



Universidad de Pamplona
Facultad de Ciencias Básicas
Departamento de Física.
Tesis

UN ENFOQUE MATEMÁTICO DE LA MECÁNICA CUÁNTICA

Jaime Nicolás González Rojas

Documento presentado al

Programa de física

como requisito para optar por el título de

Físico

Directora: Liliana Katherine Esquivel Mora.

Noviembre 2021

Resumen

La física y la matemática son dos ciencias que han caminado de la mano en su desarrollo. El tratamiento axiomático de Dirac- Von Neumann de la mecánica cuántica no relativista es el ejemplo arquetípico de la interacción dual entre las teorías físicas y el desarrollo de las ideas matemáticas. En este trabajo se encuentra un estudio de las matemáticas necesarias para entender el formalismo cuántico presentado por Dirac y Von Neumann; entre tanto, se muestra la diferencia fundamental que existe entre la mecánica cuántica y la mecánica clásica.

Por otra parte, se expone de forma corta la formulación de Feynman de la mecánica cuántica que normalmente no se incluye en el contenido de los cursos de cuántica del pregrado.

Finalmente, se exploró una nueva formulación de la mecánica cuántica dada por N.Laskin, donde se generaliza la ecuación de Schrödinger mediante los procesos de Lévy.

Agradecimientos

En primera instancia, quiero agradecer a la Dra. Liliana Esquivel, gracias a ella fue posible la realización de esta tesis, le agradezco su actitud siempre dispuesta, su conocimiento brindado, las valiosas oportunidades que me dio y sobre todo su infinita paciencia para que, en mí, pudiesen quedar consagrados los temas tratados.

Agradezco de manera especial, a mi alma mater por ayudarme a construir un futuro mejor, en especial, al programa de Física; de igual manera, gracias a mis profesores de la materia de mecánica cuántica, por mostrarme que la física esta más allá de hacer cálculos, ellos me brindaron bases sólidas que fueron fundamentales en la elaboración de esta tesis.

También, quiero agradecer a mi novia Evelin Gómez por estar en los momentos más difíciles y motivarme a ser un mejor profesional, además de ser una gran editora; por otra parte, quiero dar gracias a mi gran amigo Yorlin García, por brindarme su conocimiento y apoyo cuando más lo necesite.

Gracias de igual manera, a mi padre, sin su apoyo económico no hubiera sido posible la culminación de este trabajo, ni la realización de mi carrera académica; a mi madre por estar conmigo estos años de manera incondicional. Gracias de inmenso corazón, a mi familia por su apoyo emocional.

A todos los nombrados y a los que no lo hice, gracias infinitas. Su apoyo, conocimiento, regaños, consejos y demás, harán parte por siempre de este proceso académico.

Índice general

| | |
|--|-----------|
| Resumen | I |
| Agradecimientos | II |
| 1. Introducción | 2 |
| 2. Mecánica Clásica | 6 |
| 2.1. El principio de mínima acción | 8 |
| 2.2. Ecuaciones de Hamilton | 11 |
| 3. Fundamentos matemáticos | 13 |
| 3.1. Espacios de probabilidad | 13 |
| 3.1.1. Espacios de Medida | 13 |
| 3.1.2. Integrabilidad | 15 |
| 3.2. Espacios de Hilbert | 16 |
| 3.3. Operadores Lineales | 18 |
| 3.3.1. Operadores Lineales Acotados | 19 |
| 3.3.2. Operadores no acotados | 22 |
| 3.3.3. Teoría espectral de operadores | 26 |
| 4. Axiomas de Dirac Von-Neumann | 31 |
| 4.1. Axiomatización | 32 |
| 4.2. Relaciones de incertidumbre de Heisenberg | 35 |
| 4.3. Dinámica | 35 |
| 4.4. Cuantización | 38 |
| 4.4.1. Partícula Libre | 40 |
| 5. Ecuación de Schrödinger | 44 |
| 5.1. Caracterización del Potencial | 45 |
| 5.1.1. Caracterización del espectro | 46 |
| 5.1.2. Teorema del Virial | 47 |
| 5.2. Ecuación de Schrödinger unidimensional | 48 |

| | |
|--|-----------|
| 5.2.1. Funciones de Jost | 48 |
| 5.3. Partícula Libre | 49 |
| 5.4. Oscilador Armónico | 50 |
| 6. Formulación de integral de caminos de la mecánica cuántica | 53 |
| 6.1. Integral de Camino de Feynman | 54 |
| 6.1.1. Solución Fundamental de la Ecuación de Schrödinger | 54 |
| 6.1.2. Integral de camino de Feynman en el espacio fase | 58 |
| 6.1.3. De la integral de camino de Feynman a la ecuación de Schrödinger | 61 |
| 6.1.4. Integral de Camino de Feynman en el espacio de configuración | 63 |
| 6.1.5. Varios grados de Libertad | 65 |
| 6.2. Integral de Camino de Feynman para el oscilador armónico | 66 |
| 6.2.1. Integración Gaussiana | 66 |
| 6.2.2. Propagador del oscilador armónico | 66 |
| 7. Mecánica cuántica fraccionaria | 70 |
| 7.1. De la integral de camino de Feynman a la ecuación fraccionaria de Schrödinger | 71 |
| 7.2. Hermiticidad del operador Hamiltoniano fraccional | 73 |
| 7.3. Ley de conservación de la paridad para la mecánica cuántica fraccionaria | 74 |
| 8. Conclusiones | 75 |
| Bibliografía | 77 |
| A. Mas matemática | 81 |

1. Introducción

La motivación principal de este trabajo, son los diferentes aportes que han realizado los científicos a la física a lo largo de la historia, esto ha contribuido en el desarrollo de la humanidad y del conocimiento, como dijo Carl Sagan "Somos el medio para que el cosmos se conozca a sí mismo". También me motivó el hecho de trabajar con la Dra. Liliana Esquivel, teniendo en cuenta que su trabajo titulado como "Neumann problem for nonlinear Schrödinger equation with the Riesz fractional derivative operator", me pareció muy interesante a pesar de no tener los conocimientos suficientes para entenderlo. Para la mayor comprensión matemática de la mecánica clásica, hice parte del curso " Introducción a la teoría de oscilaciones y ondas" en el instituto IMPA de Brasil, dictado por el Dr. Alexei A. Mailybaev.

Desde sus inicios, la mecánica cuántica ha permitido el cálculo de propiedades y comportamientos de sistemas físicos. Generalmente, se aplica a sistemas nanoscópicos como pueden ser moléculas, átomos, partículas subatómicas, entre otros. De esta misma manera, se ha demostrado que es válido para moléculas mucho más complejas con miles de átomos [25]; con base a esto, las predicciones de esta teoría se han verificado experimentalmente con un grado de precisión extremadamente alta.

Su principal característica es que, por lo general, no puede predecir con certeza lo que sucederá, sino, solo ofrecer probabilidades de eventos posibles. Matemáticamente, una probabilidad se encuentra: tomando el cuadrado del valor absoluto de un número complejo, conocido como amplitud de probabilidad. Esto se conoce como la regla de Born [14], que lleva el nombre del físico Max Born. Por ejemplo, una partícula cuántica como un electrón puede describirse mediante una función de onda, que asocia a una región del espacio una amplitud de probabilidad.

Entonces, al aplicar la regla de Born[14] a estas amplitudes, se obtiene una función de densidad de probabilidad de la posición con la que se encontrará el electrón, cuando se realice un experimento para medirlo. Esto es lo mejor que puede hacer la teoría; no puede decir con certeza dónde se encontrará el electrón. Conceptualmente, la ecuación de Schrödinger[49] es la contraparte cuántica de en la mecánica clásica del las ecuaciones de Euler-Lagrange[31]. Dado un conjunto de condiciones iniciales conocidas, las ecuaciones de Euler-Lagrange hacen una predicción matemática sobre, qué camino tomará un sistema físico dado a lo largo del tiempo. La ecuación de Schrödinger, da la evolución en el tiempo de una función de onda y es la caracterización en la mecánica cuántica de un sistema físico aislado.

Una consecuencia de las reglas matemáticas de la mecánica cuántica, es un compromiso en la pre-

dictibilidad entre diferentes cantidades medibles. La forma más convencional de esto es el principio de incertidumbre de Heisenberg[23], este expresa, que no importa cómo se prepare una partícula cuántica o cuán cuidadosamente se dispongan los experimentos sobre ella, es imposible tener una predicción precisa para una medición de su posición y también, al mismo tiempo, para una medición de su momento.

Por otra parte, una consecuencia más de las reglas matemáticas de la mecánica cuántica, es el fenómeno de la interferencia cuántica, este generalmente se representa mediante el experimento de la doble rendija, donde la función de onda interfiere consigo misma. Una de las versiones de este experimento fue ideada por Young en 1801[59], para determinar la naturaleza de la luz, se basaba en usar una fuente de luz coherente, para iluminar una placa perforada por dos rendijas paralelas, en esta la luz pasa a través de las rendijas, para luego observar en una pantalla detrás de la placa. En cuanto a su explicación, se puede decir que, la naturaleza ondulatoria de la luz hace que las ondas de luz, que pasan a través de las dos rendijas interfieran, produciendo bandas brillantes y oscuras en la pantalla, un resultado que no se obtendría si la luz estuviera compuesta de partículas clásicas. Así mismo, sin embargo, la luz siempre se absorbe en la pantalla en puntos discretos, como partículas individuales en lugar de ondas; el patrón de interferencia aparece a través de la densidad variable de estos impactos de partículas en la pantalla.

En algunas versiones un poco más sofisticadas del experimento, donde incluyen detectores en las rendijas, encuentran, que cada fotón detectado pasa a través de una rendija como lo haría una partícula clásica, y no, a través de ambas rendijas como lo haría una onda[15]. Sin embargo, lo que dejan en evidencia estos experimentos, es que las partículas no forman el patrón de interferencia, si uno detecta por qué rendija pasan. Basados en esto, se encuentra que otras partículas de escala atómica, como los electrones, presentan el mismo comportamiento cuando se disparan hacia una doble rendija, dicho comportamiento se conoce como dualidad onda-partícula.

Otro fenómeno contrario a la intuición, que es predicho por la mecánica cuántica, es el tunelamiento cuántico[39], esta trata de una partícula que choca contra una barrera de potencial, afirmando que esta puede cruzarla, incluso si su energía cinética es menor que el máximo del potencial. En la mecánica clásica, esta partícula quedaría atrapada; La tunelización cuántica tiene varias consecuencias importantes, ya que permite, la desintegración radiactiva, la fusión nuclear en estrellas, aplicaciones como el microscopio de efecto túnel [4] y el diodo de túnel[11].

Existen muchos más efectos cuánticos que desafían el sentido común humano de la realidad que no serán tratados en este trabajo, aun así, no es posible presentar estos conceptos de una manera más que superficial, sin introducir las matemáticas reales involucradas; entendiéndolo de esta manera, que la comprensión de la mecánica cuántica requiere no solo manipular números complejos, sino también

álgebra lineal, ecuaciones diferenciales, teoría de grupos y otras asignaturas pertinentes y avanzadas.

Es por esto, que este trabajo se enfoca en exponer de una manera clara la formulación matemática de la mecánica cuántica[55], que permita una descripción rigurosa de la misma. Este formalismo matemático, utiliza principalmente una parte del análisis funcional, especialmente los espacios de Hilbert[26], que son una generalización de los espacios euclidianos. Estos se distinguen de los formalismos matemáticos, para las teorías físicas desarrolladas antes de principios del siglo XX mediante el uso de estructuras matemáticas abstractas, como los espacios de Hilbert de dimensión infinita, principalmente el espacio L^2 [56], y los operadores en estos espacios. En resumen, los valores de los observables físicos como la energía y la cantidad de movimiento ya no se consideraban valores de funciones en el espacio de fase, sino, valores propios, más precisamente como valores espectrales de operadores lineales en el espacio de Hilbert.

La primera formulación matemática completa de este enfoque, es conocida como los axiomas de Dirac-von Neumann, generalmente se atribuye al libro de John von Neumann de 1932 “Mathematical Foundations of Quantum Mechanics”[55], aunque Hermann Weyl anteriormente, había hecho referencia a los espacios de Hilbert en su libro 1927[58]. Se desarrolló en paralelo con un nuevo enfoque de la teoría matemática espectral basada en operadores lineales, en lugar de las formas cuadráticas que formuló David Hilbert, el cual, es el enfoque de una generación anterior.

Aunque las teorías de la mecánica cuántica continúan evolucionando hasta el día de hoy, existe un marco básico para la formulación matemática de la mecánica cuántica, que subyace a la mayoría de los enfoques y se remonta al trabajo matemático de John von Neumann. Posteriormente, se formularon nuevas teorías más sofisticadas, en particular este trabajo incluye la integral de camino de Feynman[13], caracterizada por ser una descripción en mecánica cuántica que generaliza el principio de acción en la mecánica clásica.

Esta descripción de la mecánica cuántica, reemplaza la noción clásica de una trayectoria clásica única para un sistema, con una suma o integral funcional sobre una infinidad de trayectorias cuánticas posibles, para calcular una amplitud cuántica o amplitud de probabilidad.

Así mismo, también podrá ser encontrada la ecuación fraccional de Schrödinger, que fue formulada primeramente por N. Laskin[33], cuya idea principal es tomar las trayectorias de tipo browniano[14], que es una trayectoria de tipo estocástico que se caracteriza por describir el movimiento de una partícula sumergida en un fluido, y generalizarlas naturalmente mediante los vuelos de Levy[34], que son procesos de Márkov, es decir, un proceso estocástico, cuya característica es no tener memoria.

Para mayor claridad en las ideas, en el primer capítulo se expondrá la teoría en su forma más general la mecánica clásica, de tal manera que se pueda hacer un paralelismo entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica. Como un segundo apartado, se expondrá la teoría matemática necesaria para

poder pasar al capítulo tres, que contiene una formulación rigurosa de la mecánica cuántica basada en los axiomas de Dirac-von Neumann. Luego, con las reglas básicas de la mecánica cuántica se exhibe el comportamiento onda-partícula mediante la ecuación de Schrödinger en el capítulo cuatro. Para finalizar, se presentan dos formas diferentes de formular la mecánica cuántica, por un lado, está la integral de camino de Feynman y por el otro la ecuación fraccionaria de Schrödinger, que se encontraran en el capítulo cinco y seis respectivamente.

2. Mecánica Clásica

La mecánica Lagrangiana introducida por Joseph Louis Lagrange en 1788[31], que consiste en encontrar el Lagrangiano de un sistema física que se denota con la letra mayúscula L , que se define como la energía cinética del sistema que se está analizando menos la energía potencial de ese sistema, en este caso la energía cinética está representada por la letra K , que es propia de las cosas que se mueven y la energía potencial por la letra V que refleja la energía cinética máxima que podría alcanzar un cuerpo si se lo libera en un instante concreto. Este Lagrangiano no es necesariamente una cantidad físicamente útil, es una cantidad matemáticamente útil ¿qué quiere decir esto? Básicamente, la energía cinética menos la energía potencial de un sistema no representa realmente nada físico, a diferencia de otra cantidad conocida como hamiltoniana que se define como la energía cinética más la energía potencial que puede ser considerado como la energía total del sistema pero el Lagrangiano es una cantidad matemáticamente útil, sin embargo, este nos permite encontrar las trayectorias que sigue la partícula, lo que nos interesa del Lagrangiano no es el camino en sí, sino el área que encierra debajo. Al valor de esta superficie se le conoce como Acción. Para entender la importancia de la acción, imagínese que nunca ha probado soltar una pelota

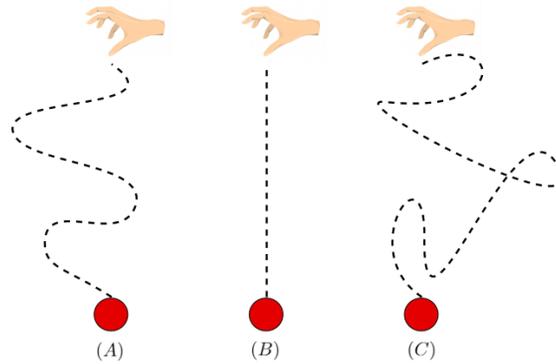


Figura 2.1: Algunos posibles caminos que una pelota podría recorrer de la mano al suelo.

no se sabe que trayectoria va a recorrer. Por lo que es posible imaginar todas las distintas maneras con las que podría recorrer la distancia entre el suelo y arriba. Cada una de estas trayectorias que han supuesto trae consigo unas energías cinéticas y potenciales distintas, que cambian de forma diferente con el paso del tiempo. Lo curioso es que, si obtiene el Lagrangiano de cada trayectoria, y de ahí, la acción de cada una, lo que se encuentra es que la trayectoria verdadera, la que ocurre en el mundo real, es la que tiene la acción es más pequeña. Lo que quiero decir es que, si se toma otra situación, como un péndulo, es posible comprobar que, de todas las formas de moverse que tiene la

partícula del péndulo, lo que se observa en la realidad es que la trayectoria que sigue la masa es la que tiene menor acción. Esto es conocido como el principio de mínima acción y lo que plantea es que todo cuerpo sigue una trayectoria que minimiza la acción, cuya acción es la menor de todas las posibles. Todo el universo, sin incluir a la mecánica cuántica, se mueve con la menor acción posible, es lo que se ha estado observando durante siglos. De hecho, cuando un físico tiene que enfrentarse a un problema, puede utilizar esto como ventaja.

Esta forma de trabajar dio lugar a una reformulación en la física: la mecánica analítica[21], una forma alternativa (y a veces mejor) a la mecánica newtoniana de abordar los problemas. Aunque se ha definido la acción dentro de la física clásica, lo cierto es que este principio también es válido dentro de la relatividad general[50] y las teorías clásicas de campos[32], como también en el electromagnetismo[27]. En ellos, el Lagrangiano y la acción toman formas muy distintas, pero el concepto sigue siendo el mismo: la acción debe ser mínima.

Por otro lado, se tiene la mecánica hamiltoniana que surgió en 1833 como una reformulación de la mecánica lagrangiana. Introducida por Sir William Rowan Hamilton[20]. Ambas teorías proporcionan interpretaciones de la mecánica clásica y describen los mismos fenómenos físicos.

La mecánica hamiltoniana tiene una estrecha relación con la geometría (en particular, la geometría simpléctica[41] y las estructuras de Poisson y sirve como vínculo entre la mecánica clásica y la cuántica. El análisis de Hamilton reveló una estructura matemática mucho más profunda de lo que se había entendido previamente, en particular la simetría entre el momento y la posición. Para entender esto, cuando se quiere construir una nueva teoría física, se deben garantizar tres principios básicos. El primero siendo la invarianza temporal, es decir que las leyes de la física son las mismas ayer, mañana o 30000 años en el futuro. El segundo principio se refiere a la invarianza traslacional, con esto lo que se pretende garantizar es que las leyes de la física son iguales en Colombia, como en marte o en Andrómeda. Y el tercer principio, es la invarianza rotacional, donde también es fundamental que cuando se realiza un experimento y luego se hace rotación en sentido de cualquier dirección, se deben obtener los mismos resultados como si no se hubiese rotado dicho experimento. Estos tres principios, conforman la importancia de la mecánica Hamiltoniana, que es permitir obtener cantidades físicas que son invariantes en el tiempo, a la traslación y la rotación. Los avances de Hamilton ampliaron enormemente la clase de problemas mecánicos que podían resolverse, y representan quizás la mayor adición que ha recibido la dinámica desde el trabajo de Isaac Newton y Lagrange. Si bien la mecánica hamiltoniana se basa en los mismos principios físicos que la mecánica de Newton y Lagrange, proporciona una nueva y poderosa técnica para trabajar con las ecuaciones de movimiento. Más importante aún, tanto el enfoque Lagrangiano como el hamiltoniano, que se desarrollaron inicialmente para describir el movimiento de sistemas discretos, han demostrado ser fundamentales para el estudio de sistemas clásicos continuos en física. Incluso

también, las técnicas encuentran uso en el electromagnetismo[27], la mecánica cuántica, teoría cuántica de la relatividad[3] y la teoría cuántica de campos[57].

2.1 El principio de mínima acción

La formulación más general de la ley del movimiento de los sistemas mecánicos es el principio de mínima acción (o principio de Hamilton). Según este principio, todo sistema mecánico está caracterizado por una función $L(q, \dot{q}, t)$ donde $\vec{q}, \dot{\vec{q}}$ son las coordenadas generalizadas y t es el tiempo, es definida:

$$L(q_1, q_2, \dots, q_n, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_n, t),$$

El movimiento de un sistema satisface la siguiente condición

Suponga que en los instantes $t = t_0$ y t_1 el sistema ocupa posiciones dadas, caracterizadas por el conjunto de coordenadas \vec{q} y $\dot{\vec{q}}$, el sistema se moverá entonces, entre las posiciones dadas por t_0 y t_1 de manera que la integral

$$S = \int_{t_0}^{t_1} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}, t) dt \quad (2.1)$$

tiene el valor mas pequeño posible. La función L se conoce como el lagrangiano del sistema y la integral (2.1) se le conoce como la acción.

Notese que la función L solo depende de \vec{q} y $\dot{\vec{q}}$, es decir, que no depende de las derivadas superiores. Esto se debe a que el estado de un sistema mecánico está completamente definido por sus coordenadas generalizadas y sus momentos generalizados. Ahora, es necesario determinar las trayectorias para las cuales la acción es un mínimo, por simplicidad se supondrá que el sistema solo tiene un grado de libertad q y su correspondiente \dot{q} momento generalizado. Entonces $q = q(t)$ será la trayectoria que minimiza (2.1), es decir, que si $q(t)$ se sustituye por otra trayectoria, entonces, S crecerá, luego

$$q(t) + \delta q(t), \quad (2.2)$$

donde $\delta q(t)$ es una función que es pequeña en todo el intervalo de t_0 a t_1 . Ya que los puntos extremos son fijos entonces se tiene que $\delta q(t_0) = \delta q(t_1) = 0$. Así, sustituyendo esta nueva función se tiene que la variación de S es

$$\int_{t_0}^{t_1} L(q + \delta q, \dot{q} + \delta \dot{q}, t) dt - \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t) dt.$$

El desarrollo en serie de esta diferencia en potencias de δq y $\delta \dot{q}$ comienza por términos de primer orden. La condición necesaria del mínimo de S es que el conjunto de estos términos se anule; se le llama primera variación de la integral. Así, el principio de mínima acción puede escribirse:

$$\delta S = \delta \int_{t_0}^{t_1} L(q, \dot{q}, t) dt = 0, \quad (2.3)$$

y haciendo la variación

$$\int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} \delta q + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta \dot{q} \right) dt = 0.$$

Teniendo en cuenta que $\delta \dot{q} = d/dt(\delta q)$, se integra el segundo término por partes y se obtiene:

$$\delta S = \left[\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \delta q \right]_{t_0}^{t_1} + \int_{t_0}^{t_1} \left(\frac{\partial L}{\partial q} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) \delta q dt = 0.$$

Como los puntos extremos son fijos, entonces el primer término se anula, así solo queda la integral, la cual debe anularse para todo valor de δq , esto solo es posible si el integrando es idénticamente nulo, de lo cual se obtiene la ecuación

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}} \right) - \frac{\partial L}{\partial q} = 0.$$

Si hay varios grados de libertad, las n funciones diferentes $q_n(t)$ deben variar independientemente. Es decir, que se obtienen n ecuaciones de la forma

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, n. \quad (2.4)$$

Si se conoce el lagrangiano de un sistema mecánico dado, entonces las ecuaciones (2.4) establecen la relación entre las aceleraciones, las velocidades y las coordenadas, es decir, son las ecuaciones del movimiento del sistema. Las ecuaciones (2.4) son conocidas como **las ecuaciones de Euler-Lagrange**.

Desde el punto de vista matemático, las ecuaciones (2.4) forman un sistema de n ecuaciones diferenciales de segundo orden con n funciones desconocidas $q_i(t)$. La solución general del sistema contiene $2n$ constantes arbitrarias. Para determinarlas y, por tanto, para definir completamente el movimiento del sistema mecánico, es necesario conocer las condiciones iniciales que caractericen el estado del sistema en un instante dado, por ejemplo los valores iniciales de las coordenadas y de los momentos.

Ejemplo 2.1.1. Partícula libre

El espacio de configuración para una partícula libre es $M = \mathbb{R}^3$, y puede deducirse del principio de relatividad de Galileo que

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2$$

donde $m > 0$ es la masa de la partícula y $\dot{\vec{r}}^2 = |\dot{\vec{r}}|^2$ es el cuadrado de la longitud del vector velocidad $\dot{\vec{r}}$ pertenece a $T_{\vec{r}}\mathbb{R}^3 \cong \mathbb{R}^3$. Las ecuaciones de Euler-Lagrange están dadas por la ley de inercia de

Newton

$$\ddot{\vec{r}} = 0$$

Ejemplo 2.1.2. Gravitacion universal

De acuerdo a la ley de gravitacion de Newton, la energia potencial de la fuerza gravitacional entre dos particulas con masas m_a y m_b es

$$V(\vec{r}_a - \vec{r}_b) = -G \frac{m_a m_b}{|\vec{r}_a - \vec{r}_b|},$$

donde G es la constante gravitacional. La configuracion espacial de N particulas con interaccion gravitacional es

$$M = \{(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_n)\} \in \mathbb{R}^{3N} : \vec{r}_a \neq \vec{r}_b \text{ para } a \neq b, a, b, = 1, \dots, N\}$$

Ejemplo 2.1.3. Particula en un campo potencial externo

En este caso $M = \mathbb{R}^3$ y

$$L = \frac{1}{2} m \dot{\vec{r}}^2 - V(\vec{r}, t),$$

donde la energia potencial puede depender explicitamente del tiempo. Las ecuaciones de movimiento son las ecuaciones de Newton

$$m \ddot{\vec{r}} = \vec{F} = - \frac{\partial V}{\partial \vec{r}}$$

si $V = V(|\vec{r}|)$ es una funcion que solo depende de la distancia $|\vec{r}|$, el campo potencial es llamado central.

Ejemplo 2.1.4. Particula cargada en un campo electromagnetico

Se considera una particula de carga e y masa m en \mathbb{R}^3 moviendose en un campo electromagnetico independiente del tiempo con potencial escalar y vectorial $\varphi(\vec{r})$ y $\vec{A}(\vec{r}) = (A_1(\vec{r}), A_2(\vec{r}), A_3(\vec{r}))$. El lagrangiano tiene la forma

$$L = \frac{m \dot{\vec{r}}^2}{2} + e \left(\frac{\dot{\vec{r}} \cdot \vec{A}}{c} - \varphi \right),$$

donde c es la velocidad de la luz. Las ecuaciones de Euler-Lagrange dan las ecuaciones de Newton con la fuerza de Lorentz,

$$m \ddot{\vec{r}} = e \left(\vec{E} + \frac{\dot{\vec{r}}}{c} \times \vec{B} \right),$$

donde \times es el producto cruz de vectores en \mathbb{R}^3 , y

$$\vec{E} = - \frac{\partial \varphi}{\partial \vec{r}} \text{ y } \vec{B} = \text{curl} A$$

son el campo electrico y magnetico respectivamente.

Ejemplo 2.1.5. Pequeñas Oscilaciones

Considere un partícula de masa m con n grados de libertad moviendose en un potencial $V(\vec{q})$, y suponga que la energia potencial U tiene un minimo en $\vec{q} = \vec{0}$. Expandiendo $V(\vec{q})$ en series de Taylor alrededor de 0 y manteniendo solo terminos cuadraticos, se obtiene un sistema lagrangiano que describe pequeñas oscilaciones del equilibrio, Explicitamente

$$L = \frac{1}{2}m\dot{\vec{q}}^2 - V_o(\vec{q}),$$

donde V_o es una forma cuadratica positiva definida sobre \mathbb{R}^n dado por

$$V_o(\vec{q}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n \frac{\partial^2 V}{\partial q^i \partial q^j}(0) q^i q^j.$$

ya que cada forma cuadratica puede ser diagonalizad por una transformacion ortogonal, puede asumirse desde el principio que las coordenadas (q^1, \dots, q^n) se eligen de modo que $V_o(\vec{q})$ es diagonal y

$$L = \frac{1}{2}m \left(\dot{\vec{q}}^2 - \sum_{i=1}^n \omega_i^2 (q^i)^2 \right), \tag{2.5}$$

donde $\omega_1, \dots, \omega_n > 0$. Estas coordenadas \vec{q} son llamadas coordenadas normales. En coordenadas normales las ecuaciones de Euler-Lagrange toman la forma

$$\ddot{q}^i + \omega_i^2 q^i = 0, \quad i = 1, \dots, n,$$

y describe n osciladores armonicos desacoplados con frecuencias $\omega_1, \dots, \omega_n$.

2.2 Ecuaciones de Hamilton

La formulación de las leyes de la Mecánica con la ayuda de la lagrangiana (y de las ecuaciones de Lagrange que de ella se deducen), presupone que el estado mecánico del sistema está determinado dando sus coordenadas y velocidades generalizadas, Sin embargo, éste no es el único método posible; la descripción del estado de un sistema en función de sus coordenadas y momentos generalizados presenta un cierto número de ventajas, especialmente en el estudio de diferentes problemas generales de mecánica. Entonces se deben deducir las ecuaciones del movimiento correspondientes a esta formulación.

El paso de un conjunto de variables independientes a otro puede realizarse mediante lo que se llama en matemáticas transformación de Legendre. En el presente caso esta transformación toma la forma siguiente. La diferencial total del lagrangiano como función de las coordenadas y de las velocidades

es

$$dL = \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i.$$

Esta expresión puede escribirse,

$$dL = \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i, \quad (2.6)$$

ya que las derivadas $\partial L/\partial \dot{q}_i$, son los momentos generalizados, y $\partial L/\partial q_i = \dot{p}_i$, por las ecuaciones de Euler Lagrange (2.4). Escribiendo el segundo término de (2.6) en la forma de

$$\sum_i p_i d\dot{q}_i = d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) - \sum_i \dot{q}_i dp_i,$$

llevando la diferencial total $d(\sum_i p_i \dot{q}_i)$, al primer miembro, y cambiando los signos, se obtiene (2.6):

$$d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right) = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i.$$

La cantidad bajo el signo diferencial es la energía del sistema, expresada en función de las coordenadas y de los momentos, esta se conoce como la función de **Hamilton** o **hamiltoniano** del sistema:

$$H(p, q, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L. \quad (2.7)$$

De la ecuación

$$dH = -\sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i \dot{q}_i dp_i, \quad (2.8)$$

en la cual las variables independientes son las coordenadas y los momentos, se obtienen las ecuaciones

$$\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i} \quad (2.9)$$

Estas son las ecuaciones de movimiento en las variables p y q , y se llaman ecuaciones de **Hamilton**. Estas, constituyen un conjunto de $2n$ ecuaciones diferenciales de primer orden, entre las $2n$ funciones desconocidas $p_i(t)$ y $q_i(t)$, que sustituyen las n ecuaciones de segundo orden obtenidas por el método de Lagrange. A causa de su sencillez y simetría de forma se les llama ecuaciones canónicas.

3. Fundamentos matemáticos

Las matemáticas y la física son sin lugar a dudas dos campos estrechamente relacionados. Para los físicos, las matemáticas son su caja de herramientas, la cual utilizan para responder preguntas. Mientras que, para los matemáticos, la física puede ser una fuente de interesantes problemas, con conceptos teóricos como la relatividad general[50] y la teoría cuántica[48] proporcionando un ímpetu para que los matemáticos desarrollen nuevas matemáticas. En este capítulo se presentarán aquellos conceptos matemáticos necesarios para entender algunas formulaciones de la mecánica cuántica.

3.1 Espacios de probabilidad

Es importante notar que los diferentes enfoques de la mecánica cuántica invocan diferentes significados de probabilidad de manera central. Pensar en la mecánica cuántica implica pensar en un espacio de probabilidad, curiosamente la mecánica cuántica, tal como se la entiende actualmente, en realidad no ayuda a elegir entre concepciones de probabilidad en competencia, ya que cada concepción tiene un hogar en una formulación cuántica u otra.

La teoría moderna de la probabilidad se basa en los axiomas propuestos por Kolmogorov, pero es importante observar que la base de dicha teoría, los espacios de probabilidad, pueden ser vistos como una particularización del concepto de espacio de medida.

3.1.1 Espacios de Medida

Sea Ω un conjunto no vacío, en adelante se denotará por 2^Ω , el conjunto potencia de Ω , o el conjunto de partes de Ω .

Definición 3.1.1 (σ -álgebra). Se dice que $\mathcal{F} \subseteq 2^\Omega$, es una σ -álgebra sobre Ω si cumple las siguientes propiedades:

$\sigma 1.$ $\emptyset \in \mathcal{F}$.

$\sigma 2.$ Si $A \in \mathcal{F}$, entonces $A^c = \Omega - A \in \mathcal{F}$.

$\sigma 3.$ Dada $\{A_n\}_{n=1}^\infty \subseteq \mathcal{F}$, se cumple que, $\bigcup_{n=1}^\infty A_n \in \mathcal{F}$.

La pareja (Ω, \mathcal{F}) se le conoce como espacio medible, y a los conjuntos de \mathcal{F} serán los conjuntos medibles.

Ejemplo 3.1.2.

1. Dado Ω un conjunto no vacío, $\mathcal{F}_1 = \{\emptyset, \Omega\}$, $\mathcal{F}_2 = 2^\Omega$ son σ -álgebras sobre Ω . \mathcal{F}_1 se conoce como σ -álgebra trivial y \mathcal{F}_2 como σ -álgebra discreta.

2. Sea $\Omega \neq \emptyset$, $\{\mathcal{F}_\alpha : \alpha \in A$ una familia de σ -álgebras sobre $\Omega\}$, entonces $\mathcal{F} = \bigcap_{\alpha \in A} \mathcal{F}_\alpha$ también es una σ -álgebra.
3. Considere $C = \{(a, b), -\infty \leq a \leq b < \infty\}$. $\mathfrak{B}(\mathbb{R}) = \sigma(C)$ que es el σ -álgebra generada¹ por intervalos (σ -álgebra de Borel), es decir, $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ es la σ -álgebra más pequeña que contiene a todos los intervalos.

Definición 3.1.3 (Medida). Dado (Ω, \mathcal{F}) un espacio medible. Una función de conjunto $\mu : \mathcal{F} \rightarrow \mathbb{R}$ se denomina **medida** si cumple:

- $\mu(\emptyset) = 0$.
- $\mu(A) \geq 0$ para todo $A \in \mathcal{F}$, es decir, μ no es negativo.
- Dada $\{A_n\}_{n=1}^\infty \subseteq \mathcal{F}$ tal que $A_n \cap A_m = \emptyset$, entonces $\mu\left(\bigcup_{n=1}^\infty A_n\right) = \sum_{n=1}^\infty \mu(A_n)$.

Se denomina espacio de medida a la tripleta $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$. En el caso especial que la medida total sea 1, es decir, $\mu(\Omega) = 1$, se dice que $(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$ es un **espacio de probabilidad**.

Ejemplo 3.1.4.

1. Considere $\Omega = \mathbb{N}$, $\mathcal{F} = 2^{\mathbb{N}}$, se define entonces la medida de conteo como:

$$\mu(A) = \begin{cases} |A| & \text{si } A \text{ es finito} \\ \infty & \text{si } A \text{ es infinito} \end{cases} .$$

Siendo $|A|$ la cantidad de elementos que existen en A .

2. Dada $\Omega \neq \emptyset$, $\mathcal{F} = 2^\Omega$ y $a \in \Omega$ se define la medida de Dirac como:

$$\delta_a(A) = \begin{cases} 1 & a \in A \\ 0 & a \notin A \end{cases} .$$

Esta es una medida de probabilidad.

3. Tomando $\Omega = \mathbb{R}$, $\mathcal{F} = \mathfrak{B}(\mathbb{R})$, la medida de Lebesgue es aquella única medida tal que la medida de los intervalos es igual a su longitud, esto es, $\mu(x, y) = y - x$.

¹Para $C \subseteq 2^\Omega$, se define $\mathcal{M} = \{\mathcal{F} : \mathcal{F} \text{ es } \sigma\text{-álgebra}, C \subseteq \mathcal{F}\}$, σ -álgebra generada por C y se denota por $\sigma(C) = \bigcap_{\mathcal{F} \in \mathcal{M}} \mathcal{F}$, $\sigma(C)$ es la σ -álgebra más pequeña que contiene a C

3.1.2 Integrabilidad

Definición 3.1.5 (Funciones Medibles). Dada $f : \Omega \rightarrow \mathbb{R}(\mathbb{C})$ se dice que f es medible si para todo abierto B en \mathbb{R} , la imagen inversa es

$$f^{-1}(B) = \{x \in \Omega : f(x) \in B\} \in \mathcal{F}.$$

Ejemplo 3.1.6 (Función característica). Sea A un conjunto medible en Ω , se define $\mathbb{I}_A : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ como:

$$\mathbb{I}_A(w) = \begin{cases} 1 & w \in A \\ 0 & w \notin A \end{cases}.$$

Así \mathbb{I}_A es una función medible y será llamada función característica de A .

En un espacio medible (Ω, \mathcal{F}) la función $s = \sum_{i=1}^n \alpha_i \mathbb{I}_{A_i}$, donde $A_i \in \mathcal{F}$, se denomina simple, un resultado importante en teoría de la integración es que cada función positiva medible puede ser vista como el límite de funciones simples².

Considere $s : X \rightarrow [0, \infty)$ una función simple medible, de la forma: $s = \sum_{i=1}^k \alpha_i \mathbb{I}_{A_i}$, siendo $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ diferentes valores en $[0, \infty)$, para $E \in \mathcal{F}$, se define

$$\int_E s d\mu = \sum_{i=1}^k \alpha_i \mu(A_i \cap E).$$

Cuando $\alpha_i = 0$ para algún i , y $\mu(A_i \cap E) = \infty$, se usara la convención de $0 \cdot \infty = 0$.

Si $f : \Omega \rightarrow [0, \infty)$ es una función medible, para $E \in \mathcal{F}$, se define

$$\int_E f d\mu = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_E s_n d\mu,$$

donde $\{s_n\}$ es una sucesión de funciones simples creciente que tiende a f puntualmente.

La expresión anterior es conocida como la **integral de Lebesgue** de f sobre E , con respecto a la medida μ . Es un numero entre $[0, \infty]$.

En el caso que f sea una función que toma valores sobre $(-\infty, \infty)$, se define

$$\int_E f d\mu = \int_E f^+ d\mu - \int_E f^- d\mu,$$

con $f^+ = \max\{f, 0\}$ y $f^- = \max\{-f, 0\}$ siendo la parte positiva y negativa de f respectivamente³, esta definición aplica en el caso que alguna de las dos integrales sea finita y el total es un número

²Este resultado es el teorema 1.17 de [56]

³La definición de f^+ y f^- puede ser encontrada en la sección 1.15 de [56]

entre $[-\infty, \infty]$.

El caso de funciones medibles con valores en los complejos se reduce a la situación anterior como sigue, considere $f = u + iv$, con u y v funciones reales medibles sobre X , se define

$$\begin{aligned}\int_E f d\mu &= \int_E u d\mu + i \int_E v d\mu \\ &= \int_E u^+ d\mu - \int_E u^- d\mu + i \int_E v^+ d\mu - i \int_E v^- d\mu,\end{aligned}$$

donde u^+ y u^- siendo la parte positiva y negativa respectivamente de u , y de igual manera para v .

Definición 3.1.7. [Espacio $L^p(\Omega, \mathcal{F}, \mu)$] Para $1 \leq p < \infty$, se define

$$L^p(\Omega, \mathcal{F}, \mu) = \left\{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ medibles, tales que } \int_{\Omega} |f|^p d\mu < \infty \right\}.$$

Para $p = \infty$,

$$L^\infty(\Omega, \mathcal{F}, \mu) = \{ f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ medibles, tales que } |f| \text{ acotada en casi todo punto} \}.$$

Ejemplo 3.1.8. En el espacio de medida $(\mathbb{R}, \mathfrak{B}(\mathbb{R}), \mu)$, siendo μ la medida de Lebesgue, $f = x^2 \mathbb{I}_{[0,1]} + \frac{1}{x^2} \mathbb{I}_{(1,\infty)} \in L^1(\mathbb{R}, \mathfrak{B}(\mathbb{R}), \mu)$. De igual manera las funciones de la forma $f(x) = p(x) \mathbb{I}_{[a,b]}$ donde $-\infty < a < b < \infty$ y $p(x)$ es cualquier polinomio pertenecen a todo $L^p(\mathbb{R}, \mathfrak{B}(\mathbb{R}), \mu)$ para $p \geq 1$.

3.2 Espacios de Hilbert

Dentro del formalismo matemático de la mecánica cuántica son precisamente los espacios de Hilbert y los operadores lineales que actúan sobre ellos los objetos centrales. Antes de definir espacios de Hilbert se presentará el concepto un poco más general de espacio con producto interno.

Definición 3.2.1 (Espacio con producto interno). Considere un espacio vectorial V sobre el campo de los reales o los complejos. Una función $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{R}/\mathbb{C}$ se dice que es un producto interno si para todos $x, y \in V$, a, b escalares se cumple qué

- i). $\langle x, x \rangle \geq 0$, es 0 si y solo si $x = \vec{0}$ donde $\vec{0}$ es el neutro de V .
- ii) $\langle x + y, w \rangle = \langle x, w \rangle + \langle y, w \rangle$.
- iii). $\langle ax, y \rangle = a \langle x, y \rangle$ con $a \in \mathbb{C}^4$.

⁴Para el caso $\langle x, by \rangle$ donde $b \in \mathbb{C}$, se tiene que $\langle x, by \rangle = \overline{\langle by, x \rangle}$ usando iv), luego mediante iii) se tiene que $\overline{\langle by, x \rangle} = \overline{b \langle y, x \rangle}$ y finalmente usando iv) nuevamente, se concluye que $\langle x, by \rangle = \overline{b} \langle y, x \rangle$.

iv) $\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$.

Al par $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$ se le denomina espacio con producto interno.

La notación braket, permite relacionar un ket con bra y viceversa, mediante un funcional lineal continuo, es decir, que el producto interno en un espacio de Hilbert es equivalente a

$$\langle \phi | \psi \rangle = f_\phi(\psi) = \langle \phi, \psi \rangle$$

siendo f_ϕ un funcional lineal.

Se observa que un espacio con producto interno es un espacio normado⁵, definiendo la función norma como $\|x\| = \sqrt{\langle x, x \rangle}$.

Dos vectores $x, y \in V$ se dice que son ortogonales si $\langle x, y \rangle = 0$. Un conjunto $B \subset V$ se dice ortogonal si para cualesquiera $x, y \in B$ se cumple $\langle x, y \rangle = 0$.

Ejemplo 3.2.2.

Espacio Euclídeo \mathbb{R}^n : su producto interno se define como $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n \epsilon_i \eta_i$, siendo ϵ_i y η_i las componentes vectoriales de x y y respectivamente, con esto la norma está dada por

$$\|x\| = \langle x, x \rangle^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n \epsilon_i^2 \right)^{\frac{1}{2}},$$

luego, la distancia inducida es la euclidiana:

$$d(x, y) = \|x - y\| = \langle x - y, x - y \rangle^{\frac{1}{2}} = \left(\sum_{i=1}^n (\epsilon_i - \eta_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}}.$$

Espacio $L^2[a, b]$: el producto interno se define como:

$$\langle x, y \rangle = \left(\int_a^b x(t) \overline{y(t)} dt \right).$$

La norma se define como

$$\|x\| = \left(\int_a^b |x(t)|^2 dt \right)^{\frac{1}{2}},$$

siendo $|x(t)|^2 = x(t) \overline{x(t)}$.

Definición 3.2.3 (Espacio de Hilbert). Un espacio con producto interno H es un espacio de Hilbert si es completo con respecto a la norma inducida por el producto interno.

⁵Un espacio normado V es un espacio vectorial con una norma definida sobre V , para mayor profundización [30].

Intuitivamente que un espacio sea completo significa que al tomarse una sucesión de puntos dentro del espacio de tal manera que los elementos de la sucesión sean tan cercanos como se quiera, implica que la sucesión tiene un punto límite, la definición formal de completitud puede ser consultada en la sección 1.4 de [30].

Al ser H un espacio de Hilbert es un espacio vectorial, esto implica la existencia de una base para este espacio, es importante recordar que vía el proceso de ortogonalización de Gram-Schmidt, se puede garantizar la existencia una base ortonormal β para este espacio de Hilbert H solo si es separable. En el caso de que el espacio de Hilbert H no sea separable, es necesario emplear el lema de Zorn[60], sin embargo, en este trabajo solo se usaran espacios de Hilbert separables. Recuerde que una base ortonormal es un conjunto linealmente independiente de vectores ortogonales que genera a H , donde la norma de cada vector es 1. El siguiente teorema expone una relación entre el producto interno y la expansión en términos de los elementos de β .

Theorem 3.2.4. *Considere H un espacio de Hilbert con base ortonormal β , entonces para cada $v \in H$ se tiene*

$$v = \sum_{w \in \beta} \langle v, w \rangle w \quad y \quad \|v\|^2 = \sum_{w \in \beta} |\langle v, w \rangle|^2.$$

Es importante notar que el concepto de espacio de Hilbert es una generalización del concepto de espacio euclídeo, en física son de especial interés los espacios de Hilbert separables, esto es, aquellos espacios que admiten una base ortonormal numerable⁶.

3.3 Operadores Lineales

Si en un sistema cuántico el espacio de Hilbert es nuestro escenario, los operadores lineales son nuestros actores principales. Pero y bien, ¿qué es un operador lineal?

Definición 3.3.1. Dados dos espacios vectoriales V, W se dice que $T : \mathfrak{D}(T) \subset V \rightarrow W$ es una transformación lineal, con $\mathfrak{D}(T)$ subespacio de V , si $T(ax + y) = aT(x) + T(y)$ para todos $x, y \in \mathfrak{D}(T)$ y a escalar.

Un operador lineal es continuo cuando su mapeo lineal es una transformación lineal continua entre espacio vectoriales topológicos.

Ejemplo 3.3.2.

- **Operador Identidad:** Sea $I_X : X \rightarrow X$ un operador lineal definido por $I_X(x) = x$ para todo $x \in X$.
- **Operador Nulo:** Sea $0 : X \rightarrow Y$ un operador lineal definido por $0(x) = 0$ para todo $x \in X$.

⁶Un conjunto numerable es un conjunto con la misma cardinalidad que el conjunto de los números naturales

- **Diferenciación:** Sea X el espacio vectorial de todos los polinomios sobre $[a, b]$. Se define un operador lineal T sobre X tal que $T(x(t)) = x'(t)$, para todo $x \in X$, donde el primado es la derivada respecto a t y que mapea de X a X

- **Integración:** Sea T un operador lineal tal que $C[a, b]$, luego el operador integral se define como

$$T(x(t)) = \int_a^t x(\tau) d\tau \quad \text{con } t \in [a, b].$$

- **Matrices:** Una matriz real $A = (a_{jk})$ con r filas y n columnas define un operador $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r$ por medio de:

$$y = Ax.$$

Donde $x = \epsilon_j$ tiene n componentes y $y = (\eta_j)$ tiene r componentes.

Un operador lineal $T : \mathfrak{D}(T) \subset V \rightarrow W$ cumple las siguientes propiedades:

- El rango $\mathfrak{R}(T)$ es un subespacio vectorial de W .
- Si $\dim \mathfrak{D}(T) = n < \infty$, entonces $\dim \mathfrak{R}(T) \leq n$.
- El espacio nulo $\mathfrak{N}(T)$ es un espacio vectorial.

Note que el operador inverso de T existe si y solo si: $Tx = 0 \Rightarrow x = 0$, además en caso de que exista este es un operador lineal. Si $T : V \rightarrow W$ y $S : W \rightarrow Z$ son operadores lineales biyectivos, donde V, W, Z son espacios vectoriales. Entonces, $(ST)^{-1} : Z \rightarrow V$ existe y: $(ST)^{-1} = T^{-1}S^{-1}$

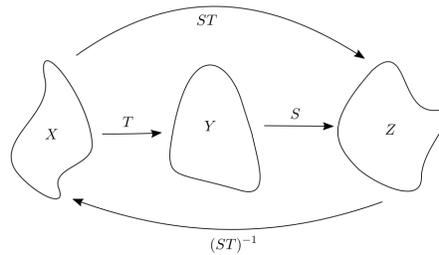


Figura 3.1: Esquema del inverso del producto.

3.3.1 Operadores Lineales Acotados

Sean V, W espacios normados, se dice que el operador lineal $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow Y$ es acotado si existe un número c tal que para todo $x \in \mathfrak{D}(T)$ se cumpla que

$$\|T(x)\|_W \leq c\|x\|_V,$$

esto implica que mapea conjuntos acotados en $\mathfrak{D}(T)$ sobre conjuntos acotados en Y . Note que $c \geq \frac{\|T(x)\|_W}{\|x\|_V}$ para todo $x \in V$ tal que $\|x\|_V \neq 0$, luego el conjunto $\left\{\frac{\|T(x)\|_W}{\|x\|_V}\right\}$ es acotado en \mathbb{R} por tal motivo la siguiente norma está bien definida

$$\|T\| = \sup_{x \in \mathfrak{D}(T)} \frac{\|Tx\|}{\|x\|}, \quad x \neq 0.$$

Entonces $\|T\|$ se define como la norma del operador T , entonces se concluye que

$$\|Tx\| \leq \|T\|\|x\|.$$

Ejemplo 3.3.3.

- **Operador identidad:** El operador identidad $I : V \rightarrow V$ sobre un espacio normado $X \neq \{0\}$ es acotado y su norma $\|I\| = 1$.
- **Operador nulo:** El operador nulo $0 : V \rightarrow V$ sobre un espacio normado V es acotado y su norma $\|0\| = 0$.
- **Operador diferenciación:** Sea V el espacio normado de todos los polinomios sobre $J = [0, 1]$ con norma $\|x\| = \max(x(t))$, $t \in J$. Este operador es lineal pero no es acotado. Si se toma $x_n(t) = t^n$, donde $n \in \mathbb{N}$, y $\|x_n\| = 1$ y:

$$Tx_n(t) = x'_n(t) = nt^{n-1},$$

asi que $\|Tx_n\| = n$ y $\|Tx_n\|/\|x_n\| = n$. Como $n \in \mathbb{N}$ es arbitrario, por lo que c no es un numero fijo tal que $\|Tx_n\|/\|x_n\| \leq c$. Lo que se concluye es que T no es un operador acotado.

- **Matrices:** Una matriz real $A = (a_{jk})$ con r filas y n columnas define un operador $T : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^r$ mediante $y = Ax$, se puede mostrar que este operador es acotado.

Una observación bastante interesante es que si un espacio normado V tiene dimension finita, entonces cada operador lineal V es acotado. El espacio vectorial $\mathfrak{B}(V, W)$ de todos los operadores lineales acotados de un espacio normado X a un espacio normado Y es un espacio normado con norma definida por:

$$\|T\| = \sup_{x \in V} \frac{\|Tx\|_W}{\|x\|_V} \quad \text{para } x \neq 0,$$

$$\|T\| = \sup_{x \in V} \|Tx\| \quad \text{para } \|x\| = 1.$$

Si W es un espacio de Banach, luego $\mathfrak{B}(V, W)$ es un espacio de Banach.⁷ Cuando $V = W$ se denotará por $\mathfrak{B}(V)$.

⁷Un espacio de Banach es un espacio vectorial normado y completo en la métrica definida por su norma.

Un caso especial es que el rango del operador coincida con el campo escalar sobre el que se construye el espacio vectorial, estos operadores son conocidos como funcionales.

Definición 3.3.4. Un operador lineal $f : \mathfrak{D}(f) \rightarrow K$ con V espacio vectorial sobre el campo escalar K se denomina funcional lineal. Para nuestro interés se considere $K = \mathbb{R}$ o $X = \mathbb{C}$.

Un funcional lineal acotado f es un operador lineal acotado. Una propiedad importante es que un funcional f con dominio $\mathfrak{D}(f)$ con un espacio normado es continuo si y solo si f es acotado.

En un espacio de Hilbert H existen diferentes clases de operadores que serán de gran interés en este trabajo, a continuación, se presenta su definición.

Definición 3.3.5 (Operador adjunto). Dado un operador $A \in \mathfrak{B}(H)$ se define A^* como operador adjunto si $\langle Ax, y \rangle = \langle x, A^*y \rangle$ siendo $x, y \in H$.

Definición 3.3.6 (Operador Autoadjunto). Sea H un espacio de Hilbert y sea $A \in \mathfrak{B}(H)$. sea dice que A es autoadjunto si $A^* = A$.

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle \quad \text{con } x, y \in H.$$

Proposición 3.3.7. *Todo operador $A : H \rightarrow H$ autoadjunto tiene autovalores reales.*

Demostración. Suponga $Av = \lambda v$ con $v \in H$, $v \neq 0$ y λ un autovalor de A , luego

$$\langle Av, v \rangle = \langle v, Av \rangle \Rightarrow \langle \lambda v, v \rangle = \langle v, \lambda v \rangle \Rightarrow \bar{\lambda} \langle v, v \rangle = \lambda \langle v, v \rangle$$

Como $\langle v, v \rangle \neq 0$ entonces $\bar{\lambda} = \lambda$ y esto solo es cierto si $\lambda \in \mathbb{R}$. □

Definición 3.3.8 (Operador Unitario). Suponga ahora un operador que $U \in \mathfrak{B}(H)$ se denomina unitario si cumple las siguientes características

- El rango de U es denso en H .⁸
- U preserva el producto interno del espacio de Hilbert.

$$\langle Ux, Uy \rangle_H = \langle x, y \rangle_H.$$

- $UU^* = U^*U = \mathbb{I}$, siendo U^* el operador adjunto de U .

El operador unitario es importante debido a que si tiene la forma $U(t) = e^{itA}$ que se define mediante la expansión en serie de potencias, con $t, s \in \mathbb{R}$ y A un operador autoadjunto tiene propiedades para formar un grupo que cumple las siguientes propiedades:

⁸Sea (H, d) un espacio métrico y $A \subset H$. Se dice que A es denso en H si $\bar{A} = H$.

$$\text{GU1. } U(s)U(t) = U(s+t).$$

$$\text{GU2, } \lim_{s \rightarrow t} U(s) = U(t).$$

$$\text{GU3. Si } \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)-I}{t}v \text{ existe, entonces } v \in \mathfrak{D}(A)$$

$$\text{GU4. Para cada } v \in \mathfrak{D}(A), \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t)-I}{t}v = iAv$$

A este grupo se le denomina como **grupo uniparamétrico**.

Definición 3.3.9. Un grupo uniparamétrico fuertemente continuo $\{A(t)\}$ es la imagen de un grupo continuo homeomorfo $\psi : \mathbb{R} \rightarrow \mathcal{L}(H)$ en la topología usual sobre H talque $\psi(t) = A(t)$ y satisface para todo $s, t \in \mathbb{R}$:

$$\text{GUC1. } A(s)A(t) = A(s * t).$$

$$\text{GUC2. } A(0) = I.$$

$$\text{GUC3. } \lim_{s \rightarrow t} A(s) = A(t).$$

Un resultado que es de vital importancia para la formulación matemática de la mecánica cuántica es:

Theorem 3.3.10 (Stone). *Sea $\{U(t)\}$ un grupo uniparamétrico fuertemente continuo sobre el espacio de Hilbert H , entonces existe un operador autoadjunto A sobre H tal que $U(t) = e^{itA}$ para cada $t \in \mathbb{R}$, tiene un dominio:*

$$\mathfrak{D}(A) = \left\{ v \in H \mid \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t}v \text{ existe} \right\},$$

y para todo $v \in \mathfrak{D}(A)$ esta dado por

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t}v = iAv.$$

Definición 3.3.11 (Operador Compacto). Un operador lineal $T : X \rightarrow Y$ es compacto si la clausura de $T(B)$ es un subconjunto compacto de Y para todo subconjunto acotado de B de X .

Para un operador autoadjunto compacto A en un espacio de Hilbert H . Existe una base ortonormal en H que consta de vectores propios de A . Cada vector propio es real.

3.3.2 Operadores no acotados

Considere $T : \mathfrak{D}(T) \subset H \rightarrow H$ lineal y no acotado. Recuerde que si un operador lineal S está definido sobre todo un espacio de Hilbert complejo y satisface

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle \quad \text{con } x, y \in H,$$

entonces, S es acotado.

Claramente el operador T no puede satisfacer esto, su dominio no puede ser todo el espacio de Hilbert. Se desea saber bajo qué condiciones sobre $\mathfrak{D}(T)$ hacen que el operador adjunto a T esté bien definido, recuerde que el operador adjunto satisface $\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle$ que se puede escribir como $\langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle$. Así T^* es un operador tal que para cada $y \in \mathfrak{D}(T^*)$ le corresponde un único $y^* = T^*y$.

- Suponga que $\mathfrak{D}(T)$ no es denso en H , luego $\overline{\mathfrak{D}(T)} \neq H$, el complemento ortogonal⁹ de $\overline{\mathfrak{D}(T)}$ en H contiene un valor y_1 distinto de 0, y $y_1 \perp x$ para cada $x \in \mathfrak{D}(T)$, esto es, $\langle x, y_1 \rangle = 0$, pero:

$$\begin{aligned} \langle T(x), y \rangle &= \langle x, y^* \rangle = \langle x, y^* \rangle + \langle x, y_1 \rangle, \\ &= \langle x, y^* + y_1 \rangle. \end{aligned}$$

Es decir, que no es único.

- T esta densamente definido en H , es decir, $\mathfrak{D}(T)$, es denso en H , luego $\mathfrak{D}(T)^\perp = \{0\}$ entonces $\langle x, y_1 \rangle = 0$ para todo $x \in \mathfrak{D}(T)$, es decir $y_1 = 0$, $y^* + y_1 = y^*$ que es la unicidad deseada.

Definición 3.3.12 (Operador Adjunto de Hilbert). Sea $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal denso en un espacio de Hilbert complejo H . Luego el operador adjunto de Hilbert $T^* : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ de T se define como:

El dominio $\mathfrak{D}(T^*)$ de T^* consiste de todo $y \in H$ tal que ha un $y^* \in H$ que satisface:

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle.$$

Para todo $x \in \mathfrak{D}(T)$. para cada $y \in \mathfrak{D}(T^*)$ el operador adjunto de Hilbert es definido en termino de y^* por:

$$y^* = T^*y.$$

Es decir, Un elemento $y \in H$ esta en $\mathfrak{D}(T^*)$ si y solo si para y el producto interno $\langle Tx, y \rangle$, considerado como una funcion de x , puede ser representado en la forma $\langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle$ para todo $x \in \mathfrak{D}(T)$.

Tomando $S : \mathfrak{D}(S) \rightarrow H$ y $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ operadores lineales, donde $\mathfrak{D}(S) \subset H$ y $\mathfrak{D}(T) \subset H$. Es posible definir la suma de operadores $S+T$ tal que dará un operador lineal con dominio $\mathfrak{D}(S+T) = \mathfrak{D}(S) \cap \mathfrak{D}(T)$. Y para todo $x \in \mathfrak{D}(S+T)$ definido por:

$$(S+T)x = Sx + Tx,$$

⁹Tomando un espacio métrico (H, d) y $A \subset H$. se dice que $x \in H$ es un punto adherente de A si todo entorno Y de x cumple que $Y \cap A \neq \emptyset$, es decir, no hay ningún entorno de x totalmente contenido en $H - A$. El conjunto de puntos adherentes de A se llama conjunto ortonormal y se representa por \bar{A} .

$\mathfrak{D}(S + T)$ es el conjunto mas grande que contiene a S y T , y $\mathfrak{D}(S + T)$ es un espacio vectorial, $0 \in \mathfrak{D}(S + T)$ por lo que nunca será un conjunto vacío.

También es posible definir el producto de operadores TS , donde S y T se definen como antes. Donde M es el subconjunto más grande de $\mathfrak{D}(S)$, cuya imagen debajo de S se encuentra en $\mathfrak{D}(T)$, es decir, $S(M) = \mathfrak{R}(S) \cap \mathfrak{D}(T)$, donde $\mathfrak{R}(S)$ es el rango de S . El producto TS esta definido a ser el operador con dominio $\mathfrak{D}(TS) = M$ para cada $x \in \mathfrak{D}(TS)$.

$$(TS)x = T(Sx).$$

Intercambiando S y T en esta definición, el producto ST es el operador tal que para todo $x \in \mathfrak{D}(ST)$,

$$(ST)x = S(Tx).$$

Donde $\mathfrak{D}(ST) = \overline{M}$ es el subconjunto de $\mathfrak{D}(T)$ cuya imagen debajo de T se encuentra en $\mathfrak{D}(S)$,

$$T(\overline{M}) = \mathfrak{R}(T) \cap \mathfrak{D}(S),$$

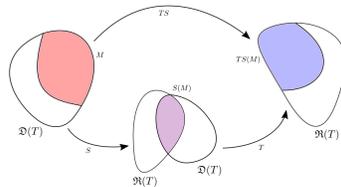


Figura 3.2: Representación grafica de la multiplicación de operadores.

TS y ST son operadores lineales, $\mathfrak{R}(S)$ es un espacio vectorial, $S(M)$ es un espacio vectorial, M es un espacio vectorial ya que S es lineal y \overline{M} es un espacio vectorial ya que T es lineal.

Escogiendo operadores lineales $S : \mathfrak{D}(S) \rightarrow H$ y $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ siendo densamente definidos en un espacio de Hilbert complejo H , luego:

- Si $S \subset T$, entonces $T^* \subset S^*$.
- Si $\mathfrak{D}(T^*)$ es denso en H , luego $T \subset T^{**}$.

Ademas, si se supone que T es inyectivo y su rango $\mathfrak{R}(T)$ es denso en H , entonces T^* es inyectivo y

$$(T^*)^{-1} = (T^{-1})^*.$$

Definición 3.3.13 (Operador Lineal Hermitico o simétrico). Sea $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal que es densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H . Luego T es llamado operador

lineal simétrico si para todo $x, y \in \mathfrak{D}(T)$:

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle.$$

Un operador lineal T denso en un espacio de Hilbert complejo H es simétrico si y solo si:

$$T \subset T^*.$$

Una propiedad importante que cumplen los operadores simétricos es que todo operador auto adjunto es simétrico. Sin embargo, no necesariamente un operador simétrico es auto adjunto, ya que un operador Hermítico cumple la condición de $\mathfrak{D}(A) \subseteq \mathfrak{D}(A^*)$, pero los operadores auto adjuntos deben cumplir también que $\mathfrak{D}(A^*) \subseteq \mathfrak{D}(A)$. Estos conceptos son iguales solo cuando el operador es acotado [16].

Un concepto igual de importante son los operadores positivos, Sea H un espacio de Hilbert complejo, y A un operador lineal talque $A \in \mathcal{L}(H)$, dicho operador es positivo si $A^* = A$ y además, sea $x \in H$ entonces se cumple que $\langle Ax, x \rangle \geq 0$. Donde $\mathcal{L}(H)$ es el \mathbb{C}^* -álgebra¹⁰ de operadores acotados con la norma $\|\cdot\|$ y la anti-involución $*$ dada por el operador adjunto. Los operadores positivos operadores cumplen la ecuación de Cauchy-Bunyakovski-Schwarz

$$|\langle Ax, y \rangle|^2 \leq \langle Ax, y \rangle \langle Ax, x \rangle \text{ Para todo } x, y \in \mathfrak{D}(A). \quad (3.1)$$

Definición 3.3.14 (Operador Lineal Cerrado). Sea $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal, donde $\mathfrak{D}(T) \subset H$ y H es un espacio complejo de Hilbert. Luego, T es llamado operador cerrado si su grafo $\mathfrak{g}(T) = \{(x, y) | x \in \mathfrak{D}(T), y = Tx\}$.

Algunas propiedades importantes que cumplen los operadores cerrados son

- a. T es cerrado si y solo si:

$$x_n \rightarrow x, \quad [x_n \in \mathfrak{D}(T)] \quad \text{y} \quad Tx_n \rightarrow y.$$

Esto implica que $x \in \mathfrak{D}(T)$ y $Tx = y$.

- b. Si T es cerrado y $\mathfrak{D}(T)$ es cerrado, luego T es acotado.
c. Sea T acotado. Luego T es cerrado si y solo si $\mathfrak{D}(T)$ es cerrado.

Un concepto fundamental en la teoría cuántica es el espectro de un operador

¹⁰Un \mathbb{C}^* -álgebra (en general) es un álgebra de Banach A que tiene una involución $*$ (es decir, un mapeo lineal conjugado de A en sí mismo que satisface $x^{**} = x$ y $(xy)^* = y^*x^*$, $x, y \in A$) que satisface $\|x^*x\| = \|x\|^2$ para todo $x \in A$. [2]

3.3.3 Teoría espectral de operadores

Definición 3.3.15 (Espectro de un operador). Sea H un espacio de Hilbert complejo de dimensión finita y sea $T \in \mathcal{L}(H)$. El espectro de T se define como el conjunto de todos los escalares $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $\lambda I - T$ no es invertible:

$$\sigma(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda I - T \text{ no es invertible}\}.$$

Es importante mencionar que el espectro $\sigma(T)$ de un operador auto adjunto $T : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H$ es real y cerrado, donde $\mathfrak{D}(T)$ es denso en H . Otro importante conjunto es el conjunto resolvente de un operador T , cuyo dominio $\mathfrak{D}(T)$ es denso en H que se define como

$$\rho(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} \text{ Tal que } T - \lambda I : \mathfrak{D}(T) \rightarrow H\},$$

que es una biyección con un inverso acotado, y para λ que pertenece al conjunto resolvente de T , $\rho(T)$, existe el operador acotado $R_\lambda(T) = (T - \lambda I)^{-1}$ es llamado el resolvente de T en λ .

El conjunto resolvente $\rho(T)$ que este contenido en \mathbb{C} es abierto y su complemento $\sigma(T) = \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ es el espectro de T . El subconjunto de $\sigma_p(T) \subset \sigma(T)$ consiste de los autovalores de T con multiplicidad finita, es decir, un espectro de puntos.

Un operador T es de clase traza si

$$\|T\|_1 = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n(T) < \infty,$$

Donde $\mu_n(T)$ son los valores singulares de $T : \mu_n(T) = \sqrt{\lambda_n(T)} \geq 0$, donde $\lambda_n(T)$ son los autovalores de T^*T . De igual forma, un operador T que pertenece a $\mathcal{L}(H)$ es de clase de traza si y solo si para cada base ortonormal $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ para H

$$\sum_{n=1}^{\infty} |\langle Te_n, e_n \rangle| < \infty.$$

Ya que una permutación de una base ortonormal es de nuevo una base ortonormal, con esto la condición anterior puede ser entendida como $\sum_{n=1}^{\infty} \langle Te_n, e_n \rangle < \infty$. Para cada base ortonormal $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ para H la traza de un operador T de clase traza se define

$$TrA = \sum_{n=1}^{\infty} \langle Te_n, e_n \rangle, \tag{3.2}$$

Que no depende de la elección de la base ortonormal $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ para H , un operador positivo $T \in$

$\mathcal{L}(H)$ es de clase traza si $\sum_{n=1}^{\infty} \langle Te_n, e_n \rangle < \infty$. También es posible definir el espacio \mathcal{S}_1 como el conjunto de todos los operadores de clase de traza en H que forman un álgebra de Banach con la norma $\|T\|_1 = Tr\sqrt{T^*T}$.

Una propiedad importante de los operadores clase traza es

$$TrAB = TrBA \quad \text{Para todo } A \in \mathcal{S}_1, B \in \mathcal{L}(H),$$

se denomina la propiedad cíclica de la traza. Si $A \in \mathcal{S}_1$, el mapeo $l_A(B) = TrAB$, con $B \in \mathcal{L}(H)$, es un funcional lineal continuo sobre $\mathcal{L}(H)$.

También es importante mencionar que un operador $A \in \mathcal{L}(H)$ es llamado un operador de Hilbert-Schmidt si $AA^* \in \mathcal{S}_1$. De igual forma, un operador $A \in \mathcal{L}(H)$ es de Hilbert-Schmidt si y solo si para alguna base ortonormal $\{e_n\}_{n=1}^{\infty}$ para H se cumple que

$$\sum_{n=1}^{\infty} \|Ae_n\|^2 < \infty.$$

Definición 3.3.16 (Valor de medida de proyección). Un valor de medida de proyección sobre \mathbb{R} es un mapeo $P : \mathfrak{B}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{L}(H)$ del σ -álgebra $\mathfrak{B}(\mathbb{R})$ de subconjuntos de Borel de \mathbb{R} en el álgebra de operadores acotados sobre H , que satisface las siguientes propiedades:

P1. Para cada subconjunto de Borel $E \subseteq \mathbb{R}$, $P(E)$ es una proyección ortogonal, es decir

$$P(E) = P(E)^2 \quad \text{y} \quad P(E) = P(E)^*. \quad (3.3)$$

P2. La proyección del conjunto vacío es 0, y la proyección de \mathbb{R} es el operador identidad sobre H .

P3. Para cada unión disjunta de subconjuntos de Borel

$$E = \bigsqcup_{n=1}^{\infty} E_n \quad , \quad P(E) = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=1}^n P(E_i). \quad (3.4)$$

es una topología fuerte¹¹ sobre $\mathcal{L}(H)$.

Para el caso de un valor de medida de proyección P sobre \mathbb{R}^n es un mapeo $P : \mathfrak{B}(\mathbb{R}^n) \rightarrow \mathcal{L}(H)$, el cual satisface las propiedades (3.3)-(3.4).

De las propiedades que debe cumplir el valor de medida de proyección se deduce que:

$$P(E_1)P(E_2) = P(E_1 \cap E_2) \quad \text{Para todo } E_1, E_2 \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}).$$

¹¹Esta es la topología generada por la familia de normas $\|\cdot\|_x, x \in H$ definida por $\|T\|_x = \|Tx\|$. Esto implica que $T_\alpha \rightarrow T \leftrightarrow \|(T_\alpha - T)x\| \rightarrow 0$ [47]

con cada valor de medida de proyección P sobre \mathbb{R} se asocia una función de valor de proyección.

PP1.

$$P(\lambda)P(\mu) = P(\min\{\lambda, \mu\}).$$

PP2.

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} P(\lambda) = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow \infty} P(\lambda) = I.$$

PP3.

$$\lim_{\substack{\mu \rightarrow \lambda \\ \mu < \lambda}} P(\mu) = P(\lambda).$$

Para cada $x \in H$ el resolvente de la identidad $P(\lambda)$ define una función de distribución $(P(\lambda)x, x)$ de la medida acotada sobre \mathbb{R} que es la medida de probabilidad cuando $\|x\| = 1$. Por la identidad de polarización [54]

$$\begin{aligned} (P(\lambda)x, \psi) &= \frac{1}{4} \{ (P(\lambda)(x + \psi), x + \psi) - (P(\lambda)x - \psi, x - \psi) \\ &\quad + i(P(\lambda)(x + i\psi), x + i\psi) - i(P(\lambda)(x - i\psi), x - i\psi) \}, \end{aligned}$$

así que $(P(\lambda)x, \psi)$ corresponde a una medida compleja sobre \mathbb{R} , es decir, una combinación lineal compleja de medidas.

Para H separable¹² el teorema de Von-Neumann establece que para cada valor de medida de proyección P existe ψ tal que una función f es finita en casi cualquier punto con respecto a P si y solo si esta es finita en casi cualquier parte con respecto a la medida $(P\psi, \phi)$ con $\psi, \phi \in H$. El siguiente teorema es conocido como el teorema general de Von Neumann.

Theorem 3.3.17 (Von Neumann). [55] *Para cada operador auto adjunto A sobre el espacio de Hilbert H existe una única resolución con valor de proyección de la identidad $P(\lambda)$, que satisface las siguientes propiedades.*

PT1.

$$\mathfrak{D}(A) = \{ \varphi \in H : \int_{-\infty}^{\infty} \lambda^2 d(P(\lambda)\varphi, \varphi) < \infty \}, \quad (3.5)$$

y para cada $\varphi \in \mathfrak{D}(A)$

$$A\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dP(\lambda)\varphi,$$

definido como un límite de sumas de Riemann-Stieltjes en la topología fuerte sobre H . El soporte del correspondiente valor de medida de proyección P coincide con el espectro del

¹²Un espacio de Hilbert es separable si y solo si admite una base ortonormal numerable m[47]

operador $A : \lambda \in \sigma(A)$ si y solo si $P_A((\lambda - \epsilon, \lambda + \epsilon)) \neq 0$ para todo $\epsilon > 0$.

PT2. Para cada función continua f sobre \mathbb{R} , $f(A)$ es un operador lineal sobre H con un dominio denso

$$\mathfrak{D}(f(A)) = \{\varphi \in H : \int_{-\infty}^{\infty} |f(\lambda)|^2 dP(\lambda)\varphi, \varphi < \infty\}, \quad (3.6)$$

definido para $\varphi \in \mathfrak{D}(f(A))$ como

$$f(A)\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)dP(\lambda)\varphi,$$

y se entiende como en la parte (3.5). El operador $f(A)$ satisface

$$f(A)^* = \overline{f(A)},$$

donde \bar{f} es el complejo conjugado para f , y el operador $f(A)$ es acotado si y solo si la función f es acotado sobre $\sigma(A)$. Para acotados sobre $\sigma(A)$ funciones continuas f y g ,

$$f(A)g(A)\varphi = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)g(\lambda)dP(\lambda)\varphi, \quad \varphi \in H.$$

PT3. Para cada función medible f sobre \mathbb{R} finita casi para cualquier parte con respecto al valor de medida de proyección P , $f(A)$ es un operador lineal sobre H definido como en (3.6), donde la integral para $f(A)\varphi$ es ahora entendida en el sentido débil: para φ que pertenece a $\mathfrak{D}(f(A))$ y cada ψ que pertenece a H ,

$$(f(A)\varphi, \psi) = \int_{-\infty}^{\infty} f(\lambda)d(P(\lambda)\varphi, \psi),$$

una integral de Lebesgue-Stieljes son respecto a una medida compleja. La correspondencia $f \rightarrow f(A)$ satisface las mismas propiedades como en (3.6), donde las integrales son entendidas en el sentido débil.

PT4. Un operador acotado B conmuta con A , esto es, $B(\mathfrak{D}(A))$ esta contenido en $\mathfrak{D}(A)$ y $AB = BA$ sobre $\mathfrak{D}(A)$, si y solo si este conmuta con $P(\lambda)$ para todo λ y por ende B conmuta con cada operador $f(A)$.

PT5. Para cada valor de resolución de proyección de identidad $P(\lambda)$ el operador A sobre H , definido como en (3.5), es hermítico.

Los operadores auto adjuntos A y B conmutan si el correspondiente valor de la medida de proyección

P_A y P_B conmutan,

$$P_A(E_1)P_B(E_2) = P_B(E_2)P_A(E_1) \text{ Para todo } E_1, E_2 \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}).$$

Para todo $u \in \mathbb{R}$, los operadores e^{iuA} y B conmutan, abusando de la notación se puede escribir

$$[A, B] = AB - BA = 0, \quad (3.7)$$

para operadores auto adjuntos A y B que conmutan.

Proposición 3.3.18.

Sea $A = \{A_1, \dots, A_n\}$ un conjunto finito de operadores auto adjuntos, operadores que conmutan por parejas sobre H . existe un único valor de medida de proyección P_A sobre los subconjuntos de Borel de \mathbb{R}^n que tienen las siguientes propiedades:

PA1. Para cada $E = E_1 \times \dots \times E_n \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}^n)$,

$$P_A(E) = P_{A_1}(E_1) \dots P_{A_n}(E_n).$$

PA2. En la topología fuerte de operadores,

$$A_K = \int_{\mathbb{R}^n} \lambda_k dP_A, \quad K = 1, \dots, n,$$

donde λ_n es la k -ésima coordenada de la función sobre \mathbb{R}^n , $\lambda_k(x_1, \dots, x_n) = x_k$.

PA3. Para cada función medible f sobre \mathbb{R}^n finita en casi cualquier punto con respecto al valor de medida de proyección P_A , $f(A_1, \dots, A_n)$ es un operador lineal sobre H que se define por

$$f(A_1, \dots, A_n) = \int_{\mathbb{R}^n} f dP_A,$$

donde la integral es entendida en la topología débil[47] de operadores. La correspondencia $f \rightarrow f(A_1, \dots, A_n)$ satisface las mismas propiedades como en (3.6), el soporte del valor de medida de proyección P_A sobre \mathbb{R}^n es llamado el espectro conjunto de la familia conmutativa $A = \{A_1, \dots, A_n\}$.

4. Axiomas de Dirac Von-Neumann

En el verano de 1925, Werner Heisenberg visitó Cambridge, dando una presentación sobre el efecto Zeeman anómalo [46] en el Kapitsa Club. Al final de su conferencia, mencionó algunas de sus nuevas ideas, las cuales formaron la base de la mecánica matricial. Sin embargo, Dirac no les prestó atención en ese momento. Al final del verano, mientras estaba en Bristol con sus padres, Dirac recibió de Fowler por correo una revisión del artículo de Heisenberg, pero no pudo apreciar de inmediato su idea principal. Solo una semana o dos después, volviendo a este artículo nuevamente, se dio cuenta de lo nuevo que había aparecido en la teoría de Heisenberg, variables dinámicas, Heisenberg no describió una órbita de Bohr separada, sino que vinculó dos estados atómicos y se expresaron en forma de matrices. La consecuencia de esto fue la no conmutatividad de las variables, cuyo significado incluso no estaba claro para el propio Heisenberg. Dirac comprendió de inmediato el importante papel de esta nueva propiedad de la teoría, que necesitaba una interpretación correcta, tiempo después al regresar a Cambridge reconoció que esta forma matemática tenía la misma estructura que los paréntesis de Poisson que ocurren en la dinámica clásica del movimiento de partículas. Esta conexión hizo posible introducir un procedimiento de diferenciación en la teoría cuántica, este resultado se presentó en el artículo " Ecuaciones fundamentales de la mecánica cuántica"[9], y dio impulso a la construcción de un formalismo mecano cuántico consistente basado en el enfoque hamiltoniano, introduciendo junto con una formulación abstracta en términos del espacio de Hilbert utilizado en el análisis funcional; además mostró que los enfoques de Schrödinger y Heisenberg eran dos representaciones diferentes de la misma teoría.

Años más tarde, Von Neumann estableció los conocidos axiomas de Dirac-Von Neumann, en su obra de 1932 Fundamentos matemáticos de la mecánica cuántica[55]. En este formalismo de la mecánica cuántica, las cantidades observables como la posición o el momento se representan como operadores lineales que actúan sobre el espacio de Hilbert asociado con el sistema cuántico. La física de la mecánica cuántica se redujo así a las matemáticas de los espacios de Hilbert y los operadores lineales que actúan sobre ellos. Por ejemplo, el principio de incertidumbre, según el cual la determinación de la posición de una partícula impide la determinación de su momento y viceversa, se traduce en la no conmutatividad de los dos operadores correspondientes. Esta nueva formulación matemática incluyó como casos especiales las formulaciones tanto de Heisenberg como de Schrödinger. Cuando se informó a Heisenberg, Von Neumann había aclarado la diferencia entre un operador ilimitado que era un operador autoadjunto y uno que era simplemente simétrico, Heisenberg respondió "¿Eh? ¿Cuál es la diferencia?".

El tratamiento abstracto de Von Neumann le permitió también confrontar la cuestión fundamental

del determinismo versus el no determinismo, y en su libro presentó una prueba de que los resultados estadísticos de la mecánica cuántica no podrían ser promedios de un conjunto subyacente de determinadas "variables ocultas", como en la mecánica estadística clásica. En 1935, Grete Hermann publicó un artículo en el que sostenía que la prueba contenía un error conceptual y, por tanto, no era válida. El trabajo de Hermann fue ignorado en gran medida hasta que John S. Bell hizo esencialmente el mismo argumento en 1966. La demostración de Von Neumann inauguró una línea de investigación que finalmente condujo, a través del teorema de Bell y los experimentos de Alain Aspect en 1982, a la demostración de que la física cuántica requiere una noción de realidad completamente diferente de la de la física clásica, o debe incluir la no localidad en forma aparente, pero esto implica la violación de la relatividad especial.

4.1 Axiomatización

En este punto, hemos desarrollado las matemáticas que nos permiten axiomatizar la mecánica cuántica, y ahora estamos listos para ver cómo las diversas piezas encajan para proporcionar un marco matemático riguroso para la teoría. En el presentación de los axiomas que sigue, esencialmente seguimos [52], es importante observar que los resultados experimentales con respecto a los fenómenos no relativistas continúan coincidiendo perfectamente con las predicciones del marco matemático.

A1 Cada sistema cuántico tiene asociado un espacio de Hilbert complejo separable de dimensión no finita H , en términos físicos es llamado el espacio de estados puros. El espacio de Hilbert de un sistema cuántico compuesto es un producto tensorial de espacios de Hilbert de sistemas de componentes.

A2 El conjunto de observables \mathcal{A} de un sistema cuántico son el espacio de Hilbert H consiste de todos los operadores hermitianos sobre H . El subconjunto $\mathcal{A}_o = \mathcal{A} \cap \mathcal{L}(H)$ de observables acotados es un espacio vectorial sobre \mathbb{R} .

A3 El conjunto de estados \mathcal{S} de un sistema cuántico con un espacio de Hilbert H consiste de todos los operadores clase de traza positivos M con $TrM = 1$.

Para $\psi \in H$, $\|\psi\| = 1$, defina $\mathbb{C}_\psi := \{\alpha\psi : \alpha \in \mathbb{C}\}$ el cual es un subespacio vectorial de H . La correspondiente proyección $P_\psi : H \rightarrow \mathbb{C}_\psi$ es un estado puro, mientras que todos los otros estados son llamados estados mixtos. El operador M es llamado el operador densidad.

A4 Un proceso de medición es la siguiente correspondencia

$$\mathcal{A} \times \mathcal{S} \ni (A, M) \rightarrow \mu_{A,M} \in \mathcal{P}(\mathbb{R}),$$

que a cada observable $A \in \mathcal{A}$ y estado M que pertenece a \mathcal{S} asigna una medida de probabilidad $\mu_{A,M}$ sobre \mathbb{R} . Para cada subconjunto de Borel $E \subset \mathbb{R}$, el valor $0 \leq \mu_{A,M}(E) \leq 1$ es la probabilidad de que para un sistema cuántico en el estado representado por M el resultado de

la medida del observable A pertenezca a E . El valor esperado del observable A para el estado fijo M está dado por

$$\langle A|M \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dF_{A,M}(\lambda). \quad (4.1)$$

Donde $F_{A,M}(\lambda) = \mu_{A,M}((-\infty, \lambda))$ es una función de distribución para la medida de probabilidad $\mu_{A,M}$.

Los axiomas A1-A4 son conocidos como axiomas de Dirac-Von Neumann[10]-[55].

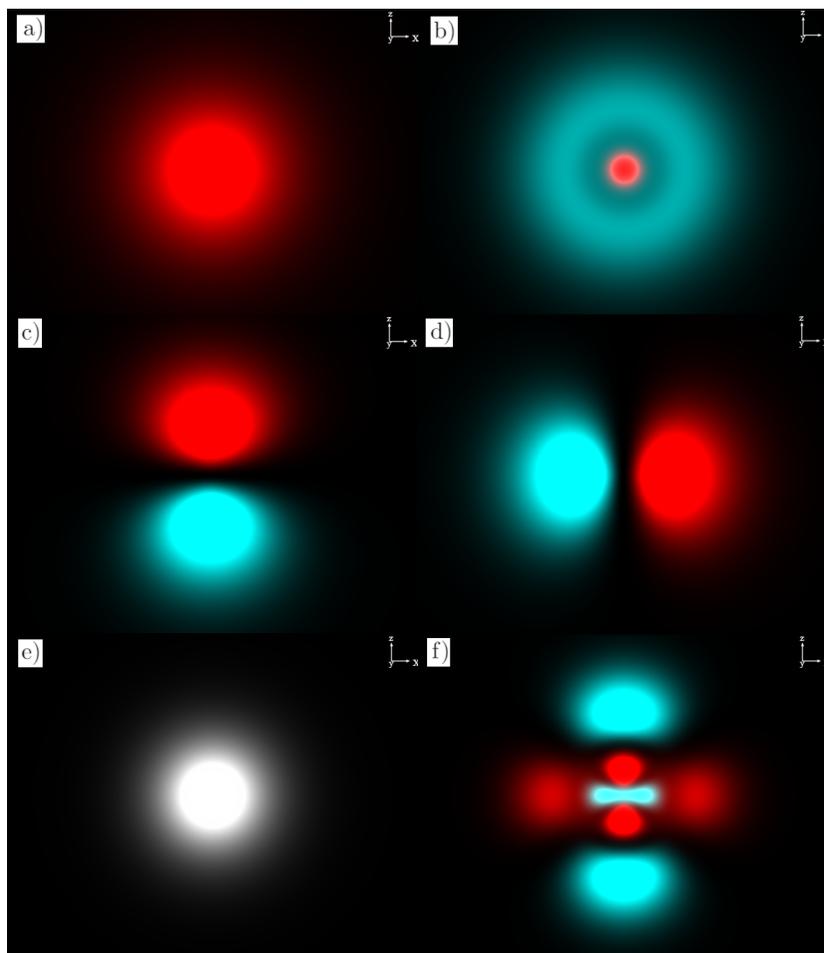


Figura 4.1: Algunos estados puros del átomo de Hidrógeno

Algunas consecuencias

- Como el operador traza es lineal se tiene que el conjunto de estados \mathcal{S} es un conjunto convexo¹.
- Del teorema de Hilbert-Schmidt sobre la descomposición canónica para operadores autoadjuntos y compactos² para todo $M \in \mathcal{S}$ donde existe un conjunto ortonormal $\{\psi_n\}_{n=1}^N$ en H talque

$$M = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n P_{\psi_n} \quad \text{y} \quad \text{Tr} M = \sum_{n_1}^{\infty} \alpha_n = 1, \quad (4.2)$$

donde $\alpha_n > 0$ son los autovalores no nulos de M . Así cada estado mixto es una combinación de estados puros.

- El teorema espectral de Von Neumann presentado en Teorema 3.3.17 garantiza que la correspondencia $(A, M) \rightarrow \mu_A$, postulada en 4.1, puede ser escrita explícitamente como esta dada por la formula Born-Von Neumann[52]

$$\mu_{A,M}(E) = \text{Tr} P_A(E)M, \quad E \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}), \quad (4.3)$$

donde P_A es una medida de proyección evaluada sobre \mathbb{R} asociada con el operador hermítico A . En [40] puede ser encontrada la demostración de que en efecto (4.3) define una medida de probabilidad.

- Un conjunto finito de observables $A = \{A_1, \dots, A_n\}$ puede ser medido simultáneamente si y solo si forman una familia conmutativa. La medida simultanea de la familia conmutativa $A \subset \mathcal{A}$ en el estado M que pertenece a \mathcal{S} está descrito por la medida de probabilidad μ_A sobre \mathbb{R}^n dada por:

$$\mu_A(E) = \text{Tr} P_A(E)M, \quad E \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}^n),$$

donde P_A es el valor de medida de proyección de 3.3.18. Explícitamente, $P_A(E) = P_{A_1}(E_1) \dots P_{A_n}(E_n)$ para $E = E_1 \times \dots \times E_n \in \mathfrak{B}(\mathbb{R}^n)$, para cada subconjunto de Borel E contenido en \mathbb{R}^n la cantidad $0 \leq \mu_A(E) \leq 1$ es la probabilidad para un sistema continuo en el estado M el resultado de la medida simultanea de observables A_1, \dots, A_n a lo largo de E .

- Note que la fórmula (4.1) permite calcular la varianza y desviación estándar asociada. Esto debería parecer razonable ya que, intuitivamente, los observables son las cantidades físicas mesurables asociadas con un sistema cuántico.

¹Se dice que C es un conjunto convexo si cualquier segmento que una dos puntos cualesquiera del conjunto, siempre pertenece al conjunto.

²Un operador compacto es un operador lineal $T : X \rightarrow Y$ donde X, Y son espacios vectoriales normados, con la propiedad de que T asigna subconjuntos acotados de X a subconjuntos relativamente compactos de Y .

4.2 Relaciones de incertidumbre de Heisenberg

La varianza del observable A en el estado M , que mide la desviación media de A de su valor esperado, es definido por

$$\sigma_M^2(A) = \langle (A - \langle A|M \rangle I)^2 |M \rangle = \langle A^2 |M \rangle - \langle A|M \rangle^2 \geq 0,$$

de lo que se observa la equivalencia a la varianza en variables aleatorias. Para la buena definición de $\sigma_m^2(A)$ se recomienda [37].

Para que $A \in \mathcal{A}$ y $M \in \mathcal{S}$ sean tales que la varianza $\sigma_M(A) = 0$ es necesario y suficiente que $Im(M)$ sea un auto espacio para el operador A con auto valor $a = \langle A|M \rangle$. En particular, si $M = P_\psi$, se tendría que ψ es un autovector de A , $A\psi = a\psi$. Mediante la introducción del valor esperado se puede formular la relación de incertidumbre generalizada de Heisenberg como sigue

Theorem 4.2.1 (Relación generalizada de incertidumbre de Heisenberg). *Sea $A, B \in \mathcal{A}$ y sea $M = P_\psi$ un estado puro talque $\psi \in D(A) \cap D(B)$ y $A\psi, B\psi \in D(A) \cap D(B)$, entonces:*

$$\sigma_M^2(A)\sigma_M^2(B) \geq \frac{1}{4} \langle i[A, B]|M \rangle^2. \quad (4.4)$$

Estas relaciones de desigualdad proporcionan una expresión cuantitativa del hecho de que incluso en un estado puro de observables no conmutativos no pueden ser medidos simultáneamente. Esto muestra una diferencia fundamental entre el proceso de medición en mecánica clásica y en mecánica cuántica. La demostración del anterior teorema puede ser consultada en [40]

4.3 Dinámica

Aunque hay mucho que decir sobre la visión de la mecánica cuántica, tenemos ya presentado, no solemos pensar en los sistemas físicos como estáticos.

En analogía con mecánica clásica, se postula que la evolución temporal de un sistema cuántico con el espacio de estados H está completamente determinado por un observable especial \mathcal{H} que pertenece a \mathcal{A} llamado operador Hamiltoniano??. Como en mecánica clásica, la estructura del álgebra de Lie sobre \mathcal{A}_o conduce a ecuaciones de movimiento cuántico.

Específicamente, el análogo de la imagen de Hamilton en mecánica clásica?? es la formulación de Heisenberg en mecánica cuántica, donde los estados no dependen del tiempo

$$\frac{dM}{dt} = 0, \quad M \in \mathcal{S}.$$

Y los observables acotados satisfacen la ecuación de movimiento de Heisenberg

$$\frac{dA}{dt} = \{\mathcal{H}, A\}_{\hbar}, \quad A \in \mathcal{A}_o, \quad (4.5)$$

donde $\{\}_\hbar = \frac{i}{\hbar}[\cdot, \cdot]$, es el corchete cuántico, el número positivo \hbar , llamado constante de Planck[45], es una de las constantes fundamentales de la física. La ecuación de Heisenberg (4.5) está bien definida cuando \mathcal{H} pertenece a \mathcal{A}_o . Considere $U(t)$ el grupo uniparamétrico fuertemente continuo de operadores asociados con el operador acotado autoadjunto \mathcal{H} definido por

$$U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\mathcal{H}}, \quad t \in \mathbb{R}, \quad (4.6)$$

luego, este grupo satisface la ecuación diferencial

$$i\hbar \frac{dU(t)}{dt} = \mathcal{H}U(t) = U(t)\mathcal{H}, \quad (4.7)$$

así que la solución $A(t)$ de la ecuación de movimiento de Heisenberg con las condiciones iniciales $A(0) = A$ que pertenece a \mathcal{A}_o esta dado por

$$A(t) = U(t)^{-1}AU(t). \quad (4.8)$$

En general, un grupo uniparamétrico fuertemente continuo de operadores unitarios (4.6), asociados a un operador autoadjunto \mathcal{H} , satisface la ecuación diferencial (4.7) solo sobre $D(\mathcal{H})$ en un sentido fuerte, esto es aplicado a $\varphi \in \mathfrak{D}(\mathcal{H})$. La dinámica cuántica está definida por la misma fórmula (4.8), y en este sentido todos los observables cuánticos satisfacen la ecuación de Heisenberg (4.5). El operador evolución $U_t : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ está definido por $U_t(A) = A(t) = U(t)^{-1}AU(t)$, y es un auto morfismo del álgebra de Lie \mathcal{A}_o de observables acotados. Esto es un análogo cuántico de lo establecido como el operador evolución, en mecánica clásica, el cual es un automorfismo del álgebra de Poisson de observables clásicos.

Por el teorema de Stone, Teorema 3.3.10, se tiene $U(t)$ satisface

$$\frac{dU}{dt} = -i\mathcal{H}e^{-\frac{it}{\hbar}\mathcal{H}},$$

además $\frac{dU}{dt}(0) = -i\mathcal{H}$, $\mathcal{H}\varphi = i\hbar \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t} \varphi$ y $D(\mathcal{H}) = \{\varphi \in \mathcal{H} : \lim_{t \rightarrow 0} \frac{U(t) - I}{t} \varphi \text{ existe}\}$.

El dominio $\mathfrak{D}(\mathcal{H})$ del operador autoadjunto \mathcal{H} , llamado generador infinitesimal de $U(t)$, es un subespacio lineal invariante para todos los operadores $U(t)$. Lo anterior es posible resumirlo en el siguiente axioma.

D1 Formulación de Heisenberg La dinámica de un sistema cuántico es descrita por el grupo

uniparamétrico fuertemente continuo $U(t)$ de operadores unitarios, los estados cuánticos no dependen del tiempo, $M \ni \mathcal{S} \rightarrow M(t) = M \in \mathcal{S}$, y la dependencia temporal de observables cuánticos está dada por el operador evolución U_t ,

$$\mathcal{A} \ni A \rightarrow A(t) = U(t)^{-1}AU(t) \in \mathcal{A},$$

infinitesimalmente, la evolución de observables cuánticos esta descrita por la ecuación de movimiento de Heisenberg (4.5), donde el operador Hamiltoniano \mathcal{H} es el generador infinitesimal de $U(t)$.

El análogo de la imagen de Liouville en mecánica clásica es la formulación de Schrödinger en mecánica cuántica, definida como sigue

D2 Formulación de Schrödinger La dinámica de una sistema cuántico está descrito por un grupo uniparamétrico de observables cuánticos que no dependen del tiempo, $\mathcal{A} \ni A \rightarrow A(t) = A \in \mathcal{A}$ y la dependencia temporal de estados esta dada por el inverso del operador evolución $U_t^{-1} = U_{-t}$.

$$\mathcal{S} \ni M \rightarrow M(t) = U_{-t}M = U(t)MU(t)^{-1} \in \mathcal{S}, \quad (4.9)$$

infinitesimalmente, la evolución de estados cuánticos es descrita por la ecuación de movimiento de Schrödinger:

$$\frac{dM}{dt} = -\{\mathcal{H}, M\}_{\hbar}, \quad M \in \mathcal{S}, \quad (4.10)$$

donde el operador hamiltoniano \mathcal{H} es el generador infinitesimal de $U(t)$.

Proposición 4.3.1.

La formulación de Heisenberg y Schrödinger son equivalentes. La demostración puede ser consultada en el libro [52].

Definición 4.3.2. Un observable $A \in \mathcal{A}$ es una constante de movimiento cuántica para un sistema cuántico con el Hamiltoniano \mathcal{H} si $\frac{dA(t)}{dt} = 0$, en la formulación de Heisenberg

De la proposición 3.7 se sigue que $A \in \mathcal{A}$ es una integral de movimiento si y solo si conmuta con el hamiltoniano \mathcal{H} , así $\{\mathcal{H}, A\}_{\hbar} = 0$. Esto es un análogo cuántico de la propiedad conmutativa de Poisson. De (4.10) la evolución temporal de un estado puro $M = P_{\psi}$ está dada por $M(t) = P_{\psi(t)}$, donde $\psi(t) = U(t)\psi$. Además $D(\mathcal{H})$ es invariante sobre $U(t)$, el vector $\psi(t) = U(t)\psi$ satisface la dependencia temporal de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d\psi}{dt} = \mathcal{H}\psi.$$

con la condición inicial $\psi(0) = \psi$.

Definición 4.3.3. Un estado M que pertenece a \mathcal{S} es llamado estacionario para un sistema cuántico con hamiltoniano \mathcal{H} si $\frac{dM(t)}{dt} = 0$ en la formulación de Schrödinger.

El estado M es estacionario si y solo si $[M, U(t)] = 0$ para todo t , y por la proposición 3.7 esto es equivalente a $\{\mathcal{H}, M\}_{\hbar} = 0$. De acuerdo con (4.10), un estado puro $M = P_\psi$ es estacionario si y solo si ψ es un autovector para \mathcal{H}

$$\mathcal{H}\psi = \lambda\psi,$$

y en este caso

$$\psi(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}\lambda t}\psi.$$

En términos físicos, los autovectores de \mathcal{H} son llamados estados vinculados. Los auto valores correspondientes son llamados niveles de energía y son usualmente denotados por E . La ecuación de auto valores $\mathcal{H}\psi = E\psi$ es llamada la ecuación estacionaria de Schrödinger.

4.4 Cuantización

Para estudiar el sistema cuántico es necesario describir el espacio de Hilbert de estados H y el hamiltoniano \mathcal{H} , el cual es un operador autoadjunto en H que define la evolución de un sistema. Cuando el sistema cuántico tiene un análogo clásico, el procedimiento de construcción del correspondiente espacio de Hilbert y el Hamiltoniano es llamado cuantización.

Considere el sistema clásico $((\mathcal{M}, \{, \}), \mathcal{H}_c)$ con la función Hamiltoniano \mathcal{H}_c de tal manera que envíe observables cuánticos acotados en observables. El mapeo Q_\hbar depende del parámetro $\hbar > 0$, y esta restricción al subespacio de observables clásicos acotados \mathcal{A}_o es un mapeo lineal al subespacio \mathcal{A}_0 de observables cuánticos acotados, que satisface las propiedades:

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} \frac{1}{2} Q_\hbar^{-1}(Q_\hbar(f_1)Q_\hbar(f_2) + Q_\hbar(f_2)Q_\hbar(f_1)) = f_1 f_2,$$

y

$$\lim_{\hbar \rightarrow 0} Q_\hbar^{-1}(\{Q_\hbar(f_1), Q_\hbar(f_2)\}_\hbar) = \{f_1, f_2\} \text{ Para todo } f_1, f_2 \in \mathcal{A}_0.$$

Esta propiedad es el principio de correspondencia de Niels Bohr. En particular, $\mathcal{H}_c \rightarrow Q_\hbar(\mathcal{H}_c) = \mathcal{H}$ el operador hamiltoniano para un sistema cuántico.

La mecánica cuántica es diferente de la mecánica clásica, así que la correspondencia $f \rightarrow Q_\hbar(f)$ no puede ser un isomorfismo entre el álgebra de Lie de clásicos acotados y observables cuánticos con respecto a los corchetes clásicos y cuánticos. Se convierte en un isomorfismo solo en el límite $\hbar \rightarrow 0$ en la mecánica clásica. Dado que la mecánica cuántica proporciona una forma más precisa y refinada que la mecánica clásica, la cuantización de un sistema clásico no puede ser única.

Dos cuantizaciones $Q_{\hbar}^{(1)}$ y $Q_{\hbar}^{(2)}$ de un sistema clásico dado $((\mathcal{M}, \{, \}), \mathcal{H}_c)$ son llamados a ser equivalentes si existe un mapeo lineal $\mathcal{U}_{\hbar} : \mathcal{A} \rightarrow \mathcal{A}$ tal que $Q_{\hbar}^{(2)} = Q_{\hbar}^{(1)} \circ \mathcal{U}_{\hbar}$ y $\lim_{\hbar \rightarrow 0} \mathcal{U}_{\hbar} = id$.

Para muchos sistemas cuánticos del mundo real, el correspondiente hamiltoniano \mathcal{H} no depende de una elección de cuantización equivalente, y esta únicamente determinada por la función hamiltoniana clásica \mathcal{H}_c .

Como ejemplo considere el sistema clásico más simple, el cual tiene un grado de libertad es descrito por el espacio fase \mathbb{R}^2 con coordenadas p, q y el corchete de Poisson $\{, \}$ ³, asociado con la forma simpléctica canónica $\omega = dp \wedge dq$. En particular, el corche de Poisson entre observables clásicos p y q tiene la siguiente forma simple:

$$\{p, q\} = 1. \quad (4.11)$$

Siendo este otro postulado de la mecánica cuántica que bajo cuantización los observables clásicos p y q corresponden a observables cuánticos P y Q operadores autoadjuntos sobre un espacio de Hilbert H , que satisfacen las siguientes propiedades:

RC1. Existe un subconjunto lineal denso D contenido en H tal que $P : D \rightarrow D$, $Q : D \rightarrow D$.

RC2. Para todo ψ que pertence a D ,

$$(PQ - QP)\psi = -i\hbar\psi. \quad (4.12)$$

RC3. Cada operador acotado sobre H que conmuta con P y Q es un múltiplo del operador identidad I .

La propiedad 4.12 es llamada la relación de conmutación de Heisenberg para un grado de libertad. En términos del corchete cuántico, toma la forma de $\{P, Q\}_{\hbar} = I$, que es exactamente el mismo corchete de Poisson (4.11). La propiedad (4.4) es un análogo cuántico de la propiedad clásica que la variedad de Poisson $(\mathbb{R}^2, \{, \})$ es no degenerado, cada función de Poisson que conmuta con p y q es una constante.

Los operadores P y Q son llamados, operador momento y operador posición respectivamente. La correspondencia $p \rightarrow P$, $q \rightarrow Q$ con P y Q satisfaciendo 4.4-4.4 son la base de la cuantización de sistemas clásicos. Así la mecánica cuántica vista como un todo, está confirmadz por las predicciones teóricas en numerosos experimentos, citando algunos:

- El Efecto Fotoeléctrico [42].
- El experimento de Ster-Gerlach [18]-[17].

³ $\{f, g\} = \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial f}{\partial q_i} \frac{\partial g}{\partial p_i} - \frac{\partial f}{\partial p_i} \frac{\partial g}{\partial q_i} \right)$

- Efecto Túnel [39].
- Efecto Aharonov-Bohm [1]

De las relaciones de incertidumbre de Heisenberg se sigue que para cualquier estado puro $M = P_\psi$ con $\psi \in D$,

$$\sigma_M(P)\sigma_M(Q) \geq \frac{\hbar}{2}.$$

Siendo este un resultado fundamental ya que es imposible medir la coordenada y el momento de una partícula cuántica simultáneamente, ya que mientras cuanto más precisa sea la medición de una cantidad, menos precisa será la otra cantidad. Una partícula cuántica al no tener una trayectoria observable el movimiento cuántico es muy diferente del movimiento en mecánica clásica.

De forma general, para considerar un sistema clásico con n grados de libertad, solo es necesario describir el espacio fase \mathbb{R}^{2n} con coordenadas $\vec{p} = (p_1, \dots, p_n)$ y $\vec{q} = (q_1, \dots, q_n)$, y el corchete de Poisson $\{, \}$, asociado con la forma canónica simpléctica $\omega = dp \wedge dq$. Esta generalización puede ser encontrada en [52].

4.4.1 Partícula Libre

Una partícula libre clásica con un grado de libertad está descrita por el espacio fase \mathbb{R}^2 con coordenadas p, q y los corchetes de Poisson (4.11) y por la función hamiltoniano $\mathcal{H}_c(p, q) = \frac{p^2}{2m}$. El operador hamiltoniano de una partícula libre cuántica con un grado de libertad es $\mathcal{H}_0 = \frac{P^2}{2m}$, en representación de las coordenadas está dado por:

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dq^2},$$

que es un operador autoadjunto sobre $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dq)^4$ y $D\mathcal{H}_0 = W^{2,2}(\mathbb{R})$ el espacio de Sobolev de funciones en $L^2(\mathbb{R})$. El operador \mathcal{H}_0 es positivo con espectro absolutamente continuo $[0, \infty)$ y de multiplicidad dos. Considere $\mathfrak{h}_o = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}_{>0}, \mathbb{C}^2, d\sigma)$ donde la medida σ está dada por $d\sigma = \sqrt{\frac{m}{2\lambda}} d\lambda$,

$$\mathfrak{h}_o = \left\{ \Psi(\lambda) = \begin{bmatrix} \psi_1(\lambda) \\ \psi_2(\lambda) \end{bmatrix} : \|\Psi\|^2 = \int_0^\infty (|\psi_1(\lambda)|^2 + |\psi_2(\lambda)|^2) d\sigma(\lambda) < \infty \right\}.$$

Definiendo el operador $\mathcal{U}_0 : \mathcal{L}^2(\mathbb{R}, dq) \rightarrow \mathfrak{h}_o$ como

$$\mathcal{U}_0(\psi)(\lambda) = \Psi(\lambda) = \begin{bmatrix} \hat{\psi}(\sqrt{2m\lambda}) \\ \hat{\psi}(-\sqrt{2m\lambda}) \end{bmatrix},$$

⁴Este espacio ha sido presentado en la definición 3.1.7

donde $\hat{\psi}$ es la transformada de Fourier de ψ , de la unitariedad de la transformada de Fourier que el operador \mathcal{U}_0 es unitario, además este operador \mathcal{U}_0 establece el isomorfismo $L^2(\mathbb{R}, dq) \cong \mathfrak{h}_o$, y de la representación del momento \mathcal{H}_0 es una multiplicación por el operador $\frac{p^2}{2m}$, el operador $\mathcal{U}_0\mathcal{H}_0\mathcal{U}_0^{-1}$ es una multiplicación por el operador λ en \mathfrak{h}_o .

Es importante observar que el operador hamiltoniano \mathcal{H}_0 no tiene autovectores, pues la ecuación de autovalores

$$\mathcal{H}_0\psi = \lambda\psi,$$

no tiene soluciones en $L^2(\mathbb{R})$, es decir, su espectro no tiene autovalores. Sin embargo, para cada $\lambda = \frac{1}{2m}k^2 > 0$ esta ecuación diferencial tiene dos soluciones acotadas linealmente independientes

$$\psi^{(\pm)}(q) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\pm \frac{i}{\hbar}kq}, \quad k > 0.$$

En el sentido distribucional, estas auto funciones del espectro continuo combina un kernel de Schwartz del operador unitario \mathcal{U}_0 , que establece el isomorfismo entre $H = L^2(\mathbb{R}, dq)$ y el espacio de Hilbert \mathfrak{h}_o , donde \mathcal{H}_0 actúa como una multiplicación por el operador λ . Para que esto quede más claro, es útil el siguiente grafico El problema de Cauchy para la ecuación de Schroödinger de una

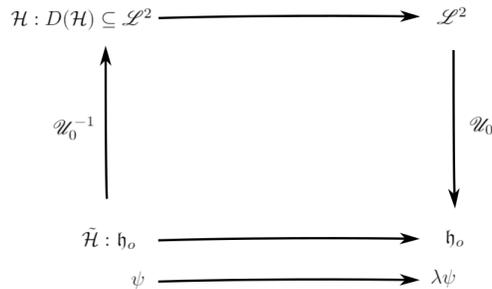


Figura 4.2: Diagrama del operador unitario \mathcal{U}_0

partícula libre

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\psi(t)}{dt} = \mathcal{H}_0\psi(t) \\ \psi(0) = \psi_0 \end{cases} . \quad (4.13)$$

Tomando una partícula cuántica donde $p(t)$ es una variable cualquiera que define el momento de la partícula en un tiempo t . Suponiendo que se conoce la densidad de probabilidad $|\psi|^2$ de $p(0)$, es decir, el momento en el tiempo $t = 0$. Luego, suponga la probabilidad $P(a \leq p(0) \leq b)$ de que p

este entre a y b en el tiempo 0 es

$$P(a \leq p(0) \leq b) = \int_a^b |\psi(p)|^2 dp, \quad a < b \quad a, b \in \mathbb{R},$$

entonces, ¿cuál es la densidad de probabilidad $|\psi(p, t)|^2$ de la partícula con un momento $p(t)$ en cualquier tiempo? La solución a esto, está dada por la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\psi}(p, t)}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \hat{\psi}(p, t),$$

donde $\psi(p, 0) = \psi(p)$

Esto se resuelve usando la propiedad básica de la transformada de Fourier que transforma la diferenciación en multiplicación, aplicando esto a la ecuación de Schrödinger. La solución a esta ecuación diferencial está dada por

$$\hat{\psi}(p, t) = e^{\frac{-ip^2}{2m\hbar}t} c(p),$$

donde

$$\hat{\psi}(p, 0) = e^{\frac{-ip^2}{2m\hbar}t} c(p) = c(p) = \hat{\psi}(p, 0),$$

$$\hat{\psi}(p, t) = e^{\frac{-ip^2}{2m\hbar}t} \hat{\psi}(p). \quad (4.14)$$

Además, en la representación de las coordenadas la solución toma la forma

$$\hat{\psi}(q, t) = e^{-\frac{iq^2}{2m\hbar}t} \hat{\psi}(q).$$

La fórmula (4.14) describe el movimiento de una partícula cuántica y admite la siguiente interpretación física, sea ψ_0 la condición inicial (4.13) tal que la transformada de Fourier $\hat{\psi}_0 = \mathfrak{F}_\hbar(\psi)$ es una función suave y $\|\psi_0\|_{L^2} = \|\hat{\psi}_0\|_{L^2} = 1$

$$\int |\hat{\psi}(p)|^2 dp = 1.$$

Estos estados son llamados paquetes de onda. Entonces, para cada subconjunto compacto $E \subseteq \mathbb{R}$ se tiene $\|\psi(\cdot, t)\|_{L^2} = \|\psi_0\|_{L^2} = 1$ y

$$\lim_{|t| \rightarrow \infty} \int_E |\psi(q, t)|^2 dq = 0, \quad (4.15)$$

así

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q, t)|^2 dq = 1.$$

Para todo t , de (4.15) que la partícula deja el compacto de \mathbb{R} cuando $|t|$ tiende a ∞ y el movimiento cuántico es infinito.

5. Ecuación de Schrödinger

En 1927, los físicos Clinton Joseph Davisson y Lester Halbert Germer, realizaron un experimento importante conocido como experimento de Davisson-Germer[8], que consistía en bombardear un cristal de níquel con un haz de electrones, cuyo resultado condujo a que los electrones eran difractados por la red cristalina. Con esto se confirmaría la hipótesis de De Broglie[5] sobre la dualidad onda-partícula. Sin embargo, la pregunta consecuente es, ¿ondas de qué? Una de las primeras respuestas a esta cuestión la dio Erwin Schrödinger[49], que sugería que las ondas de materia eran electrones partidos y dispersados.

No obstante, esta idea resultaba burda, ya que es imposible encontrar medio electrón o un tercio de electrón, o cualquier fracción de electrón. Lo cual dificulta la interpretación de electrones partidos. Para solucionar esto, el físico Max Born junto con Niels Bohr y algunos de sus colegas, postularon que la interpretación de la onda electrónica debe darse desde la probabilidad[14]. Los lugares donde el cuadrado de la magnitud de onda es grande, es donde la probabilidad de encontrar al electrón es mayor, por ende, los lugares donde dicho cuadrado es menor son donde es menos probable encontrar al electrón. Esta idea es un aspecto con el que se diferencia de la mecánica clásica, sin embargo, esta interpretación de la mecánica cuántica está respaldada por los datos experimentales.

La mecánica cuántica introduce el concepto de probabilidad en el universo a un nivel mucho más profundo. Con miles experimentos realizados hasta la fecha, la naturaleza ondulatoria de la materia implica que esta se explica fundamentalmente de una manera probabilística. Esta interpretación tiene la virtud de que, si estas ondas se comportan como lo hacen las demás ondas, por ejemplo, chocar contra algún obstáculo y desarrollar todo tipo de ondulaciones diferentes, no implica que el electrón que se haya dividido, sino por el contrario, significa que existen varios lugares donde se podrían encontrar ese electrón con una probabilidad no despreciable. Poniendo en práctica esto, si un experimento concreto con un electrón se repite una y otra vez no se obtendrá el mismo resultado para la posición precisa para el electrón. Por el contrario, las sucesivas repeticiones del experimento producirán toda una variedad de resultados diferentes, cumpliéndose la propiedad de que el número de veces que se encuentra el electrón en una posición dada depende de la forma de la onda de probabilidad de dicho electrón. Si el cuadrado de la onda de probabilidad en lugar A es el doble que en el lugar B , entonces la teoría predice que en una sucesión de muchas repeticiones del experimento el electrón se encontrará con una cantidad de veces del doble en el lugar en A de lo que en B . Es decir, que no se puede predecir resultados exactos para los experimentos, lo que más se puede hacer es predecir la probabilidad de que se pueda obtener un resultado determinado.

Unos pocos meses después de que De Broglie[5] formulara teoría cuántica, Schrödinger dio el paso hacia este objetivo, desarrollando una fórmula que determina la forma y la evolución de las ondas de probabilidad o las funciones de onda. Luego de esto, no paso mucho tiempo para hacer nueva física con la ecuación de Schrödinger y la interpretación probabilística para realizar unas predicciones fascinantemente exactas. Sin embargo, muchos consideraron esta conclusión totalmente inaceptable, entre ellos Albert Einstein, es conocida su famosa frase de ‘‘dios no juega a los dados con el universo’’, que advertía de los peligros de la mecánica cuántica. Según Einstein, en el universo no había espacio para un futuro cuya forma exacta incluye un elemento aleatorio. La física debía predecir cómo evoluciona el universo, y no únicamente la probabilidad de que alguna evolución particular pueda producirse. Pero, todos los experimentos, probaron de que Einstein estaba equivocado. Como lo expresaría Hawking ‘‘Einstein estaba confundido, no la teoría cuántica’’[22].

5.1 Caracterización del Potencial

Considere una partícula cuántica en \mathbb{R}^n moviéndose en un campo potencial. Para simplificar notación $\hbar = 1$ y $m = 1/2$, y se usará $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)$ para las coordenadas cartesianas sobre \mathbb{R}^n . Donde dicho operador está dado por la expresión formal diferencial $\mathcal{H} = -\Delta + V(\vec{x})$, donde $V(\vec{x})$ es la función potencial que interactúa con la partícula y Δ es el operador Laplaciano esto es

$$\mathcal{H}_0 = -\Delta = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \dots + \frac{\partial^2}{\partial x_n^2}\right).$$

El operador de Schrödinger de un partícula cuántica libre de masa $m = 1/2$ sobre \mathbb{R}^n , también llamada el operador de energía cinética, y para V , que es el operador multiplicación por $V(\vec{x})$, que también es llamado el operador de energía potencial, así que

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}. \tag{5.1}$$

De acuerdo con el capítulo anterior, el operador \mathcal{H}_0 es autoadjunto, y no acotado sobre $H = \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$, con el dominio $D(\mathcal{H}_0) = W^{2,2}(\mathbb{R}^n)$ y con espectro absolutamente continuo $[0, \infty)$, y el operador \mathcal{V} es autoadjunto y acotado si y solo si $V \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}^n)$. La suma $\mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ no necesariamente es autoadjunta, siendo este el primer gran problema matemático de la mecánica cuántica. Por lo que es necesario caracterizar potenciales $V(\vec{x})$ para que la forma diferencial (5.1) defina un operador autoadjunto \mathcal{H} sobre H

Como primer criterio, se toman A y B operadores densamente definidos en H . el operador B es más pequeño que A en el sentido de Kato, es decir $\mathfrak{D}(A) \subseteq \mathfrak{D}(B)$ y existen a, b reales con $a < 1$ talque para todo ψ que pertenece $\mathfrak{D}(A)$, $\|B\psi\| \geq a\|A\psi\| + b\|\psi\|$.

Similarmente, el operador B es más pequeño que A en el sentido de Kato, si existe α, β reales con

$\alpha < 1$ tal que para todo ψ que pertenece $\mathfrak{D}(A)$,

$$\|B\psi\|^2 \geq \alpha\|A\psi\|^2 + \beta\|\psi\|^2.$$

Un criterio importante es cuando A es un operador autoadjunto con dominio $\mathfrak{D}(A)$ y B es un operador simétrico mas pequeño que A en el sentido de Kato, es decir $B \subset A$, luego $\mathcal{H} = A + B$ tendra dominio $\mathfrak{D}(\mathcal{H}) = \mathfrak{D}(A)$ y es un operador autoadjunto.

Cuando suponemos que $\mathcal{V} = \mathcal{V}_1 + \mathcal{V}_2$, donde $\mathcal{V}_1(\vec{x}) \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$ y $\mathcal{V}_2 \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}^3)$. Entonces, se concluye que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ es un operador autoadjunto y $D(\mathcal{H}) = W^{2,2}(\mathbb{R}^3)$.

Otro criterio útil que se aplica a los potenciales reales $V(\vec{x}) \in \mathcal{L}_{loc}^\infty(\mathbb{R}^n)$, el espacio de funciones acotadas localmente en casi cualquier punto sobre \mathbb{R}^n . En este caso el operador \mathcal{H} , se define por la expresión formal diferencial (5.1), es simétrica sobre $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ y de esto Si suponemos que el potencial $V(\vec{x}) \in \mathcal{L}_{loc}^\infty(\mathbb{R}^n)$ para todo $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ que satisface la condición

$$V(\vec{x}) \leq -Q(|\vec{x}|),$$

donde $Q(r)$ es una función continua positiva creciente sobre $[0, \infty)$ talque

$$\int_0^\infty \frac{dr}{\sqrt{Q(r)}} = \infty.$$

Luego el operador de Schrödinger $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$ es esencialmente autoadjunto sobre $C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$.

5.1.1 Caracterización del espectro

El operador Hamiltoniano \mathcal{H} tiene autovalores que de manera más general es llamado espectro, cuyo significado físico es entendido como la energía de un estado cuántico $\langle \psi |$. Por lo que, el segundo mayor problema matemático en mecánica cuántica es describir las propiedades del espectro del operador de Schrödinger \mathcal{H} . Estos son algunos resultados generales característicos del espectro de \mathcal{H} .

- Suponiendo que $V(\vec{x}) \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}^n)$ y que satisface $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} V(\vec{x}) = \infty$, entonces el operador \mathcal{H} tiene un espectro puro de puntos, es decir, existe una base ortonormal $\{\psi_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ para \mathcal{H} que consiste de autofunciones de \mathcal{H} con autovalores $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n \leq \dots$ de multiplicidad finita $\mathcal{H}\psi_n = \lambda_n\psi_n$, y $\lim_{n \rightarrow \infty} \lambda_n = \infty$.
- Cuando $\mathcal{V} = V_1 + V_2$, donde $V_1(\vec{x}) \in L^q(\mathbb{R}^n)$, $2q \leq n$ para $n < 4$ y $q \geq 2$ para $n \leq 4^1$, y $V_2(\vec{x}) \in L^\infty(\mathbb{R}^n)$ que satisface

$$\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} V_2(\vec{x}) = 0.$$

Luego $\sigma_{ess}(\mathcal{H}) = [0, \infty)^1$, así que $\sigma(\mathcal{H}) \cap (-\infty, 0)$ consiste de autovalores aislados de \mathcal{H} de multiplicidad finita.

Si $V(\vec{x}) \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}^n)$ y $\lim_{|\vec{x}| \rightarrow \infty} |\vec{x}|V(\vec{x}) = 0$, el operador de Schrödinger $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ no tiene autovalores positivos. De manera mas general, si para algún $\epsilon > 0$ se tiene $V(\vec{x}) = O(|\vec{x}|^{-1-\epsilon})$ cuando $|\vec{x}| \rightarrow 0$, el operador de Schrödinger $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ no tiene espectro singular y $\sigma(\mathcal{H}) = [0, \infty)$. Es más, $\sigma(\mathcal{H}) \cap (-\infty, 0)$ consiste de autovalores de \mathcal{H} de multiplicidad finita con el único punto de acumulación en 0.

Recordemos que el espectro absolutamente continuo y el espectro singular de un operador autoadjunto A sobre H está definido, por $\sigma_{ac}(A) = \sigma(A|_{H_{ac}})$ y $\sigma_{sc}(A) = \sigma(A|_{H_{sc}})$ respectivamente, donde H_{ac} y H_{sc} son subespacios cerrados para A definido como lo siguiente. Sea P_A el valor de la medida de proyección para el operador autoadjunto A y sea $v_\phi = (P_A\psi, \psi)$ la medida de Borel finita sobre \mathbb{R} correspondiendo a ϕ pertenece H , $\psi \neq 0$. Luego H_{ac} consiste de 0 y todo ψ que pertenece H talque la medida v_ψ es singular continuo con respecto a la medida de Lebesgue sobre \mathbb{R} .

Finalmente, para el caso físico importante de $n = 3$ hay una estimación para el numero de autovalores del operador de Schrödinger cuando $V(|\vec{x}|) \in \mathcal{L}^\infty(\mathbb{R}^3)$ y

$$C = \int_{\mathbb{R}^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{|V(\vec{x})V(\vec{y})|}{|\vec{x} - \vec{y}|^2} d^3\vec{x}d^3\vec{y} < \infty,$$

entonces, para el número total N de autovalores del operador de Schrödinger $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$, contando multiplicidades, se tiene

$$N \leq \frac{1}{16\pi - 2} C.$$

5.1.2 Teorema del Virial

En mecánica clásica, es conocido el teorema del Virial, el cual establece la relación entre el promedio de la energía cinética de un sistema físico conservativo, con la energía potencial total del sistema. Por lo que es posible encontrar un análogo cuántico de dicho teorema.

Sea $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{V}$ el operador de Schrödinger cuyo potencial es una función homogénea sobre \mathbb{R}^n de grado ρ , es decir, $V(a, \vec{x}) = a^\rho V(\vec{x})$. El teorema del virial en mecánica cuántica es la relación entre los valores esperados de los operadores energía cinética y energía potencial \mathcal{H}_0 y \mathcal{V} en el estado estacionario.

Considere $\psi \in H$, $\|\psi\| = 1$, autofunción del operador de Schrödinger con el potencial homogéneo de grado ρ , y sea $T_c = (\mathcal{H}_0\psi, \psi)$ y $\mathcal{V}_o = (\mathcal{V}\psi, \psi)$ los correspondientes valores esperados de los operadores de energía cinética y potencial. Luego $2T_o = \rho\mathcal{V}_o$.

¹Recuerde que σ_{ess} en el caso de un operador autoadjunto está formado por los puntos no aislados de $\sigma(A)$ y de los autovalores de multiplicidad infinita.

5.2 Ecuación de Schrödinger unidimensional

El operador de Schrödinger sobre la línea real tiene la siguiente forma

$$\mathcal{H} = -\frac{d^2}{dx^2} + \mathcal{V},$$

donde el valor del potencial real $V(\vec{x}) \in \mathcal{L}_{loc}^1(\mathbb{R})$. El correspondiente problema de autovalores $\mathcal{H}\psi = \lambda\psi$ se reduce a la ecuación diferencial ordinaria de segundo orden, que se obtiene de aplicar el operador \mathcal{H}

$$-\frac{d^2\psi}{dx^2} + V(x)\psi = k^2\psi, \quad -\infty < x < \infty, \quad (5.2)$$

donde es conveniente escoger $\lambda = k^2$. En adelante se considerará

$$\int_{-\infty}^{\infty} (1 + |x|)|V(x)|dx < \infty. \quad (5.3)$$

Note que (5.3) implica que $V(|x|)$ decae cuando $|x| \rightarrow \infty$. Esto permite comparar las soluciones $\psi(x, k)$ de la ecuación de Schrödinger (5.2) con las soluciones $e^{\mp ikx}$ de la ecuación de Schrödinger para la partícula libre, que corresponde al caso $V = 0$ en (5.2). También se asumirá que el potencial $V(x)$ en (5.3) es continuo sobre \mathbb{R} .

5.2.1 Funciones de Jost

Tomando como

$$\sigma(x) = \int_x^{\infty} |V(s)|ds \quad y \quad \sigma_1(x) = \int_x^{\infty} \sigma(s)ds.$$

de V que pertenece a $\mathcal{L}^1(\mathbb{R})$, se tiene $\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma(x) = 0$, y como el potencial \mathcal{V} decae (5.3) del teorema de Fubini se obtiene

$$\sigma_1(x) = \int_x^{\infty} \int_{\rho}^{\infty} |V(t)|dtds = \int_x^{\infty} \int_x^t |V(t)|dsdt = \int_x^{\infty} (t-x)|V(t)|dt < \infty,$$

así que σ pertenece a $\mathcal{L}^1(x, \infty)$ para todo x que pertenece a los reales y $\lim_{x \rightarrow \infty} \sigma_1(x) = 0$, de igual forma, las funciones

$$\tilde{\sigma}(x) \int_{-\infty}^x |V(s)|ds \quad y \quad \tilde{\sigma}_1(x) = \int_{-\infty}^x \tilde{\sigma}(s)ds,$$

satisfaciendo $\lim_{x \rightarrow -\infty} \tilde{\sigma}(x) = \lim_{x \rightarrow -\infty} \tilde{\sigma}_1(x) = 0$. La condición (5.3) asegura que para k real la ecuación diferencial (5.2) tiene soluciones $f_1(x, k)$ y $f_2(x, k)$, únicamente definidas por las siguientes asíntotas

$$f_1(x, k) = e^{ikx} + o(1) \quad \text{cuando } x \rightarrow \infty,$$

$$f_2(x, k) = e^{-ikx} + o(1) \quad \text{cuando } x \rightarrow -\infty,$$

estas son llamadas las soluciones de Jost y juegan un rol fundamental en la teoría de una ecuación de Schrödinger unidimensional.

5.3 Partícula Libre

Una partícula libre es aquella que no está sujeta a ninguna fuerza o barrera de potencial y es libre para moverse en un espacio sin límites. Una partícula libre debe llevar, desde un punto de vista clásico, un movimiento rectilíneo; movimiento que haremos coincidir con el eje x . Así, la ecuación de Schrödinger para la partícula libre será

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} = \lambda\psi(x),$$

que es posible escribirlo como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{2m\lambda}{\hbar^2}\psi(x) = 0,$$

haciendo $k^2 = \frac{2m\lambda}{\hbar^2}$. por lo que la ecuación de Schrödinger queda escrita como

$$\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + k^2\psi(x) = 0. \quad (5.4)$$

La solución a la ecuación (5.4) está dada por: $\psi(x) = A \cos(kx) + B \sin(kx)$ o de manera equivalente como

$$\psi(x) = C \exp(ikx) + D \exp(-ikx), \quad (5.5)$$

donde C y D son constantes distintas de A y B , respectivamente.

El estado de la partícula libre en el que $D = 0$ conduce a una función de onda $\psi(x) = C \exp(ikx)$ que representa una onda plana viajando en la dirección del eje x , con sentido hacia la derecha. Por el contrario, si es $C = 0$, la función de onda es $\psi(x) = D \exp(-ikx)$ y representa una onda plana viajando en la dirección del eje x , con sentido hacia la izquierda. Para valores de C y D diferentes de 0, el estado de la partícula consiste en la superposición de dos ondas planas que viajan ambas en el eje x pero que llevan sentidos contrarios.

Puesto que la función de onda (5.4) no se anula para ningún valor x de $-\infty$ a $+\infty$, dicha función no puede ser normalizada en todo el espacio donde tiene presencia. Es fácilmente verificable que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x)\psi(x)dx = \infty.$$

5.4 Oscilador Armónico

La ecuación de Schrödinger con un potencial $V = \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ que hace referencia al oscilador armónico, tiene la forma

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{m\omega^2 x^2}{2} \psi(x) = \lambda\psi(x),$$

para hacer el cálculo más sencillo, se hará la sustitución de $u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, entonces

$$\frac{d}{dx} = \frac{d}{du} \frac{du}{dx} = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \frac{d}{du}, \quad \frac{d^2}{dx^2} = \frac{m\omega}{\hbar} \frac{d^2}{du^2},$$

por lo que, reescribiendo la ecuación de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{m\omega}{\hbar}\right) \frac{d^2\psi(u)}{du^2} + \frac{m\omega^2}{2} \left(\frac{\hbar}{m\omega}\right) u^2\psi(u) = \lambda\psi(u),$$

finalmente, se obtiene

$$-\frac{\hbar\omega}{2} \frac{d^2\psi(u)}{du^2} + \frac{\hbar\omega}{2} u^2\psi(u) = \lambda\psi(u),$$

reescribiendo esta ecuación se obtiene

$$-\frac{d^2\psi(u)}{du^2} + u^2\psi(u) = \gamma\psi(u),$$

donde $\gamma = \frac{2\lambda}{\hbar\omega}$.

La solución de esta ecuación diferencial es

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(u) \exp\left(-\frac{u^2}{2}\right) \quad \text{con } u = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x. \quad (5.6)$$

Donde $H_n(u)$ son los polinomios de Hermite, que forman una base completa para el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R}, dx)$, por eso se considera que (5.6) es la solución.

La energía, son los autovalores del operador Hamiltoniano, que para cada n está dada por $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$ con $n = 0, 1, 2, \dots$, lo cual hace referencia al nivel de energía.

En base a esto, se presenta un análisis gráfico de la solución. En a) aparece la función de onda del estado basal o sea, cuando $n = 0$ a)5.1, en este caso la energía del sistema es $E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}$ además graficando el cuadrado de la función de onda, se encuentra, que para ese estado los valores más altos de la densidad de probabilidad, están alrededor del origen. Esto es claro, ya que, como la partícula no está oscilando se encontrará con mayor probabilidad en el origen; por otra parte, teniendo en cuenta la falta de oscilación, se entiende que existe una energía asociada la cual se conoce como la energía del vacío, que tiene implicaciones físicas importantes, como, por ejemplo, la explicación del

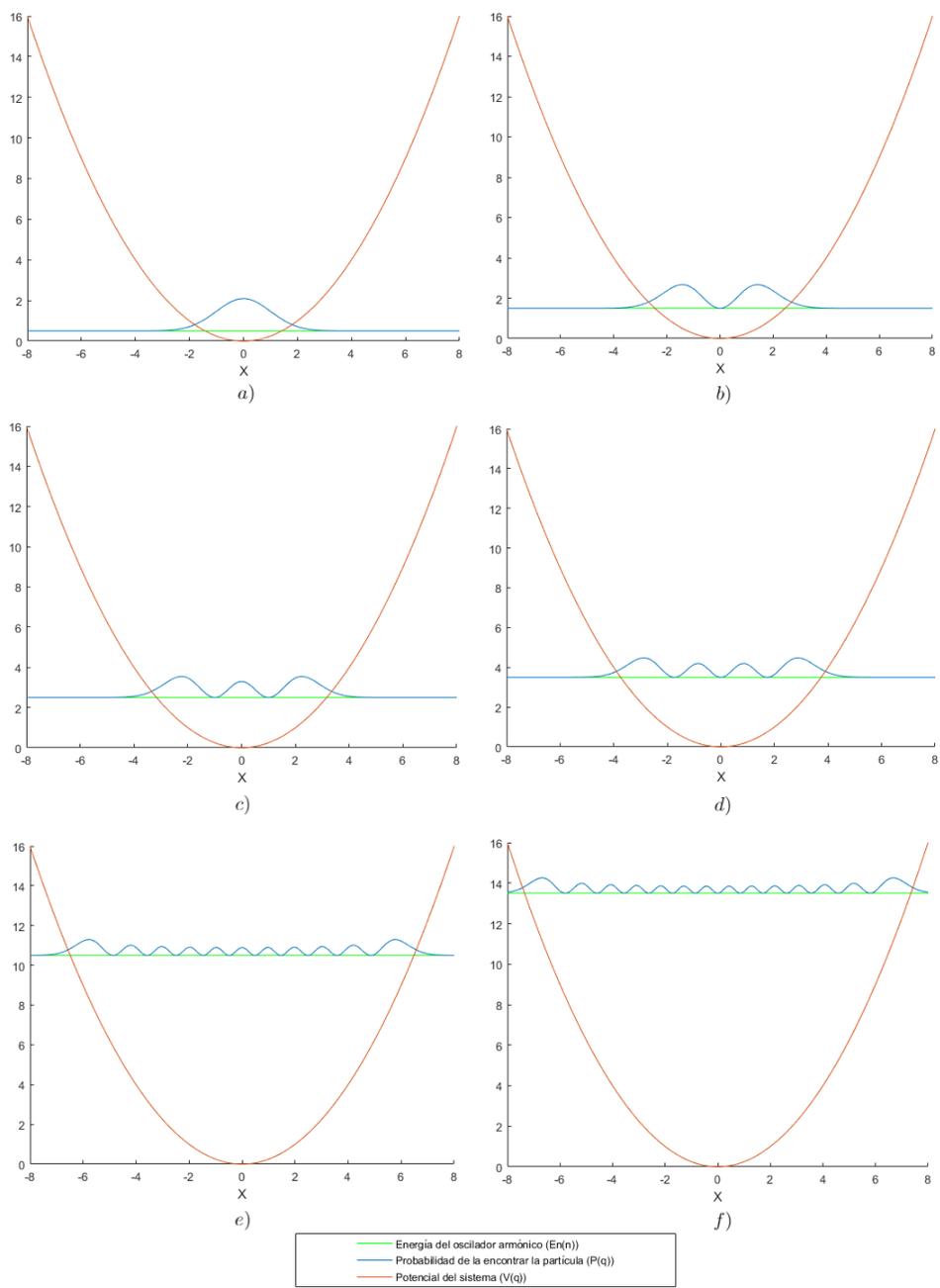


Figura 5.1: Diferentes n para el oscilador armónico cuántico

efecto Casimir [7]. A medida que se aleja del origen, esa probabilidad va a decaer, se dice que, la función de onda puede ir sobre regiones que, desde la mecánica clásica, no estaban permitidas.

Ahora, para el caso de $n = 1$ b)5.1 se observa que la mayor probabilidad de encontrar la partícula ya no está en el origen, sino que está se encuentra, en dos regiones igual de probables de poder hallarla, aun así, a diferencia del caso anterior, la probabilidad de encontrar la partícula en el origen, es 0, es decir, que nunca se encontrara la partícula en ese punto. Por otra parte, también es posible que la partícula, esté en regiones que, analizadas clásicamente no estarían permitidas para la partícula.

En los casos, $n = 2$ c)5.1 y $n = 3$ d)5.1, se puede analizar que, existe una mayor probabilidad de encontrar la partícula, en las regiones más alejadas del origen, las cuales corresponden a la mecánica clásica, que es donde la partícula pasa mayor tiempo; otra posible conclusión, es que dependiendo de si n es par o impar, será posible encontrar la partícula en el origen o será imposible, respectivamente. Por último, es importante decir que este análisis se confirma con los casos de $n = 10$ e)5.1 y $n = 13$ f)5.1.

6. Formulación de integral de caminos de la mecánica cuántica

La perspectiva de Feynman, de la mecánica cuántica, fue basada en las predicciones numéricas, sin embargo, coincide completamente con la imagen formulada anteriormente por Schrödinger. Para entender la formulación integral, se considera el famoso experimento de la doble rendija

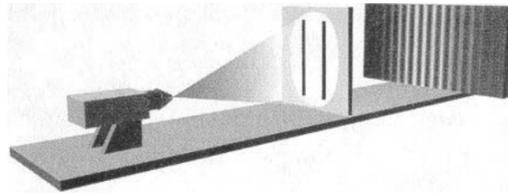


Figura 6.1: Experimento de la doble rendija

Como es ya conocido, cuando existe un observador en el experimento, los resultados de este experimento se comportan como el lanzamiento de partículas, no obstante, cuando dicho observador no existe, o es retirado del experimento, los resultados del experimento corresponden con la interferencia de ondas. Con la imagen de Schrödinger este experimento es entendido como que existe una onda de probabilidad, que toma ambas rendijas interfiriendo consigo misma, por ende, los lugares donde la interferencia es constructiva son aquellos en donde es más probable encontrar la partícula, y donde la interferencia es destructiva es imposible encontrar la partícula.

Sin embargo, Feynman tomó un camino diferente y considero que las partículas realmente atraviesan ambas rendijas, argumentando que lo que ocurría realmente, es que de la fuente a la pantalla, la partícula toma todos los caminos posibles simultáneamente. De cierta manera, lo que quería

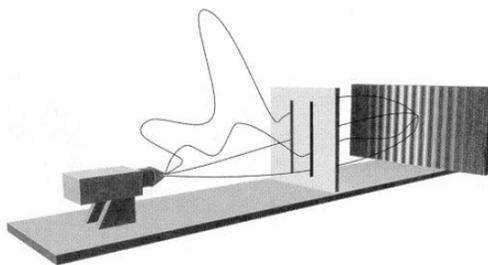


Figura 6.2: Algunos posibles caminos que puede tomar la partícula

expresar Feynman, es que la partícula va simultáneamente por todos los caminos desde su punto de salida hasta el punto de llegada. Con esto, Feynman logró demostrar que es posible asignar un valor

a cada camino y que el promedio de estos caminos produciría exactamente el mismo resultado que daba la probabilidad desde el punto de vista de Schrödinger. Es decir, que no es necesario asignar una onda de probabilidad a la partícula, sino que, la probabilidad de encontrar a la partícula en un punto de interés, se obtiene combinando todas las trayectorias posibles para llegar a ese punto, a esto se le conoce como integral de camino de Feynman.

Feynman también logró demostrar que para objetos de un tamaño al cual nosotros estamos acostumbrados, la regla de asignar valores a cada camino garantiza que todas las trayectorias excepto una se anula a la otra cuando se combinan sus contribuciones. Es decir, que solo existe una trayectoria para objetos de mayor tamaño, y esta es la que se predice mediante las leyes de Newton.

6.1 Integral de Camino de Feynman

La aproximación que dio Feynman dio de la mecánica cuántica es a través de las llamadas integrales de camino que se encarga de expresar el propagador de un sistema cuántico con el operador hamiltoniano \mathcal{H} , como una suma sobre trayectorias del sistema clásico.

6.1.1 Solución Fundamental de la Ecuación de Schrödinger

Introduciendo al operador evolución temporal $U(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}t\mathcal{H}}$ el cual es un operador lineal unitario bajo algunas condiciones de operador \mathcal{H} , la solución $\psi(t)$ del problema de valor inicial para la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

$$\begin{cases} i\hbar \frac{d\psi(\vec{q}, t)}{dt} = \mathcal{H}\psi(\vec{q}, t), \\ \psi(\vec{q}, t)|_{t=0} = \psi(\vec{q}), \end{cases} \quad (6.1)$$

está dado por $\psi(\vec{q}, t) = U(t)\psi(\vec{q})$. Para el operador hamiltoniano

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{P}^2}{2m} + V(\vec{Q}), \quad (6.2)$$

de una partícula cuántica en \mathbb{R}^n moviéndose en un campo potencial $V(\vec{q})$. El problema de valores iniciales (6.1) en representación de la coordenadas se conviertees equivalente a tener

$$\psi(\vec{q}, t) = U(t)\psi(\vec{q}).$$

Derivando a ambos lados de la igualdad con respecto al tiempo se tiene

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{q}, t) = \frac{\partial}{\partial t}U(t)\psi(\vec{q}),$$

Así al sustituir el operador evolución temporal y vía un cálculo directo se obtiene

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{q}, t) = -\frac{i}{\hbar}\mathcal{H}\psi(\vec{q}, t),$$

y sustituyendo el operador Hamiltoniano \mathcal{H} en la representación de las coordenadas se llega a

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{q}, t) = -\frac{i}{\hbar}\left(\frac{-\hbar^2}{2m}\Delta + V(\vec{q})\right)\psi(\vec{q}, t),$$

finalmente, reorganizando los términos se obtiene

$$\begin{cases} i\hbar\frac{d\psi}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + V(\vec{q})\psi, \\ \psi(\vec{q}, t)|_{t=0} = \psi(\vec{q}), \end{cases} \quad (6.3)$$

donde Δ es el operador de Laplace sobre \mathbb{R}^n . Bajo algunas condiciones sobre el potencial $V(\vec{q})$, por ejemplo, $V \in L_{loc}^\infty(\mathbb{R}^n)$, el problema de Cauchy (6.3) tiene una solución fundamental $K(\vec{q}, \vec{q}', t)$ que satisface la ecuación diferencial parcial (6.3) con respecto a la variable \vec{q} en el sentido distribucional ¹ y cumple la condición inicial

$$K(\vec{q}, \vec{q}', t)|_{t=0} = \delta(\vec{q} - \vec{q}'). \quad (6.4)$$

Donde $\delta(\vec{q} - \vec{q}')$ es la función Delta de Dirac. Así la solución al problema de Cauchy (6.3) puede ser formalmente escrita como

$$\psi(\vec{q}', t) = \int_{\mathbb{R}^n} K(\vec{q}, \vec{q}', t)\psi(\vec{q})d^n\vec{q}, \quad (6.5)$$

donde la integral es entendida en un sentido distribucional. Para $\psi \in L^2(\mathbb{R}^n)$, la ecuación (6.5) puede ser entendida como

$$\psi(\vec{q}', t) = \lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|\vec{q}| \leq R} K(\vec{q}', \vec{q}, t)\psi(\vec{q})d^n\vec{q} = \text{l.i.m} \int_{\mathbb{R}^n} K(\vec{q}', \vec{q}, t)\psi(\vec{q})d^n\vec{q},$$

donde l.i.m establece el límite en la norma L^2 . En general, $\psi(\vec{q}, t)$ es solo una solución débil de la ecuación de Schrödinger (6.3), y es una solución regular cuando ψ pertenece al dominio de Garding D_0 . La solución fundamental $K(\vec{q}, \vec{q}', t)$ es el kernel distribucional, en el sentido del teorema de kernel de Schrawtz, del operador evolución $U(t)$. Así que, usando la propiedad de grupo $U(t+t') = U(t)U(t')$

$$\psi(\vec{q}', t) = U(t)\psi(\vec{q}),$$

¹En el sentido de ecuaciones diferenciales parciales y ordinarias una solución débil es un función que puede no ser diferenciable, pero satisface la ecuación en algún sentido, normalmente distribucional [12]

que es lo mismo que decir

$$U(t)\psi(\vec{q}') = \int_{\mathbb{R}^n} k(\vec{q}', \vec{q}, t)\psi(\vec{q})d^n\vec{q},$$

aplicando los operadores $U(t')U^*(t)$:

$$U(t')U^*(t)U(t)\psi(\vec{q}') = \int_{\mathbb{R}^n} U(t')U^*(t)U(t)k(\vec{q}', \vec{q})\psi(\vec{q})d^n\vec{q},$$

como el operador evolución temporal es unitario entonces $U^*(t)U(t) = 1$

$$U(t')\psi(\vec{q}') = \int_{\mathbb{R}^n} U(t')U^*(t)k(\vec{q}', \vec{q})U(t)\psi(\vec{q})d^n\vec{q},$$

$$U(t')\psi(\vec{q}') = \int_{\mathbb{R}^n} U(t' - t)k(\vec{q}', \vec{q})\psi(\vec{q}, t)d^n\vec{q},$$

es decir,

$$\psi(\vec{q}', t') = \int_{\mathbb{R}^n} k(\vec{q}', \vec{q}, t' - t)\psi(\vec{q}, t)d^n\vec{q}.$$

Finalmente se puede escribir (6.5) como

$$\psi(\vec{q}', t') = \int_{\mathbb{R}^n} K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t)\psi(\vec{q}, t)d^n\vec{q}, \quad (6.6)$$

donde $K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t) = K(\vec{q}', \vec{q}, t' - t)$. La función $|K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t)|^2$ puede ser físicamente entendida como la función de distribución de probabilidad condicional de encontrar una partícula cuántica en un punto $\vec{q}' \in \mathbb{R}^n$ en el tiempo t' siempre que estuviese en el punto $\vec{q} \in \mathbb{R}^n$ en el tiempo t . En terminología física, el kernel distribucional $K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t)$ del operador evolución $U(t - t')$ es llamada la amplitud de probabilidad compleja, o solamente la amplitud o propagador. En la notación de Dirac $K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t) = \langle \vec{q}', t' | \vec{q}, t \rangle$.

Encontrar el propagador de un sistema cuántico es un problema fundamental de la física, cuando la descomposición espectral del operador hamiltoniano \mathcal{H} es conocida, el propagador puede ser obtenido en una forma cerrada. Esto es, suponga por simplicidad que un operador \mathcal{H} tiene un espectro puro de puntos, es decir, hay una base ortonormal del espacio de Hilbert $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^n, d^n\vec{q})$ consistiendo de las auto funciones $\{\psi_n(\vec{q})\}_{n=0}^{\infty}$ de \mathcal{H} con auto valores E_n , se tiene

$$\psi(\vec{q}) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(\vec{q}), \quad c_n = \int_{\mathbb{R}^n} \psi(\vec{q}) \overline{\psi_n(\vec{q})} d^n\vec{q},$$

aplicando el operador de evolución temporal se obtiene

$$U(t)\psi(\vec{q}) = U(t) \sum_{n=0}^{\infty} c_n \psi_n(\vec{q}),$$

así que

$$\psi(\vec{q}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} c_n \psi_n(\vec{q}),$$

tomando las coordenadas primadas, y reemplazando c_n se obtiene

$$\psi(\vec{q}', t') = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t'} \psi_n(\vec{q}') \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi(\vec{q})} \psi(\vec{q}) d^n \vec{q},$$

reorganizando los términos

$$\psi(\vec{q}', t') = \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t'} \psi_n(\vec{q}') \overline{\psi(\vec{q})} \psi(\vec{q}) d^n \vec{q},$$

aplicando $U^*(t)U(t) = 1$ análogamente como antes

$$\psi(\vec{q}', t') = U^*(t)U(t) \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t'} \psi_n(\vec{q}') \overline{\psi(\vec{q})} \psi(\vec{q}) d^n \vec{q},$$

$$\psi(\vec{q}', t') = \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t' - t)} \psi_n(\vec{q}') \overline{\psi(\vec{q})} \psi(\vec{q}, t) d^n \vec{q},$$

donde las series e integrales convergen en el sentido de L^2 . Por lo que se puede concluir comparando con (6.6) que

$$K(\vec{q}', t; \vec{q}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n T} \psi_n(\vec{q}') \overline{\psi(\vec{q})}, \quad T = t' - t. \quad (6.7)$$

La serie (6.7) converge en el sentido distribucional, y da una representación del propagador en términos de la descomposición espectral de \mathcal{H} . Una representación similar del propagador existe cuando el Hamiltoniano \mathcal{H} tiene un espectro absolutamente continuo. Considerando el caso de una partícula libre cuántica con el operador hamiltoniano

$$\mathcal{H}_o = \frac{\vec{P}^2}{2m},$$

la correspondiente ecuación de Schrödinger puede ser resuelta por el método de Fourier, y se obtiene

$$\begin{aligned}\psi(\vec{q}', t) &= \text{l.i.m.} (2\pi\hbar)^{-n/2} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{q}'\vec{p} - \frac{\vec{p}^2}{2m}T)} \hat{\psi}(\vec{p}, t) d^n \vec{p}, \\ &= \text{l.i.m.} \int_{\mathbb{R}^n} K(\vec{q}', t; \vec{q}, t) \psi(\vec{q}, t) d^n \vec{q},\end{aligned}$$

se obtiene que

$$K(\vec{q}', t; \vec{q}, t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^n} \int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}(\vec{q}' - \vec{q}) - \frac{\vec{p}^2}{2m}T)} d^n \vec{p}, \quad (6.8)$$

usando la formula clásica integral de Fresnel

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{iax^2} dx = e^{\frac{\pi i \text{sgn}(a)}{4}} \sqrt{\frac{\pi}{|a|}}, \quad (6.9)$$

y completando el cuadrado en (6.8), se obtiene la expresión del propagador para una partícula libre

$$K(\vec{q}', t; \vec{q}, t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar T}\right)^{\frac{n}{2}} e^{\frac{im}{2\hbar T}(\vec{q}' - \vec{q})^2}, \quad T > 0. \quad (6.10)$$

Reemplazando formalmente el tiempo físico real t en la ecuación de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi,$$

para una partícula cuántica libre con masa m por el tiempo euclidiano $-it$, se obtiene la ecuación de difusión de calor

$$\frac{1}{D} \frac{\partial u}{\partial t} = \Delta u,$$

sobre \mathbb{R}^n con el coeficiente de difusión $D = \frac{\hbar}{2m}$. Es importante remarcar que mediante el procedimiento formal el propagador (6.10) de una partícula cuántica libre es obtenido del kernel de calor sobre \mathbb{R}^n por la continuación analítica $T \rightarrow -iT$ [19].

6.1.2 Integral de camino de Feynman en el espacio fase

Para un operador hamiltoniano general $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o + V$, donde $V = V(\vec{Q})$, no hay una formula simple para el propagador $K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t)$ como (6.10). Este es porque los operadores \mathcal{H}_o y V en general no conmutan, así que $e^{-\frac{i}{\hbar}t\mathcal{H}} \neq e^{-\frac{i}{\hbar}t\mathcal{H}_o} e^{-\frac{i}{\hbar}tV}$.

El descubrimiento fundamental de Feynman fue mostrar que existe otra representación del propagador para un sistema cuántico en términos del sistema clásico correspondiente. Feynman aproxima para el caso de una partícula con un grado de libertad, se basa en la formula del producto de Lie-Kato-Trotter, que permite expresar el exponencial $e^{i(A+B)}$ de operadores auto adjuntos que no conmutan en términos de las exponenciales individuales e^{iA} y e^{iB} .

Theorem 6.1.1. *Sea A y B operadores auto adjuntos sobre \mathcal{H} tal que $A + B$ es esencialmente auto adjunto sobre $\mathfrak{D}(A) \cap \mathfrak{D}(B)$, luego para ψ que pertenece a \mathcal{H}*

$$e^{(A+B)}\psi = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{\frac{i}{n}A} e^{\frac{i}{n}B})^n \psi.$$

Se considerara que $\mathcal{H} = \mathcal{H}_o + V$ es esencialmente auto adjunto sobre $\mathfrak{D}(\mathcal{H}_o) \cap \mathfrak{D}(V)$, asi que la fórmula de Lie-Kato-Trotter es aplicable, por lo que en este caso $A = -\frac{T}{\hbar}\mathcal{H}$ y $B = -\frac{T}{\hbar}V$, y se obtiene la siguiente representación en la topología fuerte de operadores

$$e^{-\frac{i}{\hbar}T\mathcal{H}} = \lim_{n \rightarrow \infty} (e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathcal{H}_o} e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}V})^n, \quad \Delta t = \frac{T}{n}, \quad (6.11)$$

donde $T = t' - t$. En la representación de la posición del operador $e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}V}$ es una multiplicación por el operador $-\frac{i\Delta t}{\hbar}V(q)$, y el kernel distribucional del operador $e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathcal{H}_o}$ esta dado por (6.8), donde T es reemplazado por Δt . Así que, el kernel distribucional $K(q', q; \Delta t)$ del operador $e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathcal{H}_o} e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}V}$ esta dado por

$$K(q', q; \Delta t) = \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p(q'-q) - (\frac{p^2}{2m} + V(q))\Delta t)} dp. \quad (6.12)$$

el kernel del producto de dos operadores es una composición de los kernels individuales correspondientes, para el kernel distribucional $K_n(q', t'; q, t)$ del operador $(e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}\mathcal{H}_o} e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar}V})^n$ se obtiene de la siguiente representación integral

$$K_n(q', t'; q, t) = \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \dots \int \prod_{k=0}^{n-1} K(q_{k+1}, q_k; \Delta t) \prod_{k=1}^{n-1} dq_k, \quad (6.13)$$

donde $q_o = q$, $q_n = q'$. Ahora se reemplaza cada factor $K(q_{k+1}, q_k; \Delta t)$ en (6.13) por la representación integral (6.12), donde la variable de integración es denotado por p_k , $k = 0, \dots, n-1$. Con el cambio de orden de integración en el resultado y usando (6.11), se obtiene la representación del propagador de una partícula cuántica como un límite de múltiples integrales. Cuando el número de integrales tiende a infinito

$$\begin{aligned} K(q', t'; q, t) &= \lim_{n \rightarrow \infty} K_n(q', t'; q, t) \\ &= \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^{2n-1}} \int \exp\left\{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} (p_k(q_{k+1} - q_k) - \mathcal{H}_c(p_k, q_k))\Delta t\right\} \frac{dp_o}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar}. \end{aligned} \quad (6.14)$$

Aquí $\mathcal{H}_c = \frac{p^2}{2m} + V(q)$ es la función hamiltoniana clásica, y $q_o = q$, $q_n = q'$. La ecuación (6.14) tiene la interpretación de que para cada punto $(p_o, p_1, \dots, p_{n-1}, q_1, \dots, q_{n-1})$ que pertenece \mathbb{R}^{2n-1} se asigna una parte lineal del camino σ en el espacio de fase $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ de la partícula clásica, que se

define por los siguientes intervalos de tiempo, sea $t_k = t + k\Delta t$ y $\sigma(\tau) = (p(\tau), q(\tau), \tau)$, donde

$$p(\tau) = p_k, \quad q(\tau) = q_k + (\tau - t_k) \frac{q_{k+1} - q_k}{t_{k+1} - t_k},$$

y τ pertenece al intervalo $[t_k, t_{k+1}]$, $k = 0, \dots, n-1$. Luego para para potenciales integrables en Riemann $V(q)$ se tiene

$$\sum_{k=0}^{n-1} (p_k(q_{k+1} - q_k) - \mathcal{H}_c(p_k, q_k)\Delta t) = S(\sigma) + o(1), \quad \text{cuando } n \rightarrow \infty, \quad (6.15)$$

donde

$$S(\sigma) = \int_{\sigma} (pdq - \mathcal{H}_c) d\tau = \int_t^{t'} (p(\tau)\dot{q}(\tau) - \mathcal{H}_c(p(\tau), q(\tau))) d\tau,$$

es el funcional acción de un sistema clásico con el hamiltoniano clásico $\mathcal{H}_c(p, q)$. Es decir, que la interpretación de (6.14) es un integral sobre el espacio $\tilde{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}$ de todos los caminos $\sigma(\tau) = (p(\tau), q(\tau), \tau)$ en el espacio de fase $\mathbb{R}^2 \times \mathbb{R}$ tal que $q(t) = q$ y $q(t') = q'$, así qué:

$$K(q', t'; q, t) = \int_{\tilde{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}} e^{\frac{i}{\hbar} S(\sigma)} \mathcal{D}p \mathcal{D}q, \quad (6.16)$$

donde la medida $\mathcal{D}p \mathcal{D}q$ sobre $\tilde{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}$ está dada por

$$\mathcal{D}p \mathcal{D}q = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{dp_o}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{dp_k dq_k}{2\pi\hbar}. \quad (6.17)$$

La representación (6.16)-(6.17) es el integral de camino de Feynman en el espacio fase para el propagador de un partícula cuántica. Esto expresa el propagador $K(q', t'; q, t)$ como la suma ponderada sobre todas los posibles caminos de la partícula clásica, los caminos σ que pertenecen a $\tilde{P}(\mathbb{R}^2)_{q,t}^{q',t'}$, donde cada camino σ tienen un peso complejo $\exp(\frac{i}{\hbar} S(\sigma))$. Lo que se muestra con esta representación se muestra la diferencia fundamental entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica. Donde en la mecánica clásica la partícula se mueve sobre una trayectoria definida, con sus respectivos puntos extremos fijos, mientras que en la mecánica cuántica todos los posibles caminos contribuyen a la amplitud de probabilidad $K(q', t'; q, t)$. También es posible notar la diferencia entre la mecánica clásica y la mecánica cuántica mediante el límite semiclásico $\hbar \rightarrow 0$. Esto es, como $\hbar \rightarrow 0$ los pesos de $\exp\{\frac{i}{\hbar} S(\sigma)\}$ oscilan rápidamente y las contribuciones a (6.16) se cancelan mutuamente, excepto si la reacción sea casi constante. este último ocurre cerca de los puntos críticos, que dan la mayor contribución a (6.16). Así es como las trayectorias clásicas de una partícula surgen de su descripción cuántica.

6.1.3 De la integral de camino de Feynman a la ecuación de Schrödinger

Es posible demostrar que la formulación integral de Feynman[15] es análoga a la formulación de Schrödinger [49], donde se tomara el caso físico más simple que es el de la partícula libre. Para empezar se toma $n = 4$ en la ecuación (6.13) donde cada $K(q_{k+1}, q_k; \Delta t)$ estará dado por (6.10), de tal manera que el propagador se escribe como

$$K(q_4, t_4, q_0, t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 dq_3 e^{\frac{im}{2\hbar\tau} [(q_1 - q_0)^2 + (q_2 - q_1)^2 + (q_3 - q_2)^2 + (q_4 - q_3)^2]}, \quad (6.18)$$

también se tendrá en cuenta el propagador cuando $n = 3$

$$K(x_3, t_3, q_0, t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^{3/2} \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 e^{\frac{im}{2\hbar\tau} [(q_1 - q_0)^2 + (q_2 - q_1)^2 + (q_3 - q_2)^2]}, \quad (6.19)$$

reescribiendo (6.18) se tiene

$$K(q_4, t_4, q_0, t_0) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty} dq_1 dq_2 e^{\frac{im}{2\hbar\tau} [(q_1 - q_0)^2 + (q_2 - q_1)^2 + (q_3 - q_2)^2]} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} (q_4 - q_3)^2} dq_3. \quad (6.20)$$

Ahora con ayuda de (6.19), (6.20) quedara como

$$K(q_4, t_4, q_0, t_0) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} (q_4 - q_3)^2} K(q_3, t_3, q_0, t_0) dq_3.$$

El termino $K(q_3, t_3, q_0, t_0)$ queda dentro de la integral ya que depende de q_3 y se tienen que sumar todos los caminos de q_0 a q_3 . Renombrando $K(q_4, t_4, q_0, t_0) = \psi(q_4, t_4)$ y $K(q_3, t_3, q_0, t_0) = \psi(q_3, t_3)$

$$\psi(q_4, t_4) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} (q_4 - q_3)^2} \psi(q_3, t_3) dq_3.$$

Pero ahora, se puede tener cualquier n , es decir

$$\psi(q, t + \tau) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} (q - q_3)^2} \psi(q_3, t) dq_3.$$

Haciendo el cambio de variable de $q - q_3 = -z$, entonces $z = q_3 - q$, $dz = dq_3$

$$\psi(q, t + \tau) = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} z^2} \psi(q + z, t) dz. \quad (6.21)$$

Pero, hay que notar lo siguiente

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ix^2} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \cos(x^2) + i \operatorname{sen}(x^2) f(x) dx,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{ix^2} f(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} \cos(x^2) f(x) dx + i \int_{-\infty}^{\infty} \sin(x^2) f(x) dx.$$

Pero esto x^2 siempre es positivo por lo que siempre ira creciendo y se tendrá el sin y cos de un numero grande y sus graficas son 6.3, 6.4 respectivamente:

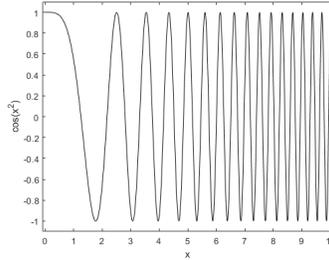


Figura 6.3: grafica de la funcion $\cos(x^2)$

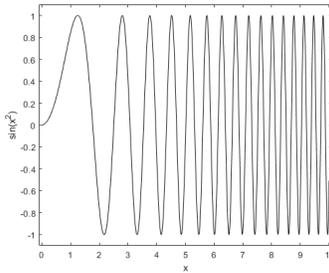


Figura 6.4: grafica de la funcion $\sin(x^2)$

Es decir que, al momento de integrar, la mayor contribución de la integral será cuando los valores de q estén muy cerca del origen. Gracias a esto, se podrá hacer una aproximación, y es que el termino $\psi(q + z, t)$ de la ecuación (6.21), se expandirá en una serie de Taylor a segundo orden

$$\psi(q + z, t) = \psi(q, t) + z \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial q} + \frac{z^2}{2} \frac{\partial^2 \psi(q, t)}{\partial q^2}, \quad (6.22)$$

de manera análoga para el termino $\psi(q, t + \tau)$ se expandirá en un serie de Taylor a primer orden

$$\psi(q, t + \tau) = \psi(q, t) + \tau \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial t}. \quad (6.23)$$

Es natural preguntarse por qué esta última a primer orden, cuando anteriormente se expande a segundo orden. Esto es debido a que la coordenada espacial que en este caso es z esta al cuadrado y nuestra coordenada temporal τ tiene grado 1 en la exponencial, entonces esto debe de ser menor

o igual que 1 porque después de este intervalo empezara a oscilar rápidamente, lo que indica que z^2 es del mismo orden que τ .

Ahora se reemplaza (6.22) y (6.23) en la ecuación (6.21)

$$\psi(q, t) + \tau \frac{\partial \psi(q, t)}{\partial q} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{c} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} z^2} \psi(q, t) dz + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{c} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} z^2} z \frac{\partial \psi}{\partial q} dz + \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{c} e^{\frac{im}{2\hbar\tau} z^2} \frac{z^2}{2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2} dz, \quad (6.24)$$

la integral para $\frac{\partial \psi}{\partial q}$ es igual a 0, ya que z tiene orden impar y estas integrales están definidas de manera general

$$\int_{-\infty}^{\infty} q^k e^{-\frac{q^2}{a}} dq = \begin{cases} \frac{\sqrt{\pi}}{2^{k/2}} a^{k+1/2} (k-1)!! & \text{si } k \text{ es par} \\ 0 & \text{si } k \text{ es impar} \end{cases},$$

entonces, aplicando lo anterior, se obtiene

$$\psi(q, t) + \tau \frac{\partial \psi}{\partial t} = \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \sqrt{\frac{2\pi i \hbar \tau}{m}} \psi(q, t) + \frac{1}{2} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \frac{\sqrt{\pi}}{2} \left(\frac{2\hbar\tau i}{m} \right)^{3/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2},$$

es decir

$$\tau \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\sqrt{\pi}}{4} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \tau}} \left(\frac{2\hbar\tau i}{m} \right)^{3/2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2},$$

simplificando finalmente se obtiene

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial q^2}. \quad (6.25)$$

la ecuación (6.25) es la ecuación de Schrödinger para la partícula libre dependiente del tiempo. A pesar de que en este caso se hizo para la partícula libre, es posible llegar a un resultado análogo tomando un potencial $V(q) \neq 0$ [19].

6.1.4 Integral de Camino de Feynman en el espacio de configuración

Usando la integral de Fresnel (6.9) para la integración sobre p en (6.12), se obtiene la fórmula para el kernel distribucional del operador $e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar} \mathcal{H}_0} e^{-\frac{i\Delta t}{\hbar} V}$:

$$\sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t}} e^{\frac{i}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \frac{(q-q')^2}{\Delta t} - V(q) \Delta t \right\}}.$$

Repetiendo la división temporal, en lugar de (6.14) se obtiene que

$$K(q', t'; q, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \times \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - V(q_k) \right) \right\} \prod_{k=1}^{n-1} dq_k. \quad (6.26)$$

asumiendo que $q_k = q(t_k)$, $k = 0, \dots, n$ para algún camino suave $\gamma(\tau) = q(\tau)$ en \mathbb{R} , donde $q_0 = q$ y $q_n = q'$, se obtiene cuando $n \rightarrow \infty$,

$$\sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - V(q_k) \right) \Delta t = S(\gamma) + o(1),$$

donde

$$S(\gamma) = \int_t^{t'} L(\gamma'(\tau)) d\tau = \int_t^{t'} L(q(\tau), \dot{q}(\tau)) d\tau, \quad L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2} m \dot{q}^2 - V(q),$$

es la funcional acción de la partícula clásica de masa m moviéndose en el potencial $V(q)$. Lo que indica que el límite de las múltiples integrales en (6.26) es la integral de Feynman en el espacio de configuración

$$K(q', t'; q, t) = \int_{P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}} e^{\frac{i}{\hbar} S(\gamma)} \mathcal{D}q. \quad (6.27)$$

donde $P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}$ es el espacio caminos suaves parametrizados γ en el espacio de configuración \mathbb{R} que conecta los puntos q y q' , y la medida $\mathcal{D}q$ sobre $P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}$ esta dada por

$$\mathcal{D}q = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \prod_{k=1}^{n-1} dq_k. \quad (6.28)$$

Como la integral de camino de Feynman en el espacio de fase, la integral de camino de Feynman en el espacio de configuración no es una integral en el sentido de la teoría de integración, el significado matemático correcto de (6.27)-(6.28) es dado por (6.26). La fórmula (6.27) expresa el propagador $K(q', t'; q, t)$ como la suma sobre todas las historias en el espacio de configuración de la partícula clásica, los caminos γ que pertenece $P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}$, asignando a cada camino γ un peso complejo $\exp\{\frac{i}{\hbar} S(\gamma)\}$.

La convergencia en (6.26), como también en (6.14), es entendido en el sentido distribucional. En particular, para todo ψ que pertenece a $L^2(\mathbb{R})$,

$$(e^{-\frac{i}{\hbar} T \mathcal{H}} \psi)(q) = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \times \int_{\mathbb{R}^n} \dots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - V(q_k) \right) \Delta t \right\} \psi(q_n) \prod_{k=1}^n dq_k,$$

donde todas las integrales son impropias y todos los límites, en el sentido L^2 .

6.1.5 Varios grados de Libertad

$$\mathcal{H} = \frac{\vec{P}}{2m} + V(\vec{Q}),$$

es el operador hamiltoniano de una partícula cuántica en \mathbb{R}^n moviéndose en el campo potencial $V(\vec{q})$. Como en el caso de un grado de libertad, usando la ecuación de producto de Lie-Kato-Trotter, el propagador $K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t)$ es expresado como un límite de múltiples integrales cuando el número de integraciones va hacia infinito,

$$K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t) = \lim_{n \rightarrow \infty} \int_{\mathbb{R}^{(2N-1)n}} \cdots \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=1}^{n-1} (\vec{p}_k (\vec{q}_{k+1} - \vec{q}_k) - \mathcal{H}_c(\vec{p}_k, \vec{q}_k) \Delta t) \right\} \frac{d\vec{p}_o}{2\pi\hbar} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{d\vec{p}_k d\vec{q}_k}{2\pi\hbar}. \quad (6.29)$$

aca $\mathcal{H}_c(\vec{p}, \vec{q}) = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{q})$ es la función hamiltoniano clásico, y $\vec{q}_o = \vec{q}$, $\vec{q}_N = \vec{q}'$. Esta representación es simbolizada por el camino integral de Feynman en el espacio fase $\mathcal{M} = T^*\mathbb{R}^n$,

$$K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t) = \int_{\tilde{P}(\mathbb{R}^2)_{\vec{q}, t}^{\vec{q}', t'}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_{\sigma} (\vec{p}\vec{q} - \mathcal{H}_c(\vec{p}, \vec{q})) d\tau} \mathcal{D}\vec{p} \mathcal{D}\vec{q}, \quad (6.30)$$

donde

$$\mathcal{D}\vec{p} \mathcal{D}\vec{q} = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{d\vec{p}_o}{(2\pi\hbar)^n} \prod_{k=1}^{n-1} \frac{d\vec{p}_k d\vec{q}_k}{(2\pi\hbar)^n}.$$

y $\tilde{P}(\mathbb{R}^2)_{\vec{q}, t}^{\vec{q}', t'}$ es el espacio de todos los caminos posibles σ en el espacio de fase $\mathcal{M} \times \mathbb{R}$ que conecta los puntos (\vec{q}, t) y (\vec{q}', t') . De igual forma, el propagador $K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t)$ puede ser escrito como

$$K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t} \right)^{\frac{nN}{2}} \times \int_{\mathbb{R}^{(n-1)N}} \int \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\frac{m}{2} \left(\frac{\vec{q}_{k+1} - \vec{q}_k}{\Delta t} \right)^2 - V(\vec{q}_k) \right) \right\} \prod_{k=1}^{N-1} d\vec{q}_k. \quad (6.31)$$

Esta ecuación simboliza la integral de camino de Feynman en el espacio de configuración,

$$K(\vec{q}', t'; \vec{q}, t) = \int_{P(M)_{\vec{q}, t}^{\vec{q}', t'}} e^{\frac{i}{\hbar} \int_t^{t'} L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) d\tau} \mathcal{D}\vec{q}, \quad (6.32)$$

donde $L(\vec{q}, \dot{\vec{q}}) = \frac{1}{2} m \dot{\vec{q}}^2 - V(\vec{q})$ es el correspondiente Lagrangiano,

$$\mathcal{D}\vec{q} = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{nN}{2}} \prod_{k=1}^{N-1} d^n \vec{q}_k,$$

y $P(M)_{\vec{q}, t}^{\vec{q}', t'}$ es el espacio de caminos suaves parametrizados en el espacio de configuración M que conecta \vec{q} y \vec{q}' . Cuyo significado matemático de (6.32) es el mismo de (6.27).

6.2 Integral de Camino de Feynman para el oscilador armónico

Lo que se podría pensar en primera instancia es que la integral de camino de Feynman es inútil al momento de aplicarlo a cálculos reales, sin embargo, esta puede ser evaluada exactamente y es muy importante para ciertos casos, como en este caso especial es el oscilador armónico.

6.2.1 Integración Gaussiana

La evaluación de la integral de camino de Feynman se simplifica cuando las integrales de dimensión finita correspondientes se pueden calcular exactamente para cada n . Este es el caso importante de las integrales Gaussianas.

Lemma 6.2.1. *Sea A una matriz real simétrica, positiva definida $n \times n$, se tiene*

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{-\frac{1}{2}(A\vec{q},\vec{q})+(\vec{p},\vec{q})} d^n \vec{q} = \frac{\sqrt{(2\pi)^n}}{\det A} e^{\frac{1}{2}(A^{-1}\vec{p},\vec{p})}, \quad (6.33)$$

donde $(,)$ se entiende como el producto interno Euclídeo en \mathbb{R}^n .

Un resultado importante también es, Sea A una matriz real no degenerada simétrica $n \times n$, luego

$$\int_{\mathbb{R}^n} e^{\frac{i}{2}(A\vec{q},\vec{q})+i(\vec{p},\vec{q})} d^n \vec{q} = e^{\frac{\pi i n}{4} - \frac{\pi i v}{2}} \frac{\sqrt{(2\pi)^n}}{|\det A|} e^{-\frac{i}{2}(A^{-1}\vec{p},\vec{p})}, \quad (6.34)$$

donde la integral es entendida en el sentido distribucional como $\lim_{R \rightarrow \infty} \int_{|\vec{q}| \leq R}$ y v es el número de autovalores negativos de A . Sin embargo, es posible encontrar una relación aún más general para el caso donde A es una matriz compleja. Tomando a C como una matriz compleja $n \times n$ talque su parte hermítica $\frac{1}{2}(C + C^*)$ es definida como positiva, se tiene

$$\int_{\mathbb{C}^n} e^{-(C\vec{z},\vec{z})+(\vec{a},\vec{z})+(\vec{z},\vec{b})} d^{2n} \vec{z} = \frac{\pi^n}{\det C} e^{(C^{-1}\vec{a},\vec{b})}, \quad (6.35)$$

donde $(,)$ es entendido como el producto interno Hermitiano estándar en \mathbb{C}^n , \vec{a}, \vec{b} que pertenecen a \mathbb{C}^n , y $d^{2n} \vec{z} = d^2 z_1, \dots, d^2 z_n$.

6.2.2 Propagador del oscilador armónico

El oscilador armónico clásico con un grado de libertad esta descrito por la función Lagrangiano $L(q, \dot{q}) = \frac{1}{2}m(\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)$. El correspondiente operador hamiltoniano para un oscilador armónico cuántico esta dado por

$$\mathcal{H} = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2 Q^2}{2}.$$

por lo que el calculo exacto de la integral de camino de Feynman para el espacio de configuración esta dado por

$$\int_{P(\mathbb{R})_{q,t}^{q',t'}} e^{\frac{im}{2\hbar} \int_t^{t'} (\dot{q}^2 - \omega^2 q^2)} \mathcal{D}q = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\frac{m}{2\pi\hbar i \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \times \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \int \exp \left\{ \frac{im}{2\hbar} \sum_{k=0}^{n-1} \left(\left(\frac{q_{k+1} - q_k}{\Delta t} \right)^2 - w^2 q_k^2 \right) \Delta t \right\} \prod_{k=1}^{n-1} dq_k.$$

en (6.26) es gaussiana y se puede calcular exactamente usando (6.34). Así que, se tiene

$$\sum_{k=0}^{n-1} ((q_{k+1} - q_k)^2 - \epsilon^2 q_k^2) = (A_{n-1} \vec{q}, \vec{q}) - 2(\vec{p}, \vec{q}) + q^2 + q'^2,$$

donde $\epsilon = \omega \Delta t$, $\vec{q} = (q_1, \dots, q_{n-1})$, $\vec{p} = (q, 0, \dots, 0, q')$ son vectores en \mathbb{R}^{n-1} , y A_{n-1} es la siguiente matriz tridiagonal $(n-1) \times (n-1)$:

$$A_{n-1} = \begin{pmatrix} 2 - \epsilon^2 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ -1 & 2 - \epsilon^2 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 - \epsilon^2 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 - \epsilon^2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -1 & 2 - \epsilon^2 \end{pmatrix}.$$

Se sigue de (6.34) que

$$\begin{aligned} & \left(\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t} \right)^{\frac{n}{2}} \int_{\mathbb{R}^{n-1}} e^{\frac{im}{2\hbar \Delta t} \sum_{k=0}^{n-1} ((q_{k+1} - q_k)^2 - \epsilon^2 q_k^2)} \prod_{k=1}^{n-1} dq_k \\ &= e^{-\frac{\pi i v}{2}} \sqrt{\frac{m}{2\pi i \hbar \Delta t |\det A_{n-1}|}} e^{\frac{im}{2\hbar \Delta t} \{q^2 + q'^2 - (A_{n-1}^{-1} \vec{p}, \vec{p})\}}, \end{aligned} \quad (6.36)$$

donde $v = v_{n-1}$ es el número de autovalores negativos de la matriz A_{n-1} . Es decir, se pone $a_n = \det A_n$. Expandiendo $\det A_n$ con respecto a la última columna, se obtiene la relación de términos de recurrencia

$$a_{n+1} = (2 - \epsilon^2)a_n - a_{n-1}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (6.37)$$

con la condiciones iniciales $a_{-1} = 0$ y $a_0 = 1$. La relación de recurrencia (6.37) tiene dos soluciones linealmente independientes z^n y z^{-n} , donde $2 - \epsilon^2 = z + z^{-1}$, y una solución a_n que satisfacen las condiciones iniciales que están dadas por

$$a_n = \frac{z^{n+1} - z^{-n-1}}{z - z^{-1}}.$$

de esto se obtiene los auto valores de la matriz A_n que están dados por

$$\lambda_k = z + z^{-1} - 2 \cos \frac{\pi k}{n+1}, \quad k = 1, \dots, n.$$

asi $\epsilon = \frac{\omega T}{n}$ se tiene $z = e^{i\epsilon}$ y

$$\det A_{n-1} = \frac{\sin n\epsilon}{\sin \epsilon},$$

y para n suficientemente grande A_{n-1} tiene v autovalores negativos cuando $T_v < T < T_{v+1}$. Para evaluar el producto interno $(A_{n-1}\vec{p}, \vec{p})$ solo se necesita conocer los elementos de las esquinas de la matriz inversa $B = A_{n-1}^{-1}$, que están dados por

$$B_{11} = B_{n-1n-1} = \frac{a_{n-2}}{a_{n-1}} = \frac{\sin(n-1)\epsilon}{\sin n\epsilon}, \quad B_{1n-1} = B_{n-11} = \frac{1}{a_n} = \frac{\sin n\epsilon}{\sin \epsilon},$$

así se obtiene

$$q^2 + q'^2 - (A_{n-1}^{-1}\vec{p}, \vec{p}) = \frac{1}{\sin n\epsilon} \left(2 \sin \frac{\epsilon}{2} \cos \frac{(2n-1)\epsilon}{2} (q^2 + q'^2) - 2 \sin \epsilon q q' \right).$$

Usando la aproximación para n muy grandes $\sin \omega \Delta t = \omega \Delta t$ simplificando, finalmente se obtiene la expresión del propagador para el oscilador armónico.

$$K(q', t'; q, t) = \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} e^{\frac{im\omega}{2\hbar \sin \omega T} \{(q^2 + q'^2) \cos \omega T - 2qq'\}}, \quad (6.38)$$

donde para $\frac{\pi v}{\omega} = T_v < T < T_{v+1} = \frac{\pi(v+1)}{\omega}$, $v \in \mathbb{N}$ se tiene

$$\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin \omega T}} = e^{-\frac{\pi i}{4} - \frac{\pi i v}{2}} \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi \hbar |\sin \omega T|}}.$$

Usando estas ecuaciones y pasando al limite cuando $n \rightarrow \infty$ en (6.36), se obtiene la expresión para el propagador para el caso $T \neq T_v$. El limite $T \rightarrow T_v$ es evaluado usando la siguiente ecuación en la teoría de distribuciones:

$$\lim_{t \rightarrow 0} \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{\frac{i(x-y)^2}{2t}} = e^{\frac{\pi i}{4}} \delta(x-y).$$

De la ecuación (6.38), si se hace el limite $\omega \rightarrow 0$ el propagador del oscilador armónico se convierte en el propagador de la partícula libre (6.10).

Para cada v , los valores especiales T_v son enteros múltiplos del periodo $\frac{2\pi}{\omega}$ del oscilador armónico, así cuando $t' - t = T_v$, el extremo q en el tiempo t se conecta en el tiempo t' existe si y solo si $q' = q$. Análogamente, cuando $t' - t = T_v$ para v par, el extremo q y q' existe si y solo si $q' = -q$. Para un caso general $t' - t \neq T_v$, el extremo q en el tiempo t se conecta con q' en el tiempo t' existe

para todo q y q' . El entero v es el índice de Morse de la trayectoria $q(\tau)$, es decir, el número de autovalores negativos del correspondiente operador de Jacobi \mathcal{J} ,

$$\mathcal{J} = -m \frac{d^2}{d\tau^2} - m\omega^2, \quad t \leq \tau \leq t',$$

con las condiciones de frontera de Dirichlet.

7. Mecánica cuántica fraccionaria

En este capítulo se mostrará un enfoque de investigación bastante nuevo, conocido como mecánica cuántica fraccionaria, en el cual, aparece en una serie de artículos publicados por el físico N. Laskin.

La dependencia cuadrática del momento en la ecuación (6.2) es un hecho físico comprobado. Sin embargo, ¿hay otras formas de término cinemático en la ecuación (6.2) que no contradicen los principios fundamentales de la mecánica clásica y la mecánica cuántica? Para responder esta cuestión, es conveniente un enfoque de la integral de trayectoria de Feynman, sobre trayectorias de tipo browniano¹. El movimiento browniano es un caso especial de las llamadas distribuciones de probabilidad estables, desarrolladas por Lévy [34] y Khintchine [29] que, en la década de 1930, plantearon la pregunta: ¿La suma de N cantidades aleatorias independientes distribuidas de manera idéntica $X = X_1 + X_2 + \dots + X_N$ tiene la misma distribución de probabilidad $p_N(X)$ que los pasos individuales $p_i(X_i)$, $i = 1, \dots, N$? La respuesta tradicional, es que una suma de N gaussianos es nuevamente un gaussiano, pero con N veces la varianza del original. Lévy y Khintchine demostraron que existe la posibilidad de generalizar esto, con una clase de distribuciones de probabilidad no gaussianas, donde cada distribución estable tiene un índice de estabilidad, a menudo llamado índice de Lévy $0 < \alpha \leq 2$. Cuando $\alpha = 2$, el movimiento de Lévy se transforma en movimiento browniano.

A principios de la década de 1950, Kac [28] analizó una opción para desarrollar la integral de camino sobre trayectorias de Lévy, quien señaló, que genera una medida funcional en el espacio de funciones continuas o trayectorias, que solo tienen discontinuidades del primer tipo. La integral de camino sobre las trayectorias de Lévy ha sido introducida y elaborada, por primera vez con aplicaciones a la mecánica cuántica fraccional y la mecánica estadística fraccionada, por Laskin [33], que se basó en el marco de la visión del espacio-tiempo de Feynman de la mecánica cuántica, pero en lugar de las trayectorias de la mecánica cuántica de tipo browniano, Laskin utilizó las de tipo Lévy. Si la dimensión fractal del camino browniano es $d_{\text{fractal}}^{\text{Browniano}} = 2$, entonces, el camino Lévy tiene dimensión fractal $d_{\text{fractal}}^{\text{Lévy}} = \alpha$. Donde este índice α se convierte en un nuevo parámetro fundamental en mecánica cuántica fraccional y clásica. La diferencia entre las dimensiones fractales de los caminos Browniano y Lévy, conduce a diferentes físicas. De hecho, la dinámica cuántica fraccional es generada por la función hamiltoniana $H(p, r)$.

Algunas de las aplicaciones más importantes de la mecánica cuántica fraccionaria, están en el campo de la física del estado sólido, donde Stickler [51] desarrolló física de estado sólido, mediante la mecánica cuántica fraccional, con la introducción de una cadena de unión estrecha 1D en rango

¹Es el movimiento aleatorio de partículas suspendidas en un medio [14]

finito, a la que se refirió como el cristal 1D, caracterizado por el parámetro Lévy de orden α .

Otra implementación de la física del estado sólido de la mecánica cuántica fraccional, es el modelo de campo medio para condensados de polaritón [44].

En el campo de la física cuántica de líquidos, Tayurskii y Lysogorskiy [53], desarrollaron una interesante aplicación de la ecuación fraccionaria de Schrödinger y las ecuaciones dinámicas de Heisenberg, para operadores de mecánica cuántica fraccionaria de coordenadas y velocidad. Construyeron un modelo hidrodinámico fraccional de dos fluidos, para estudiar el movimiento del helio superfluido en medios nanoporosos.

Herrmann [24] inició una realización de la física nuclear de la mecánica cuántica fraccional, quien desarrolló el modelo de rotor rígido simétrico fraccional, para estudiar las excitaciones de baja energía de los espectros de banda, del estado fundamental de núcleos pares-pares.

Longhi [38] ideó una configuración de óptica cuántica, para probar las predicciones de la mecánica cuántica fraccional. La idea es utilizar dinámica de luz transversal, en cavidades ópticas esféricas para diseñar un resonador óptico cuántico, en el que, los modos transversales y las frecuencias de resonancia, se correspondan con las funciones propias y los valores propios de la ecuación fraccional de Schrödinger con potencial de oscilador.

Lim [35] inició la aplicación teórica del campo cuántico del cálculo fraccional. Descubrió una generalización fraccionada del enfoque de cuantificación estocástica de Parisi-Wu [43], para cuantizar campos gauge. La idea que se le ocurrió a Lim [36] es utilizar la ecuación diferencial estocástica de Langevin fraccional, para modelar la dinámica del campo de Klein Gordon fraccional euclidiano.

7.1 De la integral de camino de Feynmann a la ecuación fraccionaria de Schrödinger

Recordando que el propagador para un sistema cuántico esta dado por la siguiente expresión

$$K(q', q; \Delta t) = \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p(q'-q) - \mathcal{H}_c \Delta t)} dp. \quad (7.1)$$

Donde, el hamiltoniano tiene la forma $\mathcal{H}_c = \frac{p^2}{2m} + \mathcal{V}$, y además q, t y q', t' son la coordenada inicial con un tiempo inicial y la coordenada final con el tiempo, respectivamente. Al introducir el Hamiltoniano fraccionario

$$\mathcal{H}_\alpha(p, q) = D_\alpha |p|^\alpha + \mathcal{V}, \quad 1 < \alpha \leq 2, \quad (7.2)$$

la expresión (7.1) toma la forma

$$K(q', q; \Delta t) = \frac{1}{2\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar}(p(q'-q) - \mathcal{H}_\alpha \Delta t)} dp, \quad (7.3)$$

asimismo, la acción se escribirá como

$$S(\sigma) = \int_t^{t'} (p\dot{q} - \mathcal{H}_\alpha(p, q)) d\tau. \quad (7.4)$$

Del capítulo anterior, se llegó a la siguiente expresión

$$\psi(q', t') = \int_{\mathbb{R}} K(q', t'; q, t) \psi(q, t) dq, \quad (7.5)$$

donde $\psi(q, t)$ es la función de onda del estado inicial, $\psi(q', t')$ es la función de onda del estado final. Para obtener la ecuación diferencial, para la función de onda $\psi(q, t)$ se le aplica a la ecuación (7.5) en el caso especial de que el tiempo difiera sólo en un intervalo infinitesimal ϵ de t'

$$\psi(q', t' + \epsilon) = \int_{\mathbb{R}} K(q', t' + \epsilon; q, t) \psi(q, t) dq.$$

Y reemplazando la expresión del propagador (7.3), junto con el Hamiltoniano fraccional

$$\begin{aligned} \psi(q', t' + \epsilon) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i}{\hbar} (p(q' - q) - \mathcal{H}_\alpha \Delta t) dp \psi(q, t) dq, \\ \psi(q', t' + \epsilon) &= \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i}{\hbar} (p(q' - q) - D_\alpha |p|^\alpha + \mathcal{V} \Delta t) dp \psi(q, t) dq. \end{aligned}$$

Usando la aproximación de Feynman

$$\int_{t'}^{t'+\epsilon} V(q'(t'), t') dt' \approx \epsilon V \left(\frac{q' + q}{2}, t' \right),$$

se obtiene qué

$$\psi(q', t' + \epsilon) = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i}{\hbar} \left(p(q' - q) - D_\alpha |p|^\alpha + \epsilon V \left(\frac{q' + q}{2}, t' \right) \Delta t \right) dp \psi(q, t) dq, \quad (7.6)$$

expandiendo en serie de potencias a ambos lados de la ecuación

$$\psi(q', t') + \epsilon \frac{\partial \psi(q', t')}{\partial t'} = \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \frac{i}{\hbar} p(q' - q) \left(1 - \frac{i}{\hbar} D_\alpha |p|^\alpha \right) \left(1 - \frac{i}{\hbar} V \epsilon \frac{q' + q}{2}, t' \right) dp \psi(q, t) dq. \quad (7.7)$$

Luego, tomando la transformada de Fourier

$$\psi(q, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{\frac{ip \cdot q}{\hbar}} \hat{\psi}(p, t) dp, \quad \hat{\psi}(p, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{-\frac{ip \cdot q}{\hbar}} \psi(q, t) dq,$$

introduciendo la derivada cuántica fraccional de Riesz

$$(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \psi(q, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int e^{i\frac{p \cdot q}{\hbar}} |p|^\alpha \hat{\psi}(p, t) dp. \quad (7.8)$$

Se obtiene de la ecuación (7.7)

$$\psi(q', t') + \epsilon \frac{\partial \psi(q', t')}{\partial t'} = \psi(q', t') - i \frac{D_\alpha \epsilon}{\hbar} (-\hbar \Delta)^{\alpha/2} \psi(q', t') - \frac{i}{\hbar} \epsilon V(q', t') \psi(q', t'),$$

por lo que, esto solo es cierto sí, $\psi(q', t')$ satisface la siguiente ecuación diferencial para el orden ϵ

$$i\hbar \frac{\partial \psi(q', t')}{\partial t'} = D_\alpha (-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \psi(q', t') + V(q', t') \psi(q', t'). \quad (7.9)$$

La ecuación (7.9), es la ecuación de Schrödinger fraccionaria espacialmente.

7.2 Hermiticidad del operador Hamiltoniano fraccional

Para probar la Hermiticidad del operador Hamiltoniano fraccional \mathcal{H}_α es necesario notar que, la integración por partes existe respecto a la derivada fraccional de Riesz

$$(\phi, (-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \chi) = ((-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \phi, \chi). \quad (7.10)$$

La energía promedio del sistema cuántico fraccional con Hamiltoniano \mathcal{H}_α es

$$E_\alpha = \int \psi^*(q, t) \mathcal{H}_\alpha \psi(q, t) dq, \quad (7.11)$$

por lo que, gracias a la expresión (7.10), se tiene que

$$E_\alpha = \int \psi^*(q, t) \mathcal{H}_\alpha \psi(q, t) dq = \int (\mathcal{H}_\alpha^+ \psi(q, t))^* \psi(q, t) dq = E_\alpha^*,$$

y como consecuencia física, la energía de un sistema es real. Por lo tanto, el hamiltoniano fraccional \mathcal{H}_α definido por la ecuación (7.2), es un operador autoadjunto en el espacio con el producto escalar de L^2 , por lo que se concluye que

$$(\mathcal{H}_\alpha^+ \phi, \chi) = (\phi, \mathcal{H}_\alpha \chi). \quad (7.12)$$

7.3 Ley de conservación de la paridad para la mecánica cuántica fraccionaria

De la definición (7.8), de la derivada fraccional cuántica de Riesz se deduce que

$$(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2} \exp \left\{ i \frac{p \cdot q}{\hbar} \right\} = |p|^\alpha \exp \left\{ i \frac{p \cdot q}{\hbar} \right\}, \quad (7.13)$$

donde la función $\exp \left\{ i \frac{p \cdot q}{\hbar} \right\}$ es la auto función del operador cuántico fraccional de Riesz $(-\hbar^2 \Delta)^{\alpha/2}$ cuyo autovalor correspondiente es $|p|^\alpha$, además, este operador es una derivada simétrica

$$(-\hbar^2 \Delta_q)^{\alpha/2} \dots = (-\hbar^2 \Delta_{-q})^{\alpha/2} \dots \quad (7.14)$$

Debido a la propiedad (7.14), el hamiltoniano fraccional \mathcal{H}_α dado por la ecuación (7.2) permanece invariante bajo la transformación de inversión espacial, que consiste en el cambio de signo de la coordenada espacial o de las diferentes coordenadas espaciales simultáneamente, es decir

$$\vec{q} \rightarrow -\vec{q}, \quad q_1 \rightarrow -q_1, \quad q_2 \rightarrow -q_2, \quad q_3 \rightarrow -q_3, \dots,$$

denotando al operador de inversión por \hat{P} , además, el operador Hamiltoniano \mathcal{H}_α y el operador de inversión conmutan

$$\hat{P} \mathcal{H}_\alpha = \mathcal{H}_\alpha \hat{P}, \quad (7.15)$$

De esta manera, es posible clasificar las funciones de onda, en las que no son modificadas cuando el operador de inversión actúa sobre esta

$$\hat{P} \psi_+(q) = \psi_+(q),$$

estos estados, son llamados estados pares. Las funciones a las cuales se les cambia el signo al operar la inversión

$$\hat{P} \psi_-(q) = -\psi_-(q),$$

por lo que, a estos estados se le conoce como estados impares. La ecuación (7.15) expresa, la ley de conservación de la paridad para la mecánica cuántica fraccional. Si el estado de un sistema cuántico fraccional cerrado tiene una paridad dada, entonces esta paridad se conserva.

8. Conclusiones

Las matemáticas están en todos lados, son fundamentales en el estudio de la naturaleza, por este motivo, la física al ser la ciencia que estudia la naturaleza a su nivel más fundamental, necesita de un lenguaje que le permita hacer diversas predicciones, así mismo, poder validar estos resultados de manera experimental. La mecánica cuántica, al ser la rama de la física que se encarga del estudio a nivel microscópico, no evade la necesidad de usar el lenguaje de las matemáticas, destacándose el análisis funcional. En este trabajo, se pudo mostrar la importancia de los espacios normados, especialmente el espacio L^2 , ya que, en este espacio es donde se encuentran las funciones de onda, teniendo en cuenta, que con estas es posible hacer predicciones probabilísticas sobre, cuál será la posición o el momento de una partícula, en un tiempo dado.

Otro aspecto importante tratado en el trabajo son los operadores que generalmente están definidos sobre un espacio de Hilbert, estos son un objeto fundamental dentro de la física cuántica, estos representan los observables, en otras palabras, son la cantidad física que podemos medir experimentalmente como puede ser el operador hamiltoniano, que representa la energía del sistema.

Por otra parte, una propiedad importante que se evidenció dentro del trabajo, es la manera en cómo es imposible medir dos cantidades físicas que no conmutan, un ejemplo común de esto, es la imposibilidad de medir la posición y el momento de una partícula, estas, en física, son variables conjugadas.

Así mismo, un tema de suma importancia en física, es el conocer los límites de una teoría física. Cuando se habla de mecánica clásica, se habla de objetos a escala macroscópica y que es posible encontrarlos en nuestro día a día, sin embargo, quedarse con esta interpretación de la naturaleza es quedarse corto, debido a que existen fenómenos que no pueden ser explicados mediante la mecánica clásica.

Cuando el fenómeno ocurre a una escala microscópica y a velocidades no relativistas, es necesario usar la mecánica cuántica, como se mostró en el trabajo, esta rama de la física, a diferencia de la mecánica clásica, no es determinista, esto implica, que sus predicciones no se basan en encontrar un valor exacto de un observable físico, sino, que como se pudo evidenciar con la ecuación de Schrödinger, se encarga de la probabilidad de que un evento determinado suceda.

Otra diferencia fundamental de la mecánica cuántica y la clásica, es que, es imposible aislar al observador del experimento, pues el observador forma parte del propio experimento, ya que, es la conexión entre el mundo microscópico y el macroscópico. Dadas idénticas condiciones iniciales,

el observador puede, por ejemplo, como se muestra en el experimento de la doble rendija, decidir si quiere que el resultado sea un experimento de interferencia o un experimento de detección de partículas.

Lo anterior, en primera instancia, haría pensar que ambas teorías son incompatibles y no existe conexión entre ellas, sin embargo, esto no es así, ya que, en el trabajo se evidenció que existe una relación de contención entre ellas, siendo la mecánica cuántica una teoría más general que la mecánica clásica, esto se probó cuando la constante de Planck tiende a cero, lo que hace que los resultados de la mecánica clásica sean reproducidos en la teoría cuántica.

Un aspecto fundamental del trabajo, es la axiomatización de la mecánica cuántica, estos axiomas a pesar que no se pueden verificar directamente, forman la base para nuevas formulaciones, es decir, que cualquier tipo de formulación nueva de la mecánica cuántica debe cumplir estas reglas básicas. Con esto, se consigue una herramienta fundamental para el descarte o inclusión de nuevas teorías, lo que significa que, si una teoría pretende abarcar fronteras más allá de la cuántica, debe de cumplir estos axiomas.

Así mismo, en el trabajo también se aborda la integral de Feynman, que generaliza el principio de acción tratado en la mecánica clásica; esta formulación tiene una interpretación física, que conlleva que la partícula viaja por infinitos caminos al mismo tiempo, ya que cada camino tiene una probabilidad diferente. Ambas formulaciones han mostrado ser complementarias, en el sentido que algunos problemas son más sencillos de resolver mediante la integral de camino, o también, el problema se resuelve más fácilmente por medio de la ecuación de Schrödinger. En otras palabras, el formalismo desarrollado por Feynman es completamente equivalente, es decir, que en el presente trabajo se usaron 3 formulaciones diferentes, ya que se introdujo también, que la Matricial de Heisenberg es análoga también a la ecuación de onda de Schrödinger.

Para finalizar, se trabajó también la ecuación fraccionaria de Schrödinger, una generalización del trabajo de los padres de la teoría cuántica, esta proporciona un punto de vista general sobre la relación entre las propiedades estadísticas, de la trayectoria de la mecánica cuántica y la estructura de las ecuaciones fundamentales de la mecánica cuántica. Al ser una teoría construida hace relativamente poco (2000), es posible que aún no se haya podido explorar todo su potencial y de esta manera generar nuevas teorías y nuevas aplicaciones para el desarrollo de la humanidad.

Bibliografia

- [1] AHARONOV, Y., AND BOHM, D. Significance of electromagnetic potentials in the quantum theory. *Physical Review* 115, 3 (1959), 485.
- [2] ARVESON, W. *An invitation to C^* -algebras*, vol. 39. Springer Science & Business Media, 2012.
- [3] ASHTEKAR, A. New variables for classical and quantum gravity. *Physical review letters* 57, 18 (1986), 2244.
- [4] BINNIG, G., AND ROHRER, H. Scanning tunneling microscopy. *Surface science* 126, 1-3 (1983).
- [5] BROGLIE, L. D. XXXV. a tentative theory of light quanta. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 47, 278 (1924), 446–458.
- [6] CARMO, M. P. D. Geometria riemanniana. Tech. rep., 1988.
- [7] CASIMIR, H. B., AND POLDER, D. The influence of retardation on the london-van der waals forces. *Physical Review* 73, 4 (1948), 360.
- [8] DAVISSON, C., AND GERMER, L. H. The scattering of electrons by a single crystal of nickel. *Nature* 119, 2998 (1927), 558–560.
- [9] DIRAC, P. A. M. The fundamental equations of quantum mechanics. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character* 109, 752 (1925), 642–653.
- [10] DIRAC, P. A. M. *The principles of quantum mechanics*. No. 27. Oxford university press, 1981.
- [11] ESAKI, L. New phenomenon in narrow germanium p- n junctions. *Physical review* 109, 2 (1958), 603.
- [12] EVANS, L. C. *Partial differential equations*. American Mathematical Society, 2010.
- [13] FEYNMAN, R. P., AND BROWN, L. M. *Feynman's thesis: a new approach to quantum theory*. World Scientific, 2005.
- [14] FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B., AND SANDS, M. The feynman lectures on physics; vol. i. *American Journal of Physics* 33, 9 (1965).
- [15] FEYNMAN, R. P., LEIGHTON, R. B., AND SANDS, M. *The Feynman lectures on physics: volume III: quantum mechanics*. 1965.

- [16] FONSECA, K. M., AND TORRES-ARDILA, F. De la diferencia entre operadores hermíticos y autoadjuntos on the difference between hermitian operators and self-adjoint operators.
- [17] GERLACH, W., AND STERN, O. Das magnetische moment des silberatoms. *Zeitschrift für Physik* 9, 1 (1922), 353–355.
- [18] GERLACH, W., AND STERN, O. Der experimentelle nachweis der richtungsquantelung im magnetfeld. *Zeitschrift für Physik* 9, 1 (1922), 349–352.
- [19] HALL, B. C. *Quantum theory for mathematicians*, vol. 267. Springer, 2013.
- [20] HAMILTON, S. W. R. *On a general method in dynamics*. Richard Taylor, 1834.
- [21] HAND, L. N., AND FINCH, J. D. *Analytical mechanics*. Cambridge University Press, 1998.
- [22] HAWKING, S. W., AND MLODINOW, L. *A briefer history of time*. Bantam Press, 2020.
- [23] HEISENBERG, W. Über den anschaulichen inhalt der quantentheoretischen kinematik und mechanik, zs. für phys.
- [24] HERRMANN, R. The fractional symmetric rigid rotor. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* 34, 4 (2007), 607.
- [25] HIBBS, A., AND FEYNMAN, R. P. *Quantum mechanics and path integrals*. McGraw-Hill Interamericana, 1965.
- [26] HILBERT, D., NEUMANN, J. V., AND NORDHEIM, L. Über die grundlagen der quantenmechanik. *Mathematische Annalen* 98, 1 (1928).
- [27] JACKSON, J. D. Classical electrodynamics. *American Institute of Physics* 15, 11 (2009).
- [28] KAC, M. On some connections between probability theory and differential and integral equations. In *Proceedings of the second Berkeley symposium on mathematical statistics and probability* (1951), University of California Press, pp. 189–215.
- [29] KHINTCHINE, A. Y., AND LÉVY, P. Sur les lois stables. *CR Acad. Sci. Paris* 202 (1936), 374–376.
- [30] KREYSZIG, E. *Introductory functional analysis with applications*, vol. 1. wiley New York, 1978.
- [31] LAGRANGE, J. L. *Méchanique analytique*. Vve Desaint, 1788.
- [32] LANDAU, L. D., AND LIFSHITZ, E. M. Classical field theory. *Course of Theoretical Physics 2* (1975).

- [33] LASKIN, N. Fractional quantum mechanics and lévy path integrals. *Physics Letters A* 268, 4-6 (2000).
- [34] LÉVY, P., AND LÉVY, P. *Théorie de l'addition des variables aléatoires*. Gauthier-Villars, 1954.
- [35] LIM, S. Fractional derivative quantum fields at positive temperature. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications* 363, 2 (2006), 269–281.
- [36] LIM, S., AND MUNIANDY, S. Stochastic quantization of nonlocal fields. *Physics Letters A* 324, 5-6 (2004), 396–405.
- [37] LOEVE, M. Elementary probability theory. In *Probability theory i*. Springer, 1977.
- [38] LONGHI, S. Fractional schrödinger equation in optics. *Optics letters* 40, 6 (2015), 1117–1120.
- [39] MANDELSTAM, L., AND LEONTOWITSCH, M. Zur theorie der schrödingerschen gleichung. *Zeitschrift für Physik* 47, 1-2 (1928), 131–136.
- [40] MASTROENI, M. An axiomatic formulation of quantum mechanics.
- [41] MCDUFF, D., AND SALAMON, D. *Introduction to symplectic topology*, vol. 27. Oxford University Press, 2017.
- [42] MILLIKAN, R. A. A direct photoelectric determination of planck's "h". *Phys. Rev.* 7 (Mar 1916), 355–388.
- [43] PARISI, G., WU, Y. S., ET AL. Perturbation theory without gauge fixing. *Sci. Sin* 24, 4 (1981), 483–496.
- [44] PINSKER, F., BAO, W., ZHANG, Y., OHADI, H., DREISMANN, A., AND BAUMBERG, J. J. Fractional quantum mechanics in polariton condensates with velocity-dependent mass. *Phys. Rev. B* 92 (Nov 2015), 195310.
- [45] PLANCK, M. On the law of distribution of energy in the normal spectrum. *Annalen der physik* 4, 553 (1901), 1.
- [46] PRESTON, T. Xxxvi. radiation phenomena in the magnetic field. *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science* 45, 275 (1898), 325–339.
- [47] RUDIN, W. *Análisis funcional*. Reverté, 2012.
- [48] SAKURAI, J., AND NAPOLITANO, J. Modern quantum mechanics 2nd edition. *Person New International edition* (2014).

- [49] SCHRÖDINGER, E. Mémoires sur la mécanique ondulatoire. *Bull. Amer. Math. Soc* 39 (1933), 854.
- [50] SIMON, D. Albert einstein: Akademie-vorträge. sitzungsberichte der preußischen akademie der wissenschaften 1914-1932.
- [51] STICKLER, B. Potential condensed-matter realization of space-fractional quantum mechanics: The one-dimensional lévy crystal. *Physical Review E* 88, 1 (2013), 012120.
- [52] TAKHTADZHIAN, L. A., AND TAKHTADZHIAN, L. A. T. *Quantum mechanics for mathematicians*, vol. 95. American Mathematical Soc., 2008.
- [53] TAYURSKII, D., AND LYSOGORSKIY, Y. Quantum fluids in nanoporous media—effects of the confinement and fractal geometry. *Chinese Science Bulletin* 56, 34 (2011), 3617–3622.
- [54] TESCHL, G. Mathematical methods in quantum mechanics. *Graduate Studies in Mathematics* 99 (2009), 106.
- [55] VON NEUMANN, J. *Mathematical foundations of quantum mechanics*. Princeton university press, 2018.
- [56] WALTER, R. Real and complex analysis.
- [57] WEINBERG, S. *The quantum theory of fields*, vol. 1. Cambridge university press, 1995.
- [58] WEYL, H. Quantenmechanik und gruppentheorie. *Zeitschrift für Physik* 46, 1-2 (1927), 1–46.
- [59] YOUNG, T. The bakerian lecture. experiments and calculations relative to physical optics. In *Abstracts of the Papers Printed in the Philosophical Transactions of the Royal Society of London* (1832), no. 1, The Royal Society London.
- [60] ZORN, M. A remark on method in transfinite algebra. *Bulletin of the American Mathematical Society* 41, 10 (1935), 667–670.

A. Mas matemática

A forma de apéndice se han querido incluir algunos conceptos matemáticos que se estudiaron en la parte de mecánica clásica.

Se sabe que en los espacios euclidianos \mathbb{R}^n se puede definir la noción de cercanía, utilizando para ello la función distancia:

$$\begin{aligned} d : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n &\rightarrow [0, \infty) \\ (\mathbf{x}, \mathbf{y}) &\rightarrow \sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - y_i)^2}, \end{aligned} \tag{A.1}$$

siendo $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \dots, x_n)$, $\mathbf{y} = (y_1, y_2, \dots, y_n)$. Es de notar que tres propiedades que satisface la función d definida, en (A.1), las cuales son propias de la distancia de puntos y no del hecho de que estos puntos estén en \mathbb{R}^n . En base a estas propiedades se puede extender la noción de distancia a un conjunto arbitrario X no vacío (en física son de especial importancia los conjuntos de funciones). La siguiente definición se debe a Fréchet.

Definición A.0.1 (Espacio métrico). Dado un conjunto $X \neq \emptyset$ la función $d : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ es una distancia de X si satisface:

1. **Positividad:** $d(x, y) \geq 0$ para todo $x, y \in X$ además $d(x, y) = 0$ si y solo si $x = y$.
2. **Simetría:** $d(x, y) = d(y, x)$ para todo $x, y \in X$.
3. **Desigualdad triangular** $d(x, z) \leq d(x, y) + d(y, z)$ para todo $x, y, z \in X$

El par (X, d) se denomina espacio métrico. En un espacio métrico (X, d) , se define la bola abierta con centro en $x \in X$ y radio $r > 0$ al conjunto de todos los puntos $y \in X$ cuya distancia a x es menor que r ; esto es:

$$B_d(x, r) = \{y \in X : d(x, y) < r\}. \tag{A.2}$$

Cuando no exista confusión con la distancia, se escribe simplemente $B(x, r)$.

Ejemplo A.0.22.1.2.1 Métrica discreta: En un conjunto X no vacío se define $\rho : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$

$$\rho(x, y) = \begin{cases} 0 & x = y \\ 1 & x \neq y \end{cases} .$$

2.1.2.2 **Métrica euclídea.** Cuando $X = \mathbb{R}^n$, la función d definida por (A.1) se conoce como métrica euclídea.

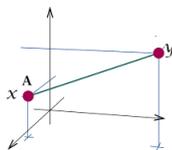


Figura A.1: Métrica Euclídea

2.1.2.3 En la distancia usual sobre los números reales \mathbb{R} es sencillo comprobar que $B(x, \epsilon) = (x - \epsilon, x + \epsilon)$.

2.1.2.4 **Otros tipos de métricas** La métrica euclídea puede ser generalizada, dado $p \geq 1$, se define la distancia d_p en \mathbb{R}^n mediante:

$$d_p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \left(\sum_{i=1}^n |x_i - y_i|^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad (\text{A.3})$$

en el caso $p = \infty$

$$d_\infty(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \max_{1 \leq i \leq n} |x_i - y_i|. \quad (\text{A.4})$$

2.1.2.5 Para $p = 1, 2, 3, 10, \infty$, en la figura A.2 se representan $B_{d_p}(0, 1) \subseteq \mathbb{R}^2$, donde d_p está definido como en el A.0.2.

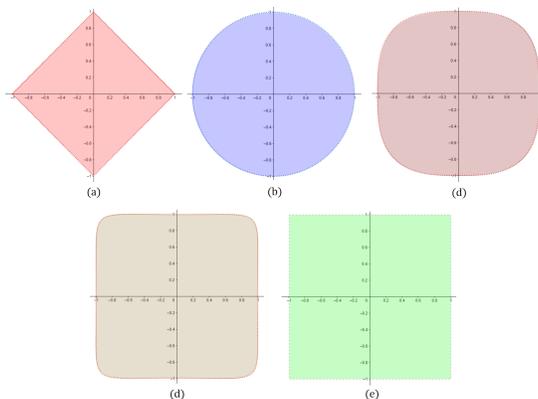


Figura A.2: Ejemplos de bola abierta en \mathbb{R}^2

2.1.2.6 **Métrica esférica.** En el caso que M sea la superficie esférica en \mathbb{R}^3 :

$$M := \mathbb{S}^2 = \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 = 1\}.$$

Se define la distancia $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ como la longitud del menor arco que une estos puntos, como se representa en la figura A.3 las curvas azules muestran la distancia esférica entre A , B , X como puntos de \mathbb{S}^2 , mientras que las líneas verdes muestran la distancia entre estos mismos puntos como vectores de \mathbb{R}^3 .

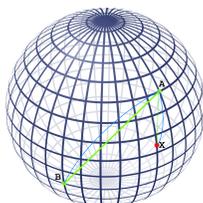


Figura A.3: Métrica esférica

2.1.2.7 **Métrica cilíndrica.** Considere

$$M := \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : x_1^2 + x_2^2 = r^2\},$$

la superficie cilíndrica de radio r , la distancia $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ se define como la hélice con menor distancia que una los puntos, en la figura A.4 la línea negra representa la distancia que une los puntos A y B como puntos de M , mientras que la línea roja representa la distancia en \mathbb{R}^3

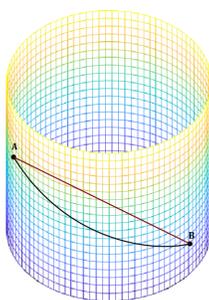


Figura A.4: Métrica cilíndrica

2.1.2.8 **Métrica toroidal** Considere

$$\mathbb{T}^2 := \{\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbb{R}^3 : (R - \sqrt{x_1^2 + x_2^2})^2 + x_3^2 = r^2\}$$

La superficie toroidal de radios R y r , la distancia $d(\mathbf{x}, \mathbf{y})$. Se sabe que el toro tiene dos métricas una que se relaciona con las hélices de un cilindro, y la otra con el arco mínimo en la esfera:

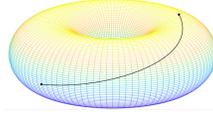


Figura A.5: Métrica toroidal

Los últimos tres ejemplos hacen parte de lo que se conoce como variedades de tipo Riemanniana, es decir, son variedades que localmente tienen las mismas propiedades del espacio Euclideo, pero globalmente podrían tener algún tipo de curvatura, se referencia al lector interesado [6].

Debido a la importancia de los espacios funcionales para la física matemática en el siguiente ejemplo se presentan algunas métricas sobre conjuntos de funciones.

Ejemplo A.0.3. Para $a, b \in \mathbb{R}$, se denota

$$\mathbf{C}([a, b] : \mathbb{R}) = \{f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R} : f^1[a, b]\},$$

las siguientes distancias se definen por analogía con el ejemplo A.0.2.

2.1.3.1 Métrica del infinito

$$d_\infty(f, g) = \max_{t \in [a, b]} |f(t) - g(t)|. \quad (\text{A.5})$$

Geoméricamente esta métrica puede ser entendida como la mayor distancia entre las gráficas de f y g , ver gráfica A.6

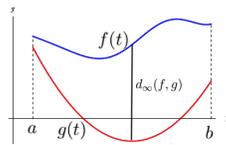


Figura A.6: Distancia del infinito

2.1.3.2 En $\mathbf{C}([a, b] : \mathbb{R})$ la bola abierta $B(f, r)$ con la norma d_∞ es el conjunto de funciones $\{g \in \mathbf{C}([a, b] : \mathbb{R}) : \text{tales que } \sup_{t \in [a, b]} |f(x) - g(x)| < r\}$. (Ver figura A.7)

¹Una función f es continua en un punto $x = a$ si el límite de la función por ambos lados de a coincide con su imagen, $f(a)$.

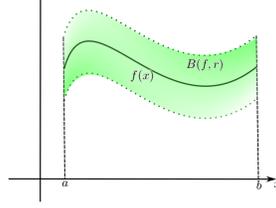


Figura A.7: Bola abierta de una función sobre \mathbb{R}^2

2.1.3.3 Para $p \geq 1$ se define $d_p : \mathbb{C}([a, b] : \mathbb{R}) \times \mathbb{C}([a, b] : \mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{R}$ mediante la integral

$$d_p(f, g) \rightarrow \left(\int_a^b |f(t) - g(t)|^p dt \right)^{\frac{1}{p}}. \quad (\text{A.6})$$

En el caso $p = 1$ la distancia entre estas funciones puede ser entendida como el área entre sus gráficas A.8.

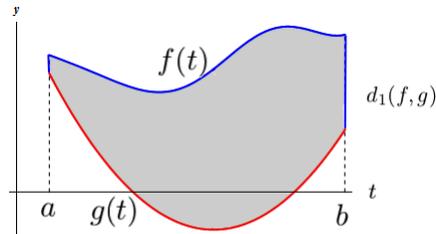


Figura A.8: Distancia como área entre curvas

Para $p > 1$ no se tiene tal interpretación geométrica directa como en los casos anteriores pero el caso $p = 2$ resulta ser el más importante en la práctica y corresponde a quién hace una “aproximación de mínimos cuadrados”.

Mas adelante se entenderá dichas métricas a funciones llamadas medibles. Cuando $p = 2$, se tiene el espacio L^2 , que es el espacio de funciones cuadrado integrables, el cual es un espacio de Hilbert, fundamental tanto en la mecánica cuántica como en los procesos estocásticos.

Un subconjunto \mathcal{A} de un espacio métrico (X, d) se denomina un **conjunto abierto** si para cada $x \in \mathcal{A}$ existe un $r > 0$ talque $B(x, r) \subseteq \mathcal{A}$.

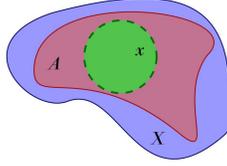


Figura A.9: x contenido en A que a su vez esta contenido en X .

Es importante observar que la colección de conjuntos abiertos en un espacio métrico (X, d) cumple tres propiedades interesantes, las cuales permiten introducir el concepto de espacio topológico. Los espacios topológicos aparecen por primera vez en el trabajo de F.Hausdorff en 1914 titulado “Principles of set theory”. A continuación se presenta la definición de espacio topológico.

Definición A.0.4 (Espacio topológico). Un espacio topológico es un par (X, \mathcal{F}) donde \mathcal{F} es una familia de subconjuntos de X y satisface:

1. \emptyset, X estan en \mathcal{F} (\emptyset es el conjunto vacío).
2. Si $\{\mathcal{A}_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subseteq \mathcal{F}$ entonces $\bigcup_n \mathcal{A}_n \in \mathcal{F}$.
3. Si $\mathcal{A}, \mathcal{B} \in \mathcal{F}$ entonces $\mathcal{A} \cap \mathcal{B} \in \mathcal{F}$.

Los elementos de \mathcal{F} se denominan conjuntos abiertos.

Ejemplo A.0.52.1.8.1 Dado $X = \{a, b, c\}$, existen muchas topologías posibles sobre X , algunas de las cuales se indican en la figura A.10 . El diagrama de la esquina superior derecha indica la topología en la que los conjuntos abiertos son $X, \emptyset, \{a, b\}, \{b\}$, y $\{b, c\}$. La topología en la esquina superior izquierda contiene solo X y \emptyset .

En este ejemplo, puede ver que incluso un conjunto de tres elementos tiene muchas topologías diferentes. Pero ahora ¿cada colección de subconjuntos de X es una topología en X ? La respuesta es no, se observa que ninguna de las colecciones indicadas en la figura A.11 es una topología.

2.1.8.2 Si X es cualquier conjunto no vacío, la colección de todos los subconjuntos de X es una topología en X ; llamada topología discreta. La colección que consta solo de X y \emptyset también es una topología en X ; se denominará topología indiscreta o topología trivial.

Definición A.0.6 (Convergencia). Sea x_n una sucesión de puntos de un espacio topológico X . Se dice que x_n es convergente si existe un punto $p \in X$ tal que, para cualquier entorno abierto $A \ni p$, todos los puntos x_n a partir de un cierto lugar están en A ; es decir, existe un entero k tal que, para todo $n \geq k$, $x_n \in A$. En este caso, p se llama límite de sucesión.

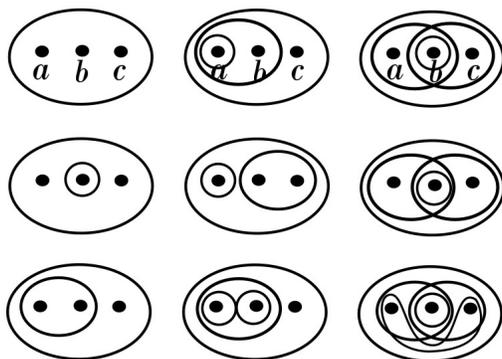


Figura A.10: Bosquejo de diferentes topologías.

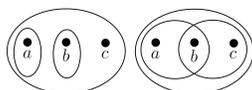


Figura A.11: No son Topologías.

Ejemplo A.0.7. Algunos ejemplos de sucesiones de funciones convergentes son:

2.1.10.1 Considere la sucesión de funciones $f_n(x) = \frac{x^2}{(1+x^2)^n}$ para $x \in \mathbb{R}$ y $n \in \mathbb{N}$. En la figura A.12 aparece la gráfica de $f_n(x)$ para $n = 1, 3, 20, 50, 10000$. Se observa que la sucesión $\{f_n\}$ converge a cero:

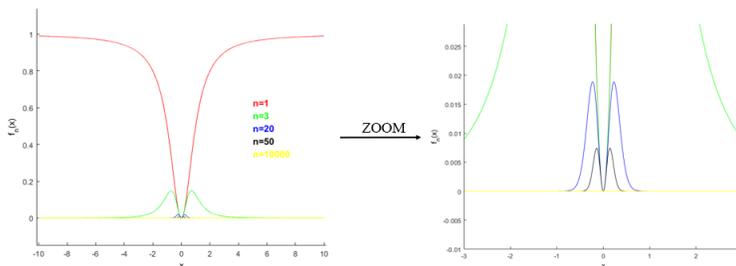


Figura A.12: Gráfica para diferentes valores de n en $f_n(x)$.

2.1.10.2 Para $n \in \mathbb{N}$ defínase $g_n(x) = \frac{\sin(nx)}{\sqrt{n}}$ para $x \in \mathbb{R}$. En la figura A.13 se grafican algunas g_n para diferentes valores de n . Se observa además que la sucesión $\{g_n\}$ converge a cero.

2.1.10.3 Considere la sucesión de funciones $f_m(x) = \sum_{n=1}^m \frac{x^n}{n!}$. Es bien conocido que para $x \in \mathbb{R}$, $f_m(x)$ se aproxima a e^x , esto es $\lim_{m \rightarrow \infty} f_m(x) = e^x$.

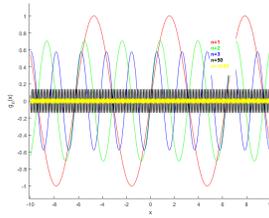


Figura A.13: Gráfica para diferentes valores de n en $g_n(x)$.

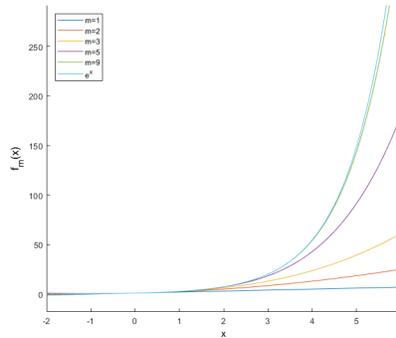


Figura A.14: grafica para diferentes valores de n en $g_n(x)$.

Como se ha extendido la definición de cercanía y de convergencia de sucesiones a espacios topológicos (X, \mathcal{F}) en el caso que la topología \mathcal{F} no necesariamente esté relacionada con una distancia, es natural definir el concepto de función continua entre espacios topológicos, el cual viene motivado de la definición de continuidad en espacios métricos, para esto recuerde que $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ es continua en un punto $x \in \mathbb{R}$ si dado $\epsilon > 0$ existe $\delta > 0$ tal que si $|x - y| < \delta$ entonces $|f(x) - f(y)| < \epsilon$.

Definición A.0.8 (Función continua). Considere (X, \mathcal{F}_x) y (Y, \mathcal{F}_y) espacios topológicos, una función $f : (X, \mathcal{F}_x) \rightarrow (Y, \mathcal{F}_y)$ es continua si para cada $\mathcal{U} \subseteq Y$, $f^{-1}(\mathcal{U}) \in \mathcal{F}_x$. Siendo $f^{-1}(\mathcal{U})$ la imagen inversa

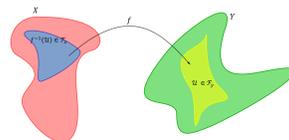


Figura A.15: Función continua en espacios topológicos

Un mapa $f : (X, \mathcal{F}_x) \rightarrow (Y, \mathcal{F}_y)$ es un homeomorfismo si:

1. f es una biyección.
2. f y f^{-1} son continuas.

Se denota como $(X, \mathcal{F}_x) \simeq (Y, \mathcal{F}_y)$, es importante aclarar que en este caso f^{-1} representa al mapeo $f^{-1} : Y \rightarrow X$. $f^{-1} : y \rightarrow x$, donde $f^{-1}(y) = x$ siempre que $f(x) = y$, el cual está bien definido ya que f es una biyección.

Ejemplo A.0.9.1.14.1 La función $\mathcal{F} : (-1, 1) \rightarrow \mathbb{R}$ definida por $f(x) = \frac{x}{1-x^2}$ es un homeomorfismo

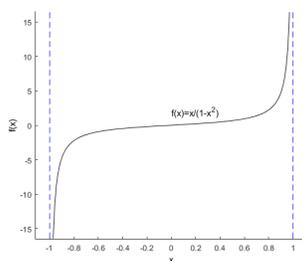


Figura A.16: Homeomorfismo entre $(-1, 1)$ y la recta \mathbb{R}

2.1.14.2 Los intervalos abiertos son homeomorfos a \mathbb{R} : podemos dar un homeomorfismo doblando el intervalo abierto a un semicírculo y luego proyectando el semicírculo desde el centro hacia todo \mathbb{R} . Es importante notar que la función que permite pasar de un espacio topológico a otro es una modificación de la función tangente.

2.1.14.3 Una esfera n -dimensional A.18 a la que se le ha quitado un punto, $\mathbb{S}^n \setminus \{x\}$, es homeomorfa al espacio euclídeo \mathbb{R}^n .

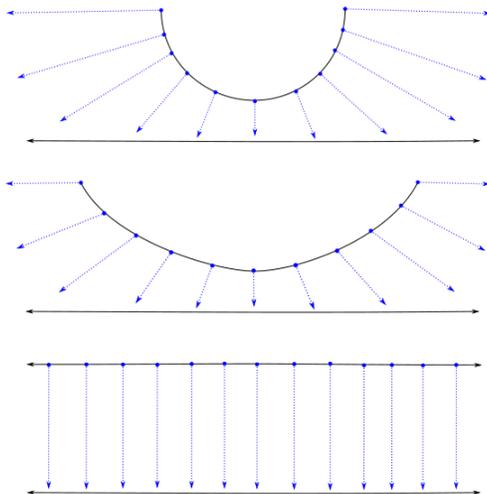


Figura A.17: Homeomorfismo entre un semicirculo y la recta \mathbb{R}

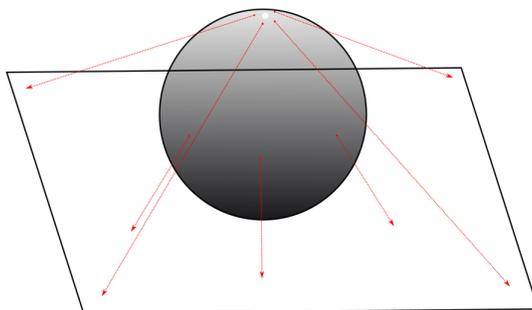


Figura A.18: Homeomorfismo entre la esfera y un plano.