{n=1}^{\infty}$. Dada otra base, tendremos otra secuencia de coeficientes que definen unívocamente la misma función.

Por otro lado, en forma heurística, podríamos decir que especificar una función también equivale a dar la lista de sus valores $f(x)$ en todo punto x. Es decir, agrupando todos los valores de la función en un vector con infinitas componentes. En este caso tendríamos otra representación de la función pero, a diferencia del caso anterior, la cantidad de coeficientes que tienen los vectores es no-numerable (ya que x toma valores en el continuo). Dado el producto interno de la Ec. (3.2) definimos el funcional lineal $\langle x'|$, en analogía con el caso anterior (Ec. (3.4)), como:

$$\langle x'|f\rangle = f(x'). \tag{3.6}$$

El funcional aplicado sobre una dada función simplemente evalúa la función en un punto y, al igual que ocurre con el producto interno, imponemos que $\langle f|x'\rangle = \langle x'|f\rangle^* = f^*(x')$. Ahora notemos lo siguiente, a partir de la definición de producto interno y la Ec. (3.6), $\langle f|x'\rangle = \int dx\ f^*(x)\langle x|x'\rangle = f(x')^*$. Como esta expresión debe ser válida para toda función, $\langle x|x'\rangle$ debe actuar como la delta de Dirac, es decir:

$$\langle x|x'\rangle = \delta(x - x'). \tag{3.7}$$

Esto implica que el ket $|x'\rangle$, está asociado a la función representada por la delta de Dirac. Esta función (en realidad es una distribución) podemos pensarla como nula en todo x, salvo en un único punto donde diverge. De manera que la delta de Dirac no pertenece a $\mathcal{L}^2$ y por lo tanto $|x\rangle$ no pertenece nuestro espacio de Hilbert. Sin embargo, veremos que será útil considerar estos estados que llamaremos impropios o no-físicos. Esta última igualdad define además una relación de ortonormalidad generalizada para esta representación, de forma que llamaremos al conjunto de kets $\{|x\rangle, x \in \mathbb{R}\}$ 'base posición'. Finalmente es simple notar que,

$$|f\rangle = \int dx\ f(x)\ |x\rangle, \tag{3.8}$$

es decir, $f(x)$ representa los coeficientes de la expansión en la base de posición.

Ahora estamos en condiciones de introducir el operador asociado al observable posición. El *operador posición* resulta ser diagonal en la base de estados con posición definida y queda representado por la siguiente integral (en vez de una suma como sucede para operadores diagonales en bases numerables):

$$\hat{X} = \int dx\ x\ |x\rangle\langle x|. \tag{3.9}$$

Este operador es hermítico $\hat{X} = \hat{X}^\dagger$ y tiene autovalores reales x no acotados que toman valores en el continuo.

Por otro lado, de acuerdo a la definición de producto interno y la definición de funcional que vimos más arriba, dadas dos funciones f y g se satisface que:

$$\langle f|g\rangle = \int dx\, f^*(x)g(x) = \int dx\, \langle f|x\rangle\langle x|g\rangle = \langle f| \left(\int dx\, |x\rangle\langle x|\right) |g\rangle. \tag{3.10}$$

Esta relación justifica la representación del *operador identidad* como:

$$\mathbb{1} = \int dx\, |x\rangle\langle x|, \tag{3.11}$$

y expresa la completitud de la base posición.

Antes de concluir esta sección nos gustaría destacar nuevamente que la delta de Dirac no es una función, sino una distribución y uno debe ser cauto al usarla. En particular, como dijimos anteriormente, los estados posición no representan estados físicos, porque la función de onda asociada no es de cuadrado integrable, y por lo tanto no son miembros del espacio de Hilbert. Sin embargo, para fines prácticos resulta una herramienta de cómputo legítima. Las funciones delta las usaremos sin problema cuando aparezcan multiplicadas por funciones suaves, mientras que en otro caso el resultado no estará bien definido. Una representación análoga para el operador momento la daremos en la próxima sección.

3.3. Operador momento y funciones de onda.

Para introducir el operador asociado al momento vamos recurrir a un procedimiento similar al anterior. De esta manera, podemos pensar en otro modo de especificar unívocamente una función. Una forma usual, que tiene múltiples aplicaciones, es la transformada de Fourier. Es decir, dada $f(x)$ existe $\tilde{f}(k)$ tal que $f(x) = \int \tilde{f}(k)\, \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}\, dk$. Resulta entonces que especificando $\tilde{f}(k)$ para todo $k \in \mathbb{R}$ tendremos otra representación de la función f. De aquí en adelante podemos proceder de la misma manera que en el caso anterior utilizando $\tilde{f}(k)$. En primer lugar, definiendo el siguiente funcional:

$$\langle k|f\rangle = \tilde{f}(k) = \langle f|k\rangle^*. \tag{3.12}$$

Se puede notar además que, a partir de la definición de producto interno Ec. (3.2) y expresando la delta de Dirac en término de exponenciales, dadas dos funciones f y g vale $\langle f|g\rangle = \int\, dx\, f^*(x)g(x) = \int\, dk\, \tilde{f}^*(k)\tilde{g}(k)$. Luego, a partir de la relación anterior y mediante el mismo razonamiento que utilizamos para arribar a la Eq. (3.7), es inmediato que:

$$\langle k|k'\rangle = \delta(k-k'). \tag{3.13}$$

Al igual que antes, podemos afirmar que estas funciones de onda no pertenecen al espacio de Hilbert y no son estados físicos. Sin embargo, podemos construir otra base en el continuo (no-numerable) $\{|k\rangle, k \in \mathbb{R}\}$, análoga a la base posición, en la cual:

$$|f\rangle = \int dk \; \tilde{f}(k) \, |k\rangle, \tag{3.14}$$

y representar el operador identidad como:

$$\mathbb{1} = \int dk \; |k\rangle\langle k|. \tag{3.15}$$

Para hallar la función de onda en representación posición del ket $|k\rangle$ simplemente debemos evaluar $\langle x|k\rangle$. En este caso, utilizando la Ec. (3.14) y la transformada de Fourier de $f(x)$, es sencillo de ver que:

$$f(x) = \langle x|f\rangle = \int dk \; \tilde{f}(k) \, \langle x|k\rangle = \int dk \; \tilde{f}(k) \, \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}. \tag{3.16}$$

De esta manera, resulta que la función de onda de $|k\rangle$ en la base posición,

$$\langle x|k\rangle = \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2\pi}}, \tag{3.17}$$

representa una onda plana con momento proporcional a k, y que podemos asociar a la función de onda de una partícula libre. Por lo tanto resulta razonable, apelando a la constante de Planck, definir al momento como $p = \hbar k$.

Llamaremos entonces a $\{|p\rangle, p \in \mathbb{R}\}$ la *base de momento*, y el *operador momento* será representado como:

$$\hat{P} = \int dp \; p \; |p\rangle\langle p|. \tag{3.18}$$

Finalmente, dada la asignación $p = \hbar k$, por completitud resumimos las expresiones anteriores en función de p:

$$\tilde{f}(p) = \langle p|f\rangle, \quad \langle p|p'\rangle = \delta(p - p'), \quad \langle x|p\rangle = \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}, \quad \mathbb{1} = \int dp \; |p\rangle\langle p|. \tag{3.19}$$

donde ahora los $|p\rangle$ representan estados localizados en momento p.

3.4. Acción de los operadores posición y momento. Relación de conmutación.

Como dijimos, los estados de un sistema son vectores $|f\rangle$ pertenecientes a $\mathcal{H}$. La proyección de un estado sobre la base posición nos da la función de onda de dicho estado. Para obtener nuevamente la relación entre las representaciones de posición y momento podemos recurrir al siguiente ejercicio que utilizaremos recurrentemente para realizar cambios de base. Notemos la siguiente igualdad trivial

$\tilde{f}(p) = \langle p|f\rangle = \langle p|\mathbb{1}|f\rangle$, ahora podemos expresar la identidad como $\mathbb{1} = \int dx\, |x\rangle\langle x|$ de forma que

$$\tilde{f}(p) = \int dx\, \langle p|x\rangle\langle x|f\rangle = \int dx\, \frac{e^{-ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, f(x). \tag{3.20}$$

Es decir, $f(x)$ y $\tilde{f}(p)$ son simplemente las coordenadas del mismo estado en dos bases diferentes.

Es fácil ver cómo actúan los operadores posición y momento. Por ejemplo, dado el estado $|f\rangle$, cuya función de onda es $f(x) = \langle x|f\rangle$, podemos obtener $\langle x|\hat{X}|f\rangle$ de la siguiente manera

$$\langle x|\hat{X}|f\rangle = x\langle x|f\rangle = xf(x). \tag{3.21}$$

donde en la expresión anterior usamos que $\hat{X}|x\rangle = x|x\rangle$. Para encontrar el efecto del operador momento, debemos calcular $\langle x|\hat{P}|f\rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle x|\hat{P}|f\rangle &= \int dp\, \langle x|p\rangle\langle p|\hat{P}|f\rangle = \int dp\, p\, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\langle p|f\rangle \\
&= \frac{\hbar}{i}\partial_x \int dp\, \frac{e^{ipx/\hbar}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\langle p|f\rangle = \frac{\hbar}{i}\partial_x \int dp\, \langle x|p\rangle\langle p|f\rangle \\
&= \frac{\hbar}{i}\partial_x\langle x|f\rangle = \frac{\hbar}{i}\partial_x f(x).
\end{aligned}$$

Es decir, el operador momento actúa como $\hbar/i$ veces el operador gradiente en la base posición. Una expresión análoga (con un signo de diferencia) se obtiene para la acción del operador posición en la base de momentos: $\langle p|\hat{X}|f\rangle = (-\hbar/i)\partial_p\langle p|f\rangle$.

Por último, analizaremos las relaciones de conmutación entre los operadores posición y momento. Calcularemos los elementos de matriz del conmutador entre dos estados físicos (que tienen funciones de onda de cuadrado integrable):

$$\begin{aligned}
\langle\phi|[\hat{X},\hat{P}]|\psi\rangle &= \int dx\, \Big(\langle\phi|x\rangle\, x\langle x|\hat{P}|\psi\rangle - \langle\phi|\hat{P}|x\rangle\, x\, \langle x|\psi\rangle\Big) \\
&= \frac{\hbar}{i}\int dx\, \Big(\langle\phi|x\rangle\, x\partial_x(\langle x|\psi\rangle) + \partial_x(\langle\phi|x\rangle)x\langle x|\psi\rangle\Big) \\
&= \frac{\hbar}{i}\int dx\, \Big(\partial_x(\langle\phi|x\rangle\, x\langle x|\psi\rangle) - \langle\phi|x\rangle\langle x|\psi\rangle\Big) \\
&= -\frac{\hbar}{i}\int dx\langle\phi|x\rangle\langle x|\psi\rangle \\
&= i\hbar\langle\phi|\psi\rangle
\end{aligned}$$

donde en el ante último paso usamos el hecho de que el término de superficie se anula pues las funciones en cuestión son de cuadrado integrable y decaen a cero en el infinito suficientemente rápido. Evidentemente, el cálculo anterior nos muestra que los operadores posición y momento no conmutan, en efecto

$$[\hat{X},\hat{P}] = i\hbar. \tag{3.22}$$

3.5. Distribuciones como límite de funciones

3.5.1. Delta de Dirac

Aquí mostraremos algunas propiedades de la delta de Dirac. Comencemos primero con la definición de su acción que, como vimos en la sección, anterior se resume:

$$\int dx\ \delta(x-a)\ f(x) = f(a). \tag{3.23}$$

Por otro lado, una propiedad que usaremos mucho es la representación de la delta de Dirac como transformada de Fourier:

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int e^{ixt}dt \tag{3.24}$$

Finalmente vamos a mostrar que también puede obtenerse como límite en un sentido débil de una sucesión de funciones de cuadrado integrable. Consideremos las siguiente sucesión de funciones:

$$f_n(x) = \frac{n}{2}\exp(-n|x|) \tag{3.25}$$

Pese a que los elementos de la sucesión son de cuadrado integrable, esta converge fuera de este espacio. En efecto, ese límite, que podemos denominar $f_\infty(x)$, no es una función bien definida. Es un objeto que toma un valor nulo para $x \neq 0$ y diverge para $x = 0$. Para demostrar esto podemos calcular explícitamente la forma en la que actúa cada una de las funcionales $\langle f_n|$ sobre alguna función $|g\rangle \in \mathcal{L}^2$:

$$\begin{aligned}
\langle f_n|g\rangle &= \int dx\frac{n}{2}\exp(-n|x|)\ g(x) \\
&= \sum_k \frac{g^{(k)}|_0}{k!}\frac{n}{2}\int dx\exp(-n|x|)x^k \\
&= \sum_{k\ par} \frac{g^{(k)}|_0}{k!} n\ (-1)^k\partial_n^k \int_0^\infty dx\exp(-nx) \\
&= \sum_{k\ par} \frac{g^{(k)}|_0}{k!}\ n(-1)^k\partial_n^k\frac{1}{n} \\
&= \sum_{k\ par} \frac{g^{(k)}|_0}{k!}\frac{1}{n^k}
\end{aligned}$$

Si en la última expresión tomamos el límite para $n \to \infty$ vemos que solamente sobrevive el término con $k = 0$. Por lo tanto:

$$\lim_{n\to\infty}\langle f_n|g\rangle = \langle f_\infty|g\rangle = g(0)$$

Como vemos, las funcionales $\langle f_n|$ están bien definidas tanto para n finito como en el límite $n \to \infty$. En cambio, en ese límite $|f_\infty\rangle$ no es un elemento de $\mathcal{L}^2$. Cabe aclarar que analizamos la convergencia 'débil', no estamos afirmando que es una secuencia de Cauchy.

Es evidente que podemos construir otras funcionales idénticas a la anterior pero que evalúan la función en otro punto distinto de $x=0$. En efecto, la sucesión de funciones $f_n^{(a)}(x) = \frac{n}{2}\exp(-n|x-a|)$, en el límite para $n \to \infty$ evalúa la función en $x=a$. O sea: $\langle f_\infty^{(a)}|g\rangle = g(a)$. Por simplicidad usaremos la notación $\langle f_\infty^{(a)}| = \langle a|$.

Hay otras sucesiones de funciones cuyas funcionales convergen a la misma funcional $\langle a|$, que no es otra cosa que la delta de Dirac $\delta(x-a)$. Entre ellas, podemos mencionar las siguientes:

$$
\begin{aligned}
f_n(x) &= \frac{n}{2}\exp(-n|x-a|),\\
g_n(x) &= \frac{1}{n\pi}\frac{1}{(x-a)^2+1/n^2},\\
h_n(x) &= \frac{n}{\sqrt{\pi}}\exp(-n^2(x-a)^2),\\
d_n(x) &= \frac{1}{\pi}\frac{\sin^2(n(x-a))}{n(x-a)^2}.
\end{aligned}
$$

3.5.2. La transformada de Fourier

Otro ejemplo importante de sucesión que converge débilmente fuera de $\mathcal{L}^2$ es el siguiente

$$\tilde{f}_n^{(k)}(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\exp(-x^2/n^2)\exp(ikx). \tag{3.26}$$

Es fácil demostrar que el límite de la sucesión no es una función de $\mathcal{L}^2$ (en este caso es una función bien definida pero no es de cuadrado integrable). Sin embargo, el límite débil de las funcionales está bien definido ya que

$$\langle \tilde{f}_\infty^{(k)}|g\rangle = \int \frac{dx}{\sqrt{2\pi}}\ \exp(ikx)\ g(x) = \tilde{g}(k)$$

donde $\tilde{g}(k)$ es la transformada de Fourier de $g(x)$ evaluada en k. En este caso, la transformada de Fourier está bien definida para toda función de $\mathcal{L}^2$. Para simplificar la notación, a esta funcional la llamaremos simplemente $\langle k|$, y su acción sobre cualquier función es tal que $\langle k|g\rangle = \tilde{g}(k)$.