Clase 2 - Viernes 20/08/2021

La clase pasada vimos:

- Formalidades del curso
- Espacio de Hilbert de funciones de onda de una partícula
- Operadores lineales
- Conmutador
- Bases del espacio de Hilbert
- Producto escalar expresado en componentes
- Relación de clausura de la base

En esta clase veremos:

- Base de funciones de cuadrado no integrable:
  - Base de ondas planas
  - Deltas de Dirac en posición
  - Base mixta y notación general para bases contínuas
- Espacio de estados y vector de estado
- Notación de Dirac: ket y bra

Un espacio de Hilbert es un espacio vectorial equipado con producto interno o escalar, que permite definir longitudes y ángulos.

El conjunto $\mathcal{F}$ forma un espacio de Hilbert

REPASO

- $\mathcal{F}$ es un espacio vectorial:

Si $\psi_1(\mathbf{r}), \psi_2(\mathbf{r}) \in \mathcal{F} \;\Rightarrow\; \psi(\mathbf{r}) = \lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r}) \in \mathcal{F}$ con $\lambda_1, \lambda_2 \in \mathbb{C}$

- Se define un producto escalar en $\mathcal{F}$:

$$(\varphi, \psi) = \int d^3r \;\; \varphi^*(\mathbf{r}) \;\; \psi(\mathbf{r})$$

Operadores lineales

REPASO

$$A : \psi(\mathbf{r}) \longrightarrow \psi'(\mathbf{r})$$

$$\psi'(\mathbf{r}) = A\psi(\mathbf{r})$$

$$A[\lambda_1\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2\psi_2(\mathbf{r})] = \lambda_1 A\psi_1(\mathbf{r}) + \lambda_2 A\psi_2(\mathbf{r})$$

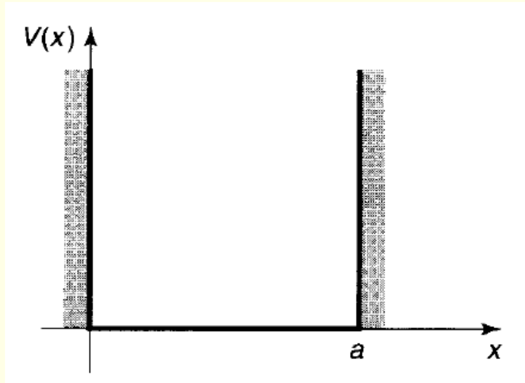
Base del espacio de Hilbert $\{u_i(\mathbf{r})\} \subset \mathcal{F}$

$$\begin{cases} \text{Es base si } \forall\psi(\mathbf{r}) \subset \mathcal{F} \Rightarrow \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i u_i(\mathbf{r}) \\ \text{Ortonormalidad: } (u_i, u_j) = \int d^3r\, u_i^*(\mathbf{r}) u_j(\mathbf{r}) = \delta_{ij} \end{cases}$$

Ejemplos de bases del espacio de Hilbert

REPASO

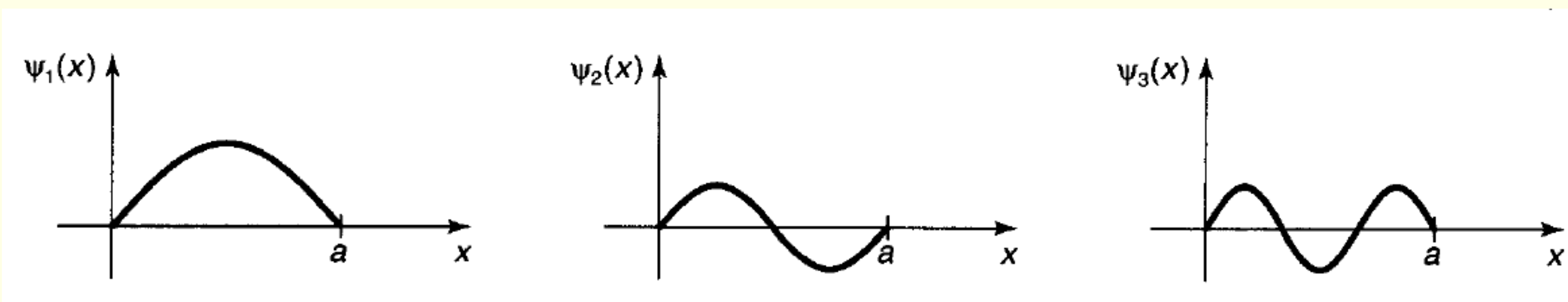
Pozo cuadrado infinito



$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2ma^2}$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right)$$

(Griffiths, Cap. 2)



Es una base ortonormal y completa para funciones definidas en el intervalo (0.a)

$$\int dx\, \psi_m^*(x)\psi_n(x) = \delta_{mn}$$

ortonormalidad

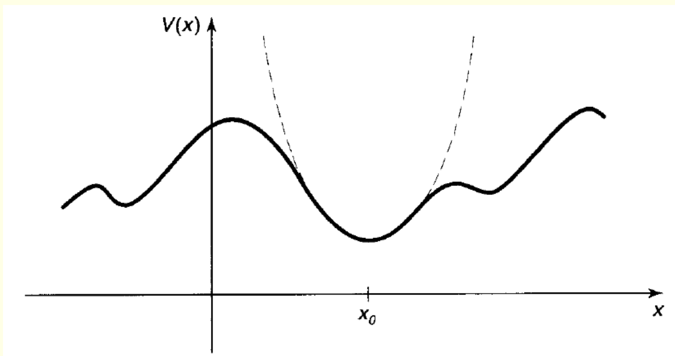
$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x - x')$$

clausura

Ejemplos de bases del espacio de Hilbert

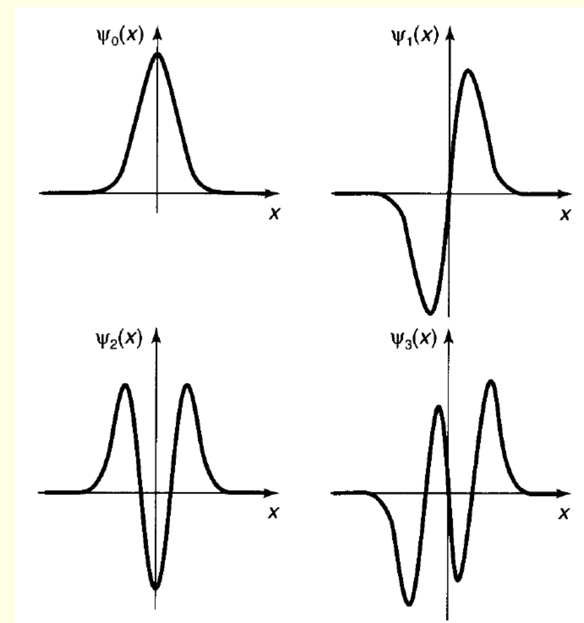
REPASO

Oscilador armónico



$$V(x) = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$$

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}$$



(Griffiths, Cap. 2)

Ejemplos de bases del espacio de Hilbert

Partícula libre: V(x) = 0

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi}{dx^2} = E\psi \quad \Rightarrow \quad \psi(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

Autoestados
Ondas planas

$$\int_{-\infty}^{\infty} d^3r\,|\psi(\mathbf{r})|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\,|e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} d^3r\,1 = \infty$$

Norma infinita
Habría que poner la partícula en una una caja o usar condiciones periódicas de contorno

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} F(k)e^{ikx}\,dk \Longleftrightarrow F(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-ikx}\,dx.$$

Transformada de Fourier, son base completa y ortogonal

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2 por no ser de cuadrado integrable

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

En el capítulo 1 del Cohen se presenta la transformada de Fourier de Ψ(x) con la siguiente notación:

Appendix I

FOURIER SERIES AND FOURIER TRANSFORMS

$$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \;\; \bar{\psi}(p)\, \mathrm{e}^{ipx/\hbar}$$

$$\bar{\psi}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \;\; \psi(x)\, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar}$$

Llamemos: $$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \mathrm{e}^{ipx/\hbar}$$ Onda plana con vector de onda: $k = p/\hbar$

$$|v_p(x)|^2 = \frac{1}{2\pi\hbar} \quad \Longrightarrow \quad v_p(x) \notin \mathscr{F}_x$$

Bases de "estados" que no pertenecen a L^2

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$\{ v_p(x) \}$ Es una "base" porque permite expandir cualquier estado:

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dp \; \bar{\psi}(p) \; v_p(x)$$

Los coeficientes de la expansión son la transformada de Fourier:

$$\bar{\psi}(p) = (v_p, \psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} dx \; v_p^*(x) \; \psi(x)$$

Pero, como $|v_p(x)|^2 = \dfrac{1}{2\pi\hbar}$ = constante, entonces $v_p(x)$ no es de cuadrado integrable

$\Rightarrow$ $v_p(x) \notin \mathscr{F}_x$

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

$\{v_p(x)\}$ es una “base” pero:

(1) No es de cuadrado integrable

(2) Indice p es contínuo, $-\infty < p < \infty$

Paralelismo entre una base “contínua” y una discreta

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \;\; \bar{\psi}(p) \;\; v_p(x) \longleftrightarrow \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\mathbf{r})$$

$$\bar{\psi}(p) \longleftrightarrow c_i$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p \longleftrightarrow \sum_i$$

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar}$$

Si usamos la expresión de la delta de Dirac:

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}k\, e^{iku} = \delta(u)$$

$$\Rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p\; v_p(x)\; v_p^*(x') = \frac{1}{2\pi}\int \frac{\mathrm{d}p}{\hbar}\, e^{i\frac{p}{\hbar}(x-x')} = \delta(x - x')$$

$$\sum_n \psi_n(x)\psi_n^*(x') = \delta(x - x')$$

Relación de clausura

$$(v_p, v_{p'}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; v_p^*(x)\; v_{p'}(x) = \frac{1}{2\pi}\int \frac{\mathrm{d}x}{\hbar}\, e^{i\frac{x}{\hbar}(p'-p)} = \delta(p - p')$$

$$\int dx\, \psi_m^*(x)\psi_n(x) = \delta_{mn}$$

“Ortonormalidad” en el sentido de Dirac

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

Para pasar a 3D:

$$v_p(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{ipx/\hbar} \longrightarrow v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \left(\frac{1}{2\pi\hbar}\right)^{3/2} e^{i\mathbf{p}.\mathbf{r}/\hbar}$$

$$\boxed{\begin{array}{ccc} i & \longleftrightarrow & \mathbf{p} \\ \sum_i & \longleftrightarrow & \int d^3p \\ \delta_{ij} & \longleftrightarrow & \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}') \end{array}}$$

Bases de “estados” que no pertenecen a L^2

Agrupando los resultados para el caso 3D:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3p \; \bar{\psi}(\mathbf{p}) \; v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$$

Expansión en la base $v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$

$$\bar{\psi}(\mathbf{p}) = (v_{\mathbf{p}}, \psi) = \int d^3r \; v^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r})$$

Coeficientes o componentes

$$(\varphi, \psi) = \int d^3p \; \bar{\varphi}^*(\mathbf{p}) \; \bar{\psi}(\mathbf{p})$$

Producto escalar en componentes

$$\int d^3p \; v_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \; v^*_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

Relación de clausura

$$(v_{\mathbf{p}}, v_{\mathbf{p}'}) = \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$$

Ortonormalidad à la Dirac

Otro ejemplo de base de estados que no pertenecen a L^2:

Base de deltas de Dirac en la posición

Base de deltas de Dirac en la posición

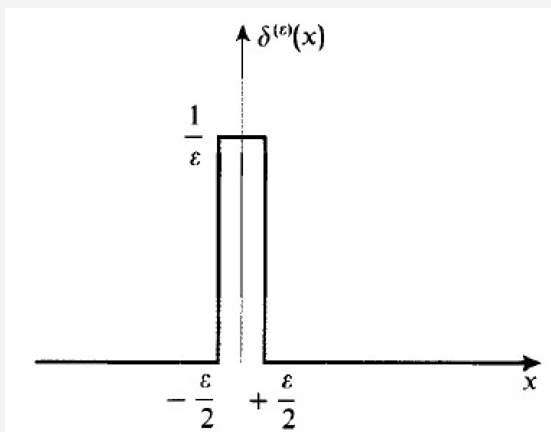
Consideremos las “funciones” de **r** etiquetadas por $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$:

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

Appendix II

THE DIRAC δ-“FUNCTION”

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \notin \mathscr{F}$$



$$\xrightarrow{\varepsilon \longrightarrow 0} \quad \delta(x)$$

Desplazada a $x_0 : \delta(x - x_0)$

Base de deltas de Dirac en la posición

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

No es de cuadrado integrable $\longrightarrow$ $\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \notin \mathscr{F}$

Pero pensemos en lo siguiente:

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \; \psi(\mathbf{r}_0) \; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

coeficiente

Nos sirve como **base** para expandir cualquier **función de onda** de cuadrado integrable.

Base de deltas de Dirac en la posición

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \; \psi(\mathbf{r}_0) \; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

Reciprocamente:

$$\psi(\mathbf{r}_0) = \int d^3r \; \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r})$$

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \; \psi(\mathbf{r}_0) \; \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) = (\xi_{\mathbf{r}_0}, \psi) = \int d^3r \; \xi^*_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \; \psi(\mathbf{r})$$

Base de deltas de Dirac en la posición

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

Paralelismo entre la base de deltas y una base discreta:

$$\{\, \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \,\} \longleftrightarrow \{\, u_i(\mathbf{r}) \,\}$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \int d^3r_0 \; \psi(\mathbf{r}_0) \; \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \longleftrightarrow \psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i \, u_i(\mathbf{r})$$

$$\psi(\mathbf{r}_0) \longleftrightarrow c_i$$

$$\int d^3r_0 \longleftrightarrow \sum_i$$

Base de deltas de Dirac en la posición

$$\xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$$

Paralelismo entre la base de deltas y una base discreta:

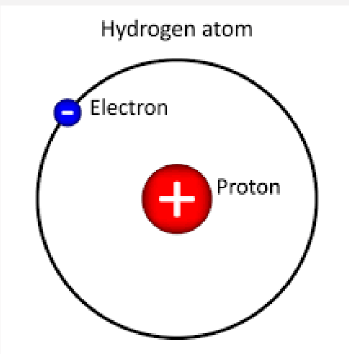
$$(\varphi, \psi) = \int d^3r_0 \;\; \varphi^*(\mathbf{r}_0) \;\; \psi(\mathbf{r}_0) \quad \longleftrightarrow \quad (\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$$

$$\int d^3r_0 \; \xi_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}) \;\; \xi^*_{\mathbf{r}_0}(\mathbf{r}') = \int d^3r_0 \;\; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \;\; \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad \longleftrightarrow \quad \sum_i u_i(\mathbf{r}) \;\; u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

$$(\xi_{\mathbf{r}_0}, \xi_{\mathbf{r}'_0}) = \int d^3r \;\; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \;\; \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_0) = \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}'_0) \quad \longleftrightarrow \quad (u_i, u_j) = \delta_{ij}$$

Base de autoestados del Hamiltoniano del **átomo de hidrógeno**

Los autoestados del Hamiltoniano de un sistema forman una base de su espacio de Hilbert



$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\right]\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

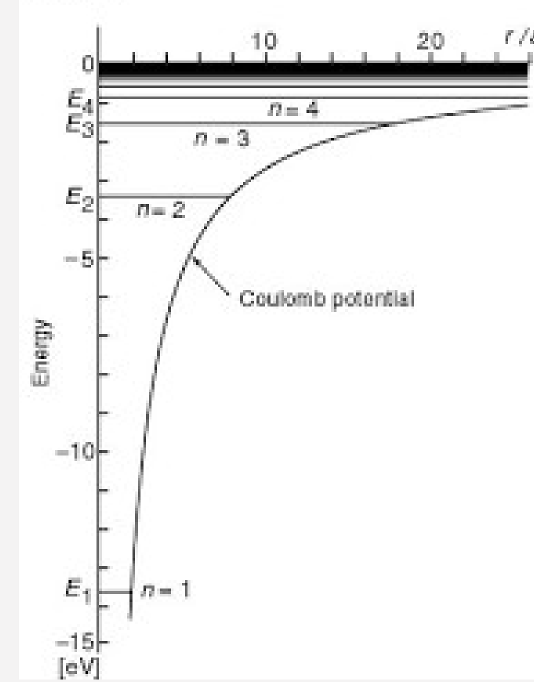
$$\boxed{i = (n, l, m)}$$

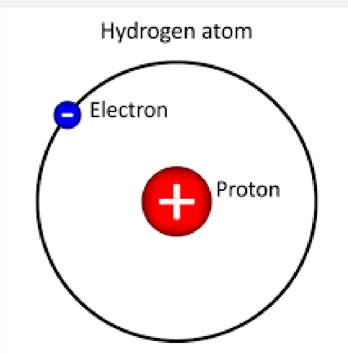
$$\psi_{nlm} = \sqrt{\left(\frac{2}{na}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}}\, e^{-r/na}\left(\frac{2r}{na}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na}\right) Y_l^m(\theta,\phi).$$

Base de autoestados del Hamiltoniano del átomo de hidrógeno

$$\left[-\frac{\hbar^2\nabla^2}{2m}-\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\frac{1}{r}\right]\psi(\mathbf{r})=E\psi(\mathbf{r})$$

Fig. (B)





$$\psi_{nlm}(\mathbf{r})=R_{nl}(r)Y_l^m(\theta,\phi)$$

Parte discreta de la base:

$$\boxed{u_i(\mathbf{r}), i=(n,l,m)}$$

Base mixta, discreta y contínua:

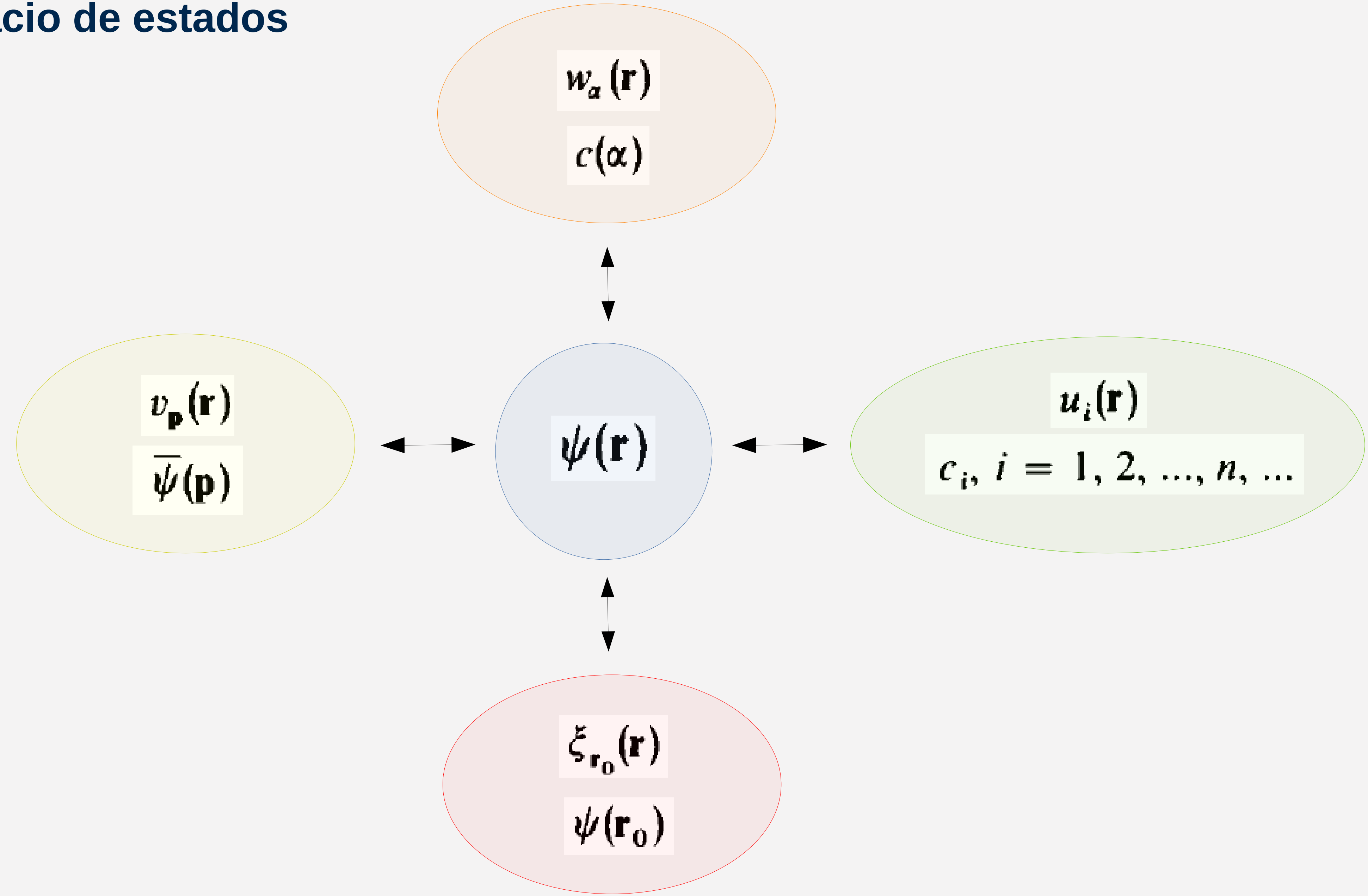
$$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$$
$$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha-\alpha')$$
$$(u_i, w_\alpha) = 0$$

Resumen de bases discretas y contínuas

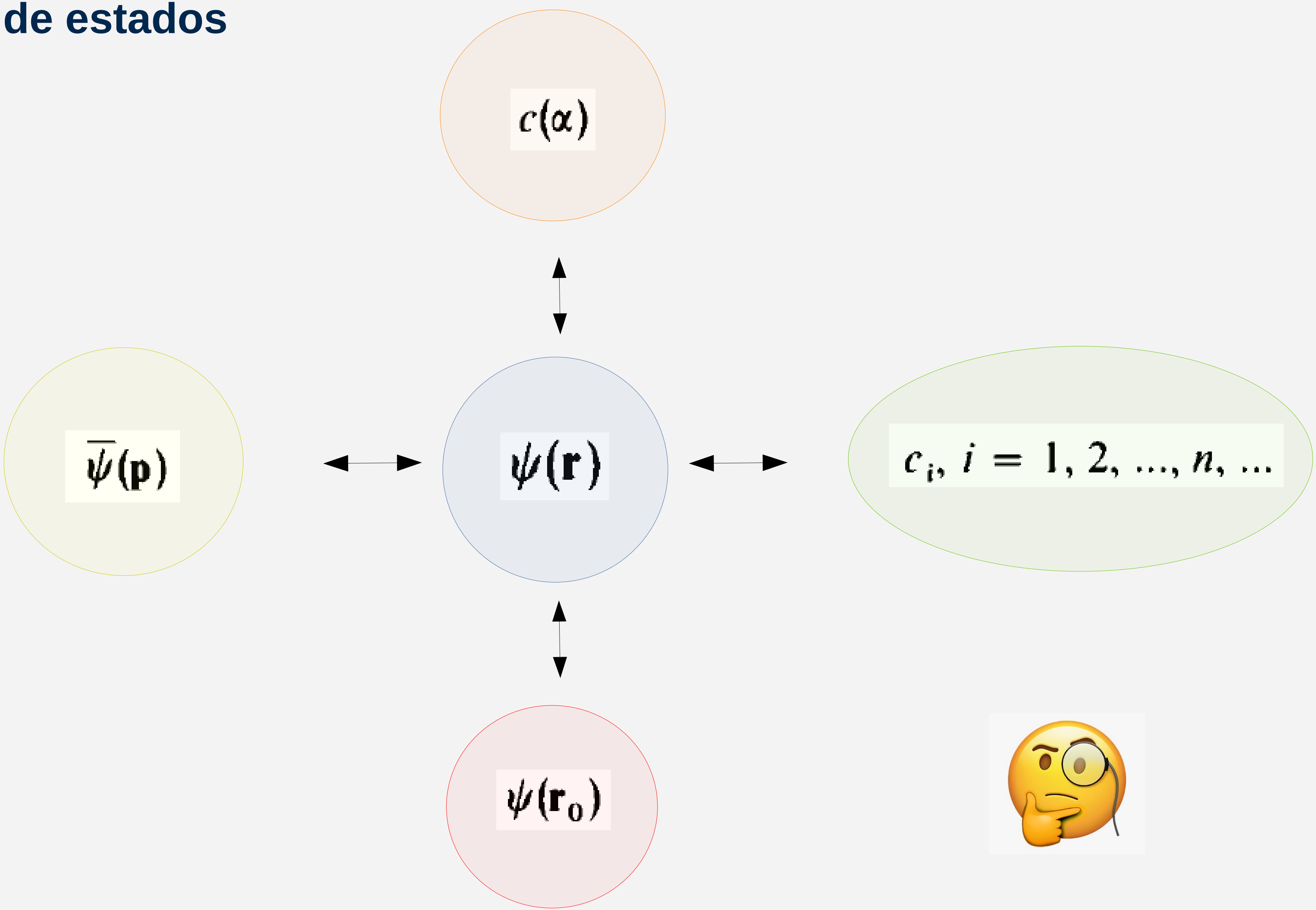
	Discrete basis $\{ u_i(\mathbf{r}) \}$	Continuous basis $\{ w_\alpha(\mathbf{r}) \}$
Ortho-normalization relation	$(u_i, u_j) = \delta_{ij}$	$(w_\alpha, w_{\alpha'}) = \delta(\alpha - \alpha')$
Closure relation	$\sum_i u_i(\mathbf{r})\; u_i^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$	$\int \mathrm{d}\alpha\;\; w_\alpha(\mathbf{r})\;\; w_\alpha^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$
Expansion of a wave function $\psi(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i c_i\;\; u_i(\mathbf{r})$	$\psi(\mathbf{r}) = \int \mathrm{d}\alpha\;\; c(\alpha)\;\; w_\alpha(\mathbf{r})$
Expression for the components of $\psi(\mathbf{r})$	$c_i = (u_i, \psi) = \int d^3r\;\; u_i^*(\mathbf{r})\;\; \psi(\mathbf{r})$	$c(\alpha) = (w_\alpha, \psi) = \int d^3r\;\; w_\alpha^*(\mathbf{r})\;\; \psi(\mathbf{r})$
Scalar product	$(\varphi, \psi) = \sum_i b_i^* c_i$	$(\varphi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha\;\; b^*(\alpha)\;\; c(\alpha)$
Square of the norm	$(\psi, \psi) = \sum_i \lvert c_i \rvert^2$	$(\psi, \psi) = \int \mathrm{d}\alpha\; \lvert c(\alpha) \rvert^2$

Espacio de estados

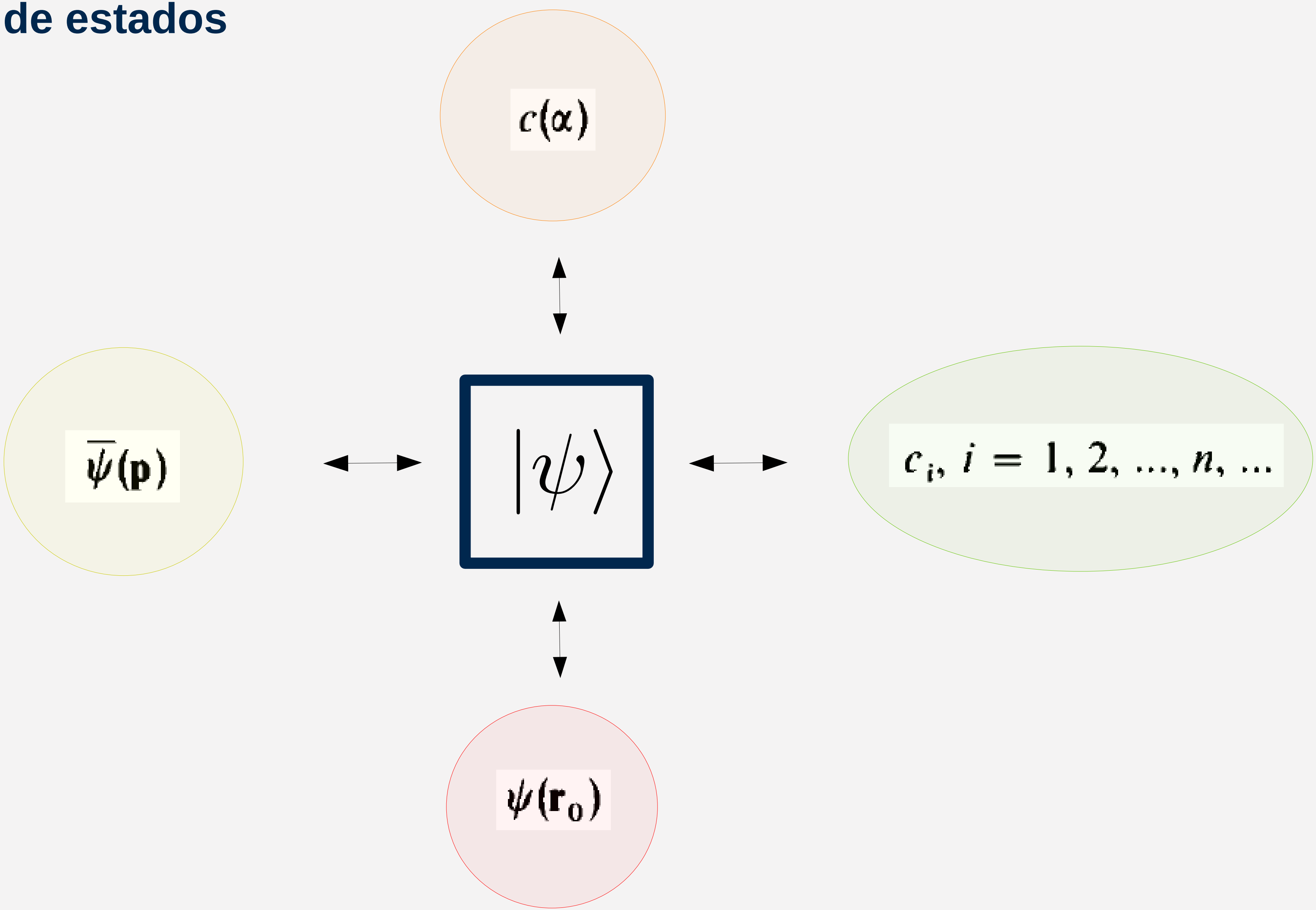
Espacio de estados



Espacio de estados



Espacio de estados



Espacio de estados

$|\psi\rangle$ es el **vector de estado** de la partícula

$|\psi\rangle \in \mathcal{E}_{\mathbf{r}}$ **Espacio de estados** de la partícula que se mueve en el espacio de 3D

Nos permitirá generalizar: $|\psi\rangle \in \mathcal{E}$

Notación de Dirac

Notación de Dirac

Espacio de estados, espacio de Hilbert: $\mathcal{E}$

Los estados de la partícula son vectores-ket, o simplemente **kets**: $\left|\ \ldots\right\rangle$

Ejemplos:

$$\begin{cases} |\varphi_n\rangle = |n\rangle & \text{Pozo cuántico unidimensional} \\ |\psi_{nlm}\rangle = |nlm\rangle & \text{Atomo de hidrógeno} \\ |\mathbf{k}\rangle & \text{Onda plana con vector de onda } \mathbf{k} \end{cases}$$

En LaTeX: | \psi \rangle

Notación de Dirac

Espacio de estados, espacio de Hilbert: $\mathcal{E}$

Hasta ahora conocemos este espacio de Hilbert:

$$\psi(\mathbf{r}) \in \mathscr{F} \iff |\psi\rangle \in \mathscr{E}_{\mathbf{r}}$$

$\mathscr{F}$ and $\mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ are isomorphic,

Otro espacio de Hilbert similar: $\mathscr{E}_{\mathbf{x}}$: $|\psi\rangle \iff \psi(x)$

Notación de Dirac

Producto escalar de dos kets $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle)$ → Número complejo

La definición del producto escalar debe satisfacer propiedades análogas a:

$$(\varphi, \psi) = (\psi, \varphi)^*$$
$$(\varphi, \lambda_1\psi_1 + \lambda_2\psi_2) = \lambda_1(\varphi, \psi_1) + \lambda_2(\varphi, \psi_2)$$
$$(\lambda_1\varphi_1 + \lambda_2\varphi_2, \psi) = \lambda_1^*(\varphi_1, \psi) + \lambda_2^*(\varphi_2, \psi)$$

Para los kets $|\psi\rangle \in \mathscr{E}_{\mathbf{r}}$ podemos recurrir a la definición de producto escalar de las funciones de onda: $(|\varphi\rangle, |\psi\rangle) = (\varphi, \psi) = \int d^3r\, \varphi^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$

Resumen de la Clase 2

En esta clase vimos:

- Base de estados no normalizables con índice contínuo: ondas planas
- Ortonormalidad à la Dirac para bases con índice contínuo
- Base de deltas de Dirac en posición
- Base mixta: parte discreta + parte contínua
- Espacio de estados
- Notación de Dirac
- Producto escalar de kets