



UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Trabajo de Fin de Grado

Doble Grado en Física y Matemáticas

Una introducción al formalismo matemático de la Mecánica Cuántica

Presentado por:

Alexander Bernal González

Dirigido por:

Juan Casado Díaz

DEPARTAMENTO DE ECUACIONES DIFERENCIALES Y ANÁLISIS

NUMÉRICO

JUNIO DE 2020

Abstract

The aim of this work is to introduce the mathematical tools needed in order to explain, in a more rigorous way, the basic concepts that appear in Quantum Mechanics. In this context, in the first chapter we recall the main conservation laws in Classical Mechanics, the Principle of Least Action and the Hamilton-Jacobi equation. Furthermore, we make a historical introduction to Quantum Mechanics and focused on a semiclassical deduction of Schrödinger equation.

In the following chapter we define and show the basic properties of Banach and Hilbert spaces. We also study the distribution theory, the Sobolev spaces and the Fourier transform. At the end of the chapter we recall some definitions related to the theory of linear operators in normed spaces, deepening in the selfadjoint case for which we give a polar decomposition theorem.

Starting the third chapter, we define the spectrum of an operator and we show some stability theorems for the semi-Fredholm ones. Then, we introduce the concept of spectral family and based on it, we give a decomposition theorem for selfadjoint operators.

Finally, applying all the concepts above we prove the existence and uniqueness of solution for the Schrödinger equation. On the other hand, we analyse and give examples of spectral decompositions for the main operators in physics, emphasising in the Schrödinger operator and the potential taken into account in its expression.

Agradecimientos

No quiero pasar la ocasión sin agradecerle a mi tutor, Juan Casado Díaz, por todo el tiempo y esfuerzo dedicado en ayudarme, así como por su gran labor docente tanto en las asignaturas que he tenido el placer de cursar con él como en el presente trabajo de fin de estudios.

Y por último, pero no por ello menos importante, quiero agradecer a mi familia, a mis compañeros que han estado durante estos cinco años a mi lado y a mis amigos de siempre que nunca han faltado. Gracias por el apoyo en los momentos difíciles, por las sonrisas en los momentos buenos y, sobre todo, gracias por permitir que pueda compartir todos esos momentos con vosotros.

Índice general

Introducción	3
1. Fundamentos físicos	5
1.1. Breve recordatorio de Mecánica Clásica	5
1.2. Introducción a los principios básicos de la Mecánica Cuántica	10
2. Resultados de Análisis Funcional	18
2.1. Espacios normados, de Banach y de Hilbert	18
2.2. Teoría de distribuciones y espacios de Sobolev	20
2.3. La transformada de Fourier	24
2.4. Operadores lineales entre espacios normados	28
2.5. Operadores autoadjuntos y teorema de descomposición polar	35
3. Teoría espectral para operadores autoadjuntos	41
3.1. Introducción a la teoría espectral	41
3.2. Familias espectrales y teorema de descomposición espectral	48
4. Aplicaciones en Mecánica Cuántica	57
4.1. Leyes de conservación y ecuación de Schrödinger	57
4.2. Resolución espectral de algunos operadores importantes y aplicaciones	67
4.3. Descomposición espectral del Hamiltoniano. Aplicaciones clásicas	75
4.4. Observaciones finales	90
Bibliografía	93

Introducción

La Mecánica Cuántica es la base del desarrollo de la física actual e interviene en numerosos aspectos de la misma, bien como punto de partida para conformar nuevos campos de estudio o como teoría per se. Gracias a ella se ha conseguido dar explicación a fenómenos que desde un punto de vista clásico son inabarcables, como pueden ser la estructura atómica del hidrógeno, la existencia del espín, la estructura de la tabla periódica o la conocida Dualidad Onda-Corpúsculo de la materia. No obstante, a niveles básicos de la teoría se asume, sin ahondar en el formalismo matemático consecuente, una extensión inmediata a dimensión infinita de resultados de descomposición espectral de operadores en espacios vectoriales de dimensión finita. En realidad, un estudio matemáticamente correcto de la Mecánica Cuántica conlleva el uso de una gran cantidad de útiles relacionados con el Análisis Funcional, que la hace especialmente interesante desde el punto de vista matemático y no solo físico.

Durante la presente memoria introducimos varios de los conceptos matemáticos que son necesarios para demostrar lo anteriormente comentado, estudiando sus propiedades principales. Posteriormente y apoyándonos en ellos, presentamos la descomposición espectral de los operadores más comúnmente utilizados en Mecánica Cuántica, centrándonos en el caso del operador de Schrödinger y su relación con la llamada “Ecuación de Schrödinger”.

A lo largo del primer capítulo recordamos conceptos generales de la Mecánica Clásica, como son las magnitudes conservadas que surgen de las simetrías de un sistema, el Principio de Mínima Acción y la ecuación de Hamilton-Jacobi. Introducimos además el contexto histórico que motiva la aparición de la Mecánica Cuántica, comentando brevemente las diferencias con respecto a la clásica para, finalmente, mostrar una derivación semiclásica de la ecuación de Schrödinger basada en la Óptica Geométrica.

Durante el siguiente capítulo estudiamos parte de las herramientas matemáticas necesarias para el análisis matemático de la Mecánica Cuántica. En él definimos los conceptos de espacios de Banach y Hilbert, realizamos una pequeña introducción a la teoría distribuciones, la cual utilizamos para definir a su vez los espacios de Sobolev, y presentamos la transformada de Fourier junto con

propiedades de la misma. Por último, nos centramos en el estudio de los operadores lineales entre espacios normados, destacando el caso de los operadores autoadjuntos y su descomposición polar.

En el tercer capítulo definimos el espectro asociado a un operador y mostramos varios resultados relativos al espectro de operadores no necesariamente continuos. En particular, introducimos los operadores semi-Fredholm y mostramos varios resultados de estabilidad importantes para su nulidad, deficiencia e índice. Durante la segunda parte del capítulo, nos centramos de nuevo en los operadores autoadjuntos dando un teorema de descomposición espectral para operadores cuyo espectro no es necesariamente numerable. Ello estará presente en la definición de familia espectral.

En el último capítulo, presentamos finalmente la resolución espectral de algunos de los operadores más relevantes en física, ahondando en la del operador Hamiltoniano y dando un resultado de existencia y unicidad de solución de la ecuación de Schrödinger. Además, estudiamos distintas aplicaciones clásicas para lo comentado anteriormente y presentamos varios resultados asociados a la obtención del espectro del operador de Schrödinger para distintos tipos de potencial. El desarrollo de esta parte conllevará el uso de la transformada de Fourier y las familias de polinomios ortogonales más conocidas en matemáticas, i.e. los polinomios de Legendre, Hermite y Laguerre. Terminamos el capítulo realizando algunas observaciones que consideramos merecen ser mencionadas.

Capítulo 1

Fundamentos físicos

1.1. Breve recordatorio de Mecánica Clásica

En Mecánica Clásica, el movimiento de un sistema físico formado por n partículas queda establecido a través de las funciones $x_i = x_i(t)$, $1 \leq i \leq n$, las cuales proporcionan para cada instante t la posición $x_i(t) \in \mathbb{R}^3$ de la partícula i -ésima. A partir de estas funciones podemos calcular las velocidades $v_i(t) = x'_i(t)$ y las aceleraciones $a_i(t) = x''_i(t)$. Las funciones x_i se pueden estudiar desde distintos marcos teóricos, uno de ellos es el de la Mecánica Lagrangiana. Este marco teórico se basa en el Principio de Mínima Acción (equivalente a la segunda ley de Newton) que nos dice que existe una función $L : \mathbb{R} \times \mathbb{R}^{3n} \times \mathbb{R}^{3n} \rightarrow \mathbb{R}$ (denominada función Lagrangiana) cumpliendo que, si en un instante t_0 las partículas se encuentran en las posiciones $x_{i,0}$ y en un instante posterior t_1 en $x_{i,1}$, entonces el sistema evoluciona entre los instantes t_0 y t_1 de forma que las funciones x_i son solución del problema de Cálculo de Variaciones

$$\min_{x_i(t_0)=x_{i,0}, x_i(t_1)=x_{i,1}} \int_{t_0}^{t_1} L(t, x_1(t), \dots, x_n(t), x'_1(t), \dots, x'_n(t)) dt.$$

Esto proporciona el sistema diferencial ordinario de $3n$ ecuaciones de segundo orden ($x = (x_1, \dots, x_n)$, $x' = (x'_1, \dots, x'_n)$)

$$\frac{d}{dt} \nabla_{x'} L(t, x, x') = \nabla_x L(t, x, x').$$

Más generalmente, las funciones x_i no tienen por qué referirse a las coordenadas euclídeas, sino que pueden corresponder a un sistema de coordenadas *generalizadas* que parametrizan un cierto conjunto de \mathbb{R}^3 donde se mueve la partícula i -ésima. Esto permite fácilmente incorporar condiciones de ligadura que reducen el número de grados de libertad de cada partícula y por consiguiente disminuyen el número tanto de ecuaciones como de incógnitas.

Observar que el sistema se puede escribir partícula a partícula en la forma

$$\frac{d}{dt} \nabla_{x'_i} L(t, x, x') = \nabla_{x_i} L(t, x, x') \quad i = 1, \dots, n.$$

Por similitud con las ecuaciones usuales correspondientes a la segunda ley de Newton, se llama impulso generalizado de la partícula i -ésima al vector

$$p_i = \nabla_{x'_i} L(t, x, x'),$$

mientras que

$$F_i = \nabla_{x_i} L(t, x, x')$$

representa la fuerza generalizada que actúa sobre la partícula i -ésima.

Si suponemos por fijar ideas que cada partícula tiene tres grados de libertad, entonces al tratarse de un sistema de segundo orden con $3n$ ecuaciones, el sistema debe admitir $6n$ integrales primeras. Recordar que una función $\Phi = \Phi(t, x, x')$ es una integral primera si para toda solución $x = x(t)$ del sistema existe $C \in \mathbb{R}$ tal que $\Phi(t, x(t), x'(t)) = C$, i.e. Φ es una cantidad que se conserva cuando el sistema evoluciona. De estas cantidades conservativas hay algunas más importantes (en general) por su significado físico. Ellas corresponden a las leyes de conservación usuales en mecánica que pasamos a recordar. En los puntos 2 y 3 siguientes suponemos que las variables son euclídeas:

1. *Uniformidad del tiempo.* Establece que si $x(t)$ es una solución del sistema entonces $x(t + T)$ también es solución para todo $T \in \mathbb{R}$. Matemáticamente esto supone que el sistema es autónomo o que podemos tomar $L = L(x, x')$. En este caso un simple cálculo demuestra que si x es una solución del sistema entonces

$$\frac{d}{dt} \left(\nabla_{x'} L(x, x') \cdot x' - L(x, x') \right) = 0,$$

y por tanto la conservación de la cantidad $E(x, x') = \nabla_{x'} L(x, x') \cdot x' - L(x, x')$ que es lo que se conoce como energía del sistema. En el caso en que L depende de t , también definimos la energía como $\nabla_{x'} L(t, x, x') \cdot x' - L(t, x, x')$, aunque ahora esta cantidad no se conserva. Usualmente esto corresponde al caso en que descomponemos el sistema en dos, i.e. suponemos que conocemos las funciones $x_i = x_i(t)$, $m + 1 \leq i \leq n$ y nos interesamos en el movimiento de las otras m , el cual dependerá no solo de la interacción entre estas m partículas sino en cómo les afectan el resto. Esto es una práctica usual ya que resulta imposible en general tratar con todo el sistema. Denotando por x^m al vector asociado a las m primeras componentes de x y

por x^{n-m} al de las $n - m$ últimas, y teniendo en cuenta que la función L correspondiente al sistema completo no depende del tiempo, el sistema se escribe

$$\frac{d}{dt} \nabla_{x_i'} L(t, x^m, x^{n-m}(t), (x^m)', (x^{n-m})'(t)) = \nabla_{x_i} L(t, x^m, x^{n-m}(t), (x^m)', (x^{n-m})'(t)) \quad 1 \leq i \leq m,$$

lo cual es equivalente a aplicar el Principio de Mínima Acción a la función

$$\tilde{L} = \tilde{L}(t, x^m, (x^m)') = L(t, x^m, x^{n-m}(t), (x^m)', (x^{n-m})'(t)) - \phi(t),$$

donde ϕ es una función que sólo depende del tiempo (y que no aparece en las ecuaciones del movimiento).

2. *Uniformidad del espacio.* Establece que si $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ es una solución del sistema entonces $(x_1(t) + h, \dots, x_n(t) + h)$ es también solución. Esto significa que para todo punto (x, x') del espacio de fases y todo vector $h \in \mathbb{R}^3$ debe tenerse

$$0 = \nabla_h L(t, x_1 + h, \dots, x_n + h, x_1', \dots, x_n')|_{h=0} = \sum_{i=1}^n \nabla_{x_i} L(t, x, x'),$$

lo que usando las ecuaciones del movimiento y $p_i = \nabla_{x_i'} L(t, x, x')$ implica

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^n p_i \right) = 0.$$

Por tanto es equivalente a la conservación del impulso total

$$P = \sum_{i=1}^n p_i.$$

Como antes, el impulso no se conservará si L es la función de Lagrange correspondiente a una parte del sistema.

3. *Isotropía del espacio.* Establece que si $x(t) = (x_1(t), \dots, x_n(t))$ es solución del sistema entonces para toda matriz de giro Q , se tiene que $(Qx_1(t), \dots, Qx_n(t))$ es también solución. Esto significa que si $Q = Q(s)$ es una función definida en un entorno de $s = 0$ con valores en las matrices de giro tal que $Q(0) = I$, entonces debe tenerse

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{ds} L(t, Q(s)x_1, \dots, Q(s)x_n, Q(s)x_1', \dots, Q(s)x_n')|_{s=0} \\ &= \sum_{i=1}^n \left((Q'(0) \nabla_{x_i} L(t, x, x')) \cdot x_i + (Q'(0) \nabla_{x_i'} L(t, x, x')) \cdot x_i' \right). \end{aligned}$$

Usando el teorema de la función implícita es fácil ver que el conjunto de matrices de la forma $Q'(0)$ donde $s \mapsto Q(s)$ es un giro coincide con el conjunto de matrices antisimétricas. Se tiene por tanto que para toda matriz antisimétrica A

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^n (Ax_i) \cdot \nabla_{x'_i} L(t, x, x') \right) &= \sum_{i=1}^n \left((Ax'_i) \cdot \nabla_{x'_i} L(t, x, x') + Ax_i \cdot \frac{d}{dt} \nabla_{x'_i} L(t, x, x') \right) \\ &= - \sum_{i=1}^n \left(x'_i \cdot (A \nabla_{x'_i} L(t, x, x')) + x_i \cdot (A \nabla_{x_i} L(t, x, x')) \right) = 0. \end{aligned}$$

Esto prueba que para toda matriz antisimétrica A la cantidad

$$\sum_{i=1}^n (Ax_i) \cdot \nabla_{x'_i} L(t, x, x') = A : \left(\sum_{i=1}^n \nabla_{x'_i} L(t, x, x') \otimes x_i \right) = A : \left(\sum_{i=1}^n p_i \otimes x_i \right)$$

no varía con el tiempo (aquí $A : B$ denota el producto escalar de las matrices A, B , i.e. $A : B = \sum_{i,j} a_{ij} b_{ij}$) pero esto es equivalente a decir que la parte antisimétrica de la matriz $\sum_{i=1}^n p_i \otimes x_i$ no varía con el tiempo. Teniendo en cuenta que las componentes no nulas de la parte antisimétrica de $p_i \otimes x_i$ coinciden con las del vector $l_i := x_i \times p_i$, definido como el momento angular de la partícula i -ésima, la isotropía del espacio implica entonces la conservación del momento angular total

$$L = \sum_{i=1}^n x_i \times p_i.$$

Recordamos que si x_i denotan las variables euclídeas usuales, entonces se debe tener

$$p_i = \nabla_{x'_i} L(t, x, x') = m_i x'_i$$

con m_i la masa de la partícula. Esto significa que L debe ser de la forma

$$L(t, x, x') = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} |x'_i|^2 + \Phi(t, x),$$

y por tanto

$$E(t, x, x') = \nabla_{x'} L(t, x, x') \cdot x' - L(t, x, x') = \sum_{i=1}^n \frac{m_i}{2} |x'_i|^2 - \Phi(t, x).$$

La cantidad $\frac{m_i}{2} |x'_i|^2$ es la energía cinética de la partícula i -ésima, la cual no depende de su posición, sino sólo de su velocidad. Cuando Φ no depende de t (caso en que la energía se conserva), la cantidad

$-\Phi(x)$ representa la energía potencial del sistema y usualmente se supone como una función que sólo depende de la distancia entre las distintas partículas.

Denotemos $p = (p_1, \dots, p_n)$ y supongamos que podemos escribir el vector velocidad x' como función de (t, x, p) , i.e. $x' = x'(t, x, p)$, lo cual es inmediato en el caso $p_i = m_i x'_i$. Definimos entonces la función Hamiltoniana H como la energía en las variables (t, x, p) i.e.

$$H(t, x, p) = E(t, x, x'(t, x, p)) = p \cdot x'(t, x, p) - L(t, x, x'(t, x, p)).$$

Derivando respecto de p y recordando que $p = \nabla_{x'} L$, deducimos

$$\nabla_p H = x' + (D_p x')^t p - (p^t D_p x')^t = x',$$

mientras que derivando respecto de x

$$\nabla_x H = -\nabla_x L.$$

Por tanto, el sistema diferencial de segundo orden que describe el movimiento de las partículas se escribe como el sistema de primer orden

$$\begin{cases} x' = \nabla_p H(t, x, p) \\ p' = -\nabla_x H(t, x, p). \end{cases} \quad (1.1.1)$$

Es lo que se conoce como sistema de ecuaciones canónicas, el cual nos proporciona la evolución del sistema a partir de la energía y constituye la base de la Mecánica Hamiltoniana (formulación hamiltoniana de la Mecánica Clásica) equivalente a la Newtoniana y a la Lagrangiana.

Volviendo al Principio de Mínima Acción, mencionar que dado un instante t_0 fijo en el cual conocemos el valor x_0 de las posiciones de las distintas partículas, podemos considerar la acción como una función de (T, y) con T un instante de tiempo e y el correspondiente vector de posición, i.e.

$$S(T, y) = \min_{x(t_0)=x_0, x(T)=y} \int_{t_0}^T L(t, x, x') dt,$$

de forma que

$$S(T, y) = \int_{t_0}^T L(t, x, x') dt$$

con $x = x(t, T, y)$ solución del problema de contorno

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \nabla_{x'} L(t, x, x') = \nabla_x L(t, x, x') \\ x(t_0, T, y) = x_0, \quad x(T, T, y) = y \end{cases}$$

Calculamos la derivada de S respecto a T , para lo cual observamos

$$x(t_0, T, y) = x_0 \Rightarrow \partial_T x(t_0, T, y) = 0, \quad D_y x(t_0, T, y) = 0.$$

$$x(T, T, y) = y \Rightarrow \partial_t x(T, T, y) = -\partial_T x(T, T, y), \quad D_y x(T, T, y) = I.$$

Usando también las ecuaciones del movimiento, tenemos

$$\begin{aligned} \partial_T S(T, y) &= L(T, y, \partial_t x(T, T, y)) + \int_{t_0}^T (\nabla_x L \cdot \partial_T x + \nabla_{x'} L \cdot \partial_{tT}^2 x) dt \\ &= L(T, y, \partial_t x(T, T, y)) + \int_{t_0}^T \nabla_x L \cdot (\partial_T x - \partial_T x) dt + \nabla_{x'} L(T, y, \partial_t x(T, T, y)) \cdot \partial_T x(T, T, y) \\ &= L(T, y, \partial_t x(T, T, y)) - \nabla_{x'} L(T, y, \partial_t x(T, T, y)) \cdot \partial_t x(T, T, y) = -H(T, y, p(T, T, y)), \end{aligned}$$

donde hemos escrito el impulso p también como función de los datos finales. Análogamente

$$\begin{aligned} \nabla_y S(T, y) &= \int_{t_0}^T (\nabla_x L \cdot D_y x + \nabla_{x'} L \cdot D_{ty}^2 x) dt \\ &= \nabla_{x'} L(T, y, \partial_t x(T, T, y)) D_y x(T, T, y) = p(T, T, y). \end{aligned}$$

Reemplazando esta ecuación en la igualdad para $\partial_T S$ obtenemos finalmente la ecuación de Hamilton-Jacobi

$$\partial_T S(T, y) + H(T, y, \nabla_y S(T, y)) = 0. \quad (1.1.2)$$

1.2. Introducción a los principios básicos de la Mecánica Cuántica

A comienzos del siglo XX con el descubrimiento del átomo y los estudios sobre radiación comienza a resultar claro que la Mecánica Clásica no da respuestas satisfactorias cuando examinamos la materia a nivel microscópico. Los primeros indicios provienen de la radiación del cuerpo negro

para cuya explicación Max Planck introdujo la hipótesis de que la energía se transmitía en paquetes proporcionales a la frecuencia de la radiación correspondiente y por tanto dejaba de ser una magnitud que tomara valores continuos, i.e.

$$E = h\nu, \tag{1.2.1}$$

donde E es la energía del fotón, ν su frecuencia y $h \sim 6,626 \cdot 10^{-34}$ Jul \times seg. es la constante de Planck. Esta hipótesis fue más tarde usada por Albert Einstein para explicar el efecto fotoeléctrico. En esta descripción la luz estaría formada por corpúsculos (fotones) que a pesar de no tener masa sí tienen un impulso asignado. Recordar que ya en el siglo XVII hubo una controversia acerca de la naturaleza de la luz. Mientras que Isaac Newton pensaba que la luz estaba constituida por partículas diminutas, Christian Huygens la consideraba un fenómeno ondulatorio. En el siglo XIX, algunos experimentos parecieron darle la razón a Huygens con lo que la luz pasa a ser considerada una onda. Las nuevas teorías aparecidas a comienzos del siglo XX dan una naturaleza dual a la luz. En unos casos se comporta como onda y en otros como partícula. Posteriormente, Louis-Victor de Broglie introdujo en 1924 la hipótesis de que toda la materia presenta características tanto ondulatorias como corpusculares (*Dualidad Onda-Corpúsculo*) asignándole a cada partícula una longitud de onda inversamente proporcional a su impulso. Esta hipótesis se vio confirmada tres años más tarde por los experimentos realizados por una parte por George Paget Thomson y por otra por Clinton Joseph Davisson y Lester Halbert Germer, que mostraron como efectivamente una nube de electrones presentaba fenómenos de difracción y por tanto se comportaba como una onda. Para explicar de forma conveniente todos estos fenómenos nació la Mecánica Cuántica impulsada por físicos como Werner Heisenberg, Erwin Schrödinger y Paul Dirac.

Como hemos visto anteriormente en Mecánica Clásica, el comportamiento de un sistema de n partículas queda definido a partir de las correspondientes funciones de posición. Conjuntamente a algunas propiedades físicas como la masa y la carga, estas funciones permiten dar un valor concreto a las distintas magnitudes físicas asociadas tales como la velocidad, la energía, el impulso, el momento angular,... En Mecánica Cuántica sin embargo, estas magnitudes no tienen en general un valor definido, tan sólo podemos hablar de valores probables. Estos valores se van a asignar a partir de la llamada función de onda $\psi : (0, T) \times \Omega \subset \mathbb{R}^{1+3n} \rightarrow \mathbb{C}$, con $\Omega \subset \mathbb{R}^{3n}$ abierto,

$\psi = \psi(t, x_1, \dots, x_n)$. La idea es la siguiente: consideremos una cierta magnitud física con valores en \mathbb{R} (por ejemplo la primera componente espacial de la posición de una de las partículas del sistema) que denotamos por A . A esta magnitud le vamos asociar un operador lineal autoadjunto en $L^2(\Omega)$ que seguimos denotando por A el cual envía la función de onda $\psi(t, \cdot)$ en otra función $(A\psi)(t, \cdot)$. En este caso el cociente de Rayleigh

$$M_A(\psi) = \frac{\int_{\Omega} (A\psi(t, x)) \overline{\psi(t, x)} dx}{\int_{\Omega} |\psi(t, x)|^2 dx},$$

nos da el valor medio que tiene ésta en el instante t . Comentar que usualmente, la función de onda se toma con norma uno en $L^2(\Omega)$ de forma que no es necesario el denominador en la expresión anterior.

Vemos por tanto que, contrariamente a la Mecánica Clásica, ahora no asignamos en general valores concretos a una magnitud física sino valores medios. Por tanto sólo podemos hablar de probabilidades. Para una mejor descripción matemática de cómo se asignan estas probabilidades supongamos que el operador A admite una descomposición espectral a partir de una cantidad numerable de autovalores λ_k (por fijar ideas suponemos que son distintos entre ellos y que no hay degeneración), los cuales tienen asignados un sistema completo ortonormal de autofunciones u_k . En ese caso, la función ψ se escribe en la forma

$$\psi(t, x) = \sum_{k=1}^{\infty} \psi_k(t) u_k(x) \quad \text{con} \quad \sum_{k=1}^{\infty} |\psi_k(t)|^2 = 1, \quad \forall t \in (0, T).$$

Aplicando el operador A tenemos por otra parte

$$(A\psi)(t, x) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k \psi_k(t) u_k(x),$$

y por tanto el valor medio de la magnitud física viene dado por

$$M_A(\psi) = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda_k |\psi_k(t)|^2.$$

Observamos por consiguiente que $M_A(\psi)$ se obtiene como una media entre los valores λ_k . Físicamente la magnitud A no toma valores continuos como en Mecánica Clásica, sólo los valores λ_k son admisibles. Esto es coherente con el modelo de Max Planck para la descripción de la radiación

del cuerpo negro donde la energía solo toma una cantidad numerable de valores o con el modelo atómico de Niels Bohr donde la energía, el momento angular o la distancia de los electrones al núcleo toman valores discretos.

Matemáticamente observamos que la cantidad $|\psi_k(t)|^2$ no es otra cosa que la probabilidad de que el sistema tome el valor λ_k . El significado por tanto de la función de onda ψ es que a partir de ella podemos calcular las probabilidades de que cada magnitud física asociada al sistema tome determinados valores en un instante t . En el caso en que ψ sea de la forma $\psi(t, x) = \psi_m(t)u_m(x)$ (donde $|\psi_m(t)| = 1$) nos encontramos con que en cada instante t la magnitud física A del sistema toma el valor λ_m con probabilidad uno. Este es el caso en que al sistema le podemos asignar un valor concreto para la magnitud A en lugar de una cantidad probable. Esto ocurre cuando $\psi(t, \cdot)$ está en el espacio de autofunciones asociado a λ_m que en el caso degenerado puede tener dimensión mayor que uno. Las correspondientes autofunciones se denominan funciones de estado asociadas a la magnitud. Está claro que el hecho de que ψ sea una autofunción asociada a una cierta magnitud no implica que lo sea para otra. Por tanto, si conocemos el valor exacto de una magnitud, entonces hay otras de las que sólo podemos hablar en términos probabilísticos. Esto es esencialmente la base del Principio de Incertidumbre de Heisenberg que más tarde veremos de forma más específica.

Aunque la descripción que hemos comentado se refiere a un espectro numerable, comentarios similares son ciertos para espectros continuos donde las sumas deben ser reemplazadas por integrales. Desde el punto de vista matemático surgen, sin embargo, varias dificultades. Para presentar la teoría de una forma más simple de comprender es usual presentarla como si los resultados clásicos de descomposición espectral para una matriz hermítica se pudieran extender sin más al caso de dimensión infinita. Sin embargo esta extensión no es tan simple. Para poder presentar la teoría de una forma matemáticamente correcta necesitaremos varios resultados de Análisis Funcional como son la teoría de las distribuciones, la transformada de Fourier y la teoría espectral para operadores autoadjuntos en un espacio de Hilbert. Nuestro deseo en la presente memoria es realizar una introducción a estas cuestiones y mostrar como se aplican a la resolución de algunos problemas clásicos en Mecánica Cuántica.

Terminamos esta pequeña introducción recordando cómo se realiza desde el punto de vista

físico la transición entre la Mecánica Clásica y la Mecánica Cuántica, la cual usaremos a la hora de decidir que operadores debemos asignar a diversas magnitudes físicas. Básicamente, la idea es que cuando la constante de Planck h definida en (1.2.1) ‘tiende’ a cero, la Mecánica Cuántica debe coincidir con la Mecánica Clásica. En realidad los físicos ya se habían enfrentado a un problema similar con anterioridad y por tanto el razonamiento debía ser análogo. Se trata de la Óptica Geométrica. Como ya hemos comentado anteriormente, en el siglo XIX estaba claro que la luz era un fenómeno ondulatorio, sin embargo debido a su pequeña longitud de onda también era conocido que se podía trabajar como si la luz se moviera bajo la forma de rayos que tienen asignada una posición y una velocidad. Ellos siguen la Ley de Fermat, se mueven de un punto a otro minimizando el intervalo de tiempo empleado en el desplazamiento. Para obtener las ecuaciones clásicas de la Óptica Geométrica, recordamos que la luz está compuesta por ondas electromagnéticas (variaciones de los campos eléctrico y magnético) cuyas componentes (en un medio homogéneo) verifican la ecuación de ondas

$$\partial_{tt}^2 u - c^2 \Delta_x u = 0, \quad (1.2.2)$$

donde $c > 0$ es la velocidad de la luz en el medio. Una solución particular de esta ecuación es lo que se conoce como una onda plana periódica monocromática, la cual es de la forma

$$u(t, x) = ae^{-i\omega(t - \frac{1}{c}n \cdot x)} \quad (1.2.3)$$

con a un número complejo, ω real y n un vector unitario (si estamos interesados en soluciones reales, deberíamos tomar parte real). En un instante t dado todos los puntos correspondientes a un plano perpendicular a n están en la misma fase, de ahí el nombre de onda plana. El vector n nos proporciona la dirección de propagación de la onda. Si tomamos dos valores temporales t_1, t_2 y dos puntos espaciales $x_1, x_2 = x_1 + c(t_2 - t_1)n$, entonces también se tiene $u(t_1, x_1) = u(t_2, x_2)$. Esto indica que la onda se propaga a velocidad c . Se suele denominar a ω la frecuencia circular o cíclica (o simplemente frecuencia) de la onda. La frecuencia ν entendida como número de ciclos por unidad de tiempo viene en realidad dada por $\omega/(2\pi)$. La magnitud $\lambda := 2\pi c/\omega = c/\nu$ es la longitud de onda, $k = \omega n/c$ es el vector de ondas. A partir de él, podemos escribir u en la forma

$$u(t, x) = ae^{i(k \cdot x - \omega t)}. \quad (1.2.4)$$

En la Óptica Geométrica, más generalmente que (1.2.3) es usual interesarse por soluciones de la ecuación (1.2.2) de la forma

$$u(t, x) = A(t, x)e^{i\phi(t, x)} \quad (1.2.5)$$

con ϕ , función iconal (o eikonal), una función real tal que ella y sus derivadas toman valores grandes, lo que corresponde a una longitud de onda pequeña. Sustituyendo en (1.2.2), deducimos

$$\partial_{tt}^2 A - c^2 \Delta_x A + 2i(\partial_t A \partial_t \phi - c^2 \nabla_x A \cdot \nabla_x \phi) + iA(\partial_{tt}^2 \phi - c^2 \Delta_x \phi) + A(-|\partial_t \phi|^2 + c^2 |\nabla_x \phi|^2) = 0.$$

Como ϕ y sus derivadas se supone que toman grandes valores, se deduce en una primera aproximación la ecuación para ϕ

$$|\partial_t \phi|^2 = c^2 |\nabla_x \phi|^2. \quad (1.2.6)$$

Es lo que se conoce como ecuación de la iconal (o eikonal) y salvo signo es equivalente a (recordar que ϕ es real)

$$\partial_t \phi + c |\nabla_x \phi| = 0. \quad (1.2.7)$$

En el caso en que la luz se desplaza en un medio no homogéneo, isotrópico, la ecuación que verifican las ondas electromagnéticas es más compleja que (1.2.2) pero se prueba que la iconal sigue verificando (1.2.7) donde ahora la velocidad de la onda $c = c(x)$ depende de la posición. Podemos buscar una semejanza entre la ecuación (1.2.7) y la ecuación (1.1.2). Para ello tomamos $H(t, x, p) = c(x)|p|$, de forma que los puntos del haz de luz se pueden considerar como un sistema de partículas cuya posición se puede calcular a través del sistema

$$x' = c \frac{p}{|p|}, \quad p' = -|p| \nabla_x c.$$

El papel de ϕ sería el de la acción asociada al movimiento. Así, en el caso de la onda plana (1.2.4) (la longitud de onda debe ser pequeña) donde $\phi = k \cdot x - \omega t$ y recordando que en la ecuación de Hamilton-Jacobi el gradiente de la acción coincide con el impulso nos encontramos con que el vector k juega un papel similar al del impulso y la frecuencia ω un papel similar a la energía. Conviene observar sin embargo, que cualquier múltiplo de ϕ verifica la misma ecuación y que por tanto convendría escoger este múltiplo para asignar efectivamente un valor al impulso y a la energía. Así, si tenemos en cuenta la ecuación de Planck (1.2.1) para los fotones y recordamos que la frecuencia

asociada a la onda (1.2.4) no es ω sino $\omega/(2\pi)$, lo que deberíamos esperar es que la Hamiltoniana entendida como la energía asociada a la iconal venga dada por

$$H(t, x, p) = \hbar c(x)|p|,$$

con

$$\hbar = \frac{h}{2\pi}. \quad (1.2.8)$$

Denotando S la acción correspondiente, que gracias a (1.2.7) y (1.1.2) debe venir dada por $S = \hbar\phi$, podemos escribir (1.2.5) como

$$u(t, x) = A(t, x)e^{i\frac{S(t, x)}{\hbar}}. \quad (1.2.9)$$

A fin de relacionar la Mecánica Clásica con la Mecánica Cuántica, lo que se supone es que (1.2.9) no se tiene sólo para fotones sino que deber cumplirlo una función de ondas en un caso cuasiclásico. Observar en este sentido que si escribimos (1.2.4) como (1.2.9) donde $S(t, x) = \hbar(k \cdot x - \omega t)$, tenemos que el impulso correspondiente a la onda viene dado por $p(t, x) = \hbar k$, y por tanto $|p| = \hbar\omega/c$, de forma que

$$\lambda = \frac{2\pi c}{\omega} = \frac{h}{|p|},$$

lo cual es coherente con la hipótesis de De Broglie, que recíprocamente a esta fórmula le asigna a toda partícula con un impulso p una onda con longitud $h/|p|$. La Mecánica Clásica debe obtenerse pasando al límite cuando \hbar tiende a cero en (1.2.9). La primera consecuencia importante de (1.2.9) es que nos va a dar una primera expresión para la ecuación fundamental de la Mecánica Cuántica: la ecuación de Schrödinger, que va a definir la evolución de la función de ondas con el tiempo. Observar que si la función de ondas u asociada a un sistema verifica (1.2.9) al menos de forma aproximada, entonces derivando en (1.2.9) con respecto al tiempo y usando que \hbar es pequeño debemos tener también al menos de forma aproximada, que u verifica

$$\partial_t u = \frac{i}{\hbar} \partial_t S u.$$

En este punto conviene recordar que la acción S verifica la ecuación de Hamilton-Jacobi (1.1.2) de forma que $\partial_t S u$ debe poderse sustituir por $-Hu$ con H la función Hamiltoniana que coincide con

la energía. Esto conduce a la ecuación de Schrödinger para la función de ondas que es usual escribir como

$$i\hbar\partial_t u = Hu. \tag{1.2.10}$$

Para que esta ecuación pueda ser de alguna utilidad necesitamos una expresión para la energía H que como ya comentamos al hablar de los principios fundamentales de la teoría, debe corresponder a un cierto operador autoadjunto en un espacio $L^2(\Omega)$.

Capítulo 2

Resultados de Análisis Funcional

En este comienzo de capítulo nos centramos en enunciar, sin demostración, las nociones y los resultados básicos de Análisis Funcional, teoría de distribuciones y transformada de Fourier vistos durante la carrera en las asignaturas de Análisis Funcional, Análisis Funcional y Ecuaciones en Derivadas Parciales y Análisis de Fourier respectivamente. Posteriormente, introduciremos brevemente la teoría de operadores lineales necesaria para esta memoria.

2.1. Espacios normados, de Banach y de Hilbert

Definición 2.1.1. Sea X un espacio vectorial. Una norma en X es una aplicación $\|\cdot\| : X \rightarrow \mathbb{R}$ tal que para todo $x, y \in X$ y todo $\lambda \in \mathbb{C}$ cumple

$$\|x\| \geq 0, \quad \|x\| = 0 \iff x = 0.$$

$$\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|.$$

$$\|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|.$$

Un espacio X dotado de una norma se denomina espacio normado.

Damos a continuación dos ejemplos de espacios normados que van a resultar de interés para las siguientes secciones.

Ejemplo 2.1.2. Sea Ω un subconjunto abierto de \mathbb{R}^N , $p \in [1, +\infty)$, definimos los espacios $\mathcal{L}^p(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ medibles} : \int_{\Omega} |f(x)|^p dx < \infty\}$ y $\mathcal{L}^\infty(\Omega) = \{f : \Omega \rightarrow \mathbb{C} \text{ medibles} : \exists C > 0 \text{ con } |f(x)| \leq C \text{ e.c.t. } x \in \Omega\}$. Sobre estos espacios establecemos la relación de equivalencia

$$f \sim g \iff f = g \text{ e.c.t. } x \in \Omega.$$

Entonces, $L^p(\Omega) = \mathcal{L}^p(\Omega) / \sim \quad \forall p \in [1, +\infty]$ son espacios normados con la norma

$$\|f\|_{L^p(\Omega)} = \|f\|_p = \left(\int_{\Omega} |f(x)|^p dx \right)^{\frac{1}{p}}, \text{ si } 1 \leq p < +\infty,$$

$$\|f\|_{L^\infty(\Omega)} = \|f\|_\infty = \text{ínf} \{C : |f(x)| \leq C \text{ e.c.t. } x \in \Omega\}.$$

A partir de estas normas podemos dotar los espacios de una noción de convergencia. Se dirá que f_n converge a f en $L^p(\Omega)$ si $\|f_n - f\|_p \rightarrow 0$.

Ejemplo 2.1.3. Sean X, Y espacios normados. Un operador lineal $A : X \rightarrow Y$ es continuo si y sólo si está acotado en el sentido de que existe una constante $C \geq 0$ tal que

$$\|Ax\|_Y \leq C\|x\|_X, \quad \forall x \in X.$$

El espacio de los operadores lineales y continuos de X en Y , $\mathcal{L}(X, Y)$ es un espacio normado con la norma

$$\|A\| = \sup_{\substack{\|x\|_X \leq 1 \\ x \neq 0}} \frac{\|Ax\|_Y}{\|x\|_X} = \sup_{\|x\|_X=1} \|Ax\|_Y = \text{mín} \{C \geq 0 : \|Ax\|_Y \leq C\|x\|_X, \quad \forall x \in X\}.$$

Un caso particular de espacios normados son aquellos cuya norma proviene de un producto escalar.

Definición 2.1.4. Sea H un espacio vectorial. Un producto escalar en H es una aplicación $(\cdot|\cdot) : H \times H \rightarrow \mathbb{C}$ tal que

$$(x|x) \geq 0, \quad (x|x) = 0 \iff x = 0.$$

$$(\alpha x + \beta y|z) = \alpha(x|z) + \beta(y|z), \quad \forall x, y, z \in H, \quad \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}.$$

$$(x|y) = \overline{(y|x)}, \quad \forall x, y \in H.$$

Un espacio H dotado de un producto escalar se llama espacio prehilbertiano. Todo espacio prehilbertiano es normado con la norma

$$\|x\| = \sqrt{(x|x)}, \quad \forall x \in H.$$

Ejemplo 2.1.5. El espacio de funciones $L^2(\Omega)$ es un espacio prehilbertiano con el producto escalar

$$(f|g)_{L^2(\Omega)} = (f|g)_2 = \int_{\Omega} f(x)\overline{g(x)} dx.$$

En esta memoria nos centramos en el estudio de los espacio normados que además son completos respecto de una cierta distancia.

Definición 2.1.6. Sea X espacio normado con norma $\|\cdot\|$. Decimos que X es espacio de Banach si es completo para la distancia $d(x, y) = \|x - y\|$. Si la norma proviene de un producto escalar, el espacio en cuestión recibe el nombre de espacio de Hilbert.

Para terminar esta sección, ilustramos algunos ejemplos de espacios de Banach y de Hilbert.

Ejemplo 2.1.7. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto y sean X, Y espacios normados.

1. Los espacios de funciones $L^p(\Omega)$ antes definidos son espacios de Banach, en el caso particular $p = 2$ tenemos un espacio de Hilbert.
2. Si Y es de Banach entonces $\mathcal{L}(X, Y)$ es también de Banach.

2.2. Teoría de distribuciones y espacios de Sobolev

En esta sección daremos forma a una generalización del concepto de derivada, la cual nos ayudará a dar un rigor matemático a las derivadas de funciones (no siempre derivables en el sentido habitual) presentes en la Mecánica Cuántica.

Definición 2.2.1. Dado Ω un conjunto abierto de \mathbb{R}^N , definimos por $\mathcal{D}(\Omega)$ al espacio $C_c^\infty(\Omega)$ dotado de la siguiente noción de convergencia:

Una sucesión $\varphi_n \in \mathcal{D}(\Omega)$ se dice que converge hacia una función $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$ si existe $K \subset \Omega$ compacto tal que $\text{sop}(\varphi_n)$ está contenido en K para todo $n \in \mathbb{N}$, y además para todo $\alpha \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^N$ se tiene

$$\partial_\alpha^{|\alpha|} \varphi_n \rightarrow \partial_\alpha^{|\alpha|} \varphi \text{ uniformemente en } \Omega.$$

Observación 2.2.2. Como la convergencia uniforme de funciones implica la convergencia puntual se tiene que, bajo las hipótesis anteriores $\text{sop}(\varphi) \subset K$.

Conocido el espacio $\mathcal{D}(\Omega)$ podemos definir el espacio de distribuciones.

Definición 2.2.3. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto, una distribución en Ω es una aplicación $T : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ lineal tal que si φ_n converge a φ en $\mathcal{D}(\Omega)$ entonces $T(\varphi_n)$ converge a $T(\varphi)$.

El espacio de las distribuciones sobre Ω lo denotamos por $\mathcal{D}'(\Omega)$. Si $T \in \mathcal{D}'(\Omega)$ y $\varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$ usamos la notación $\langle \varphi, T \rangle_{\mathcal{D}(\Omega), \mathcal{D}'(\Omega)}$ para referirnos a $T(\varphi)$, omitimos los subíndices cuando se sobreentienda los espacios en los que trabajamos.

Sobre el espacio $\mathcal{D}'(\Omega)$ se define también una convergencia entre sus elementos. Una sucesión T_n de distribuciones se dice que converge a una distribución T en $\mathcal{D}'(\Omega)$, y se escribe

$$T_n \rightarrow T \text{ en } \mathcal{D}'(\Omega)$$

si

$$\langle \varphi, T_n \rangle \rightarrow \langle \varphi, T \rangle, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Introducimos a continuación lo que se entiende por derivada de distribuciones o derivada distribucional.

Definición 2.2.4. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto, dada $T \in \mathcal{D}'(\Omega)$, $1 \leq i \leq N$ definimos la derivada i -ésima de T , $\partial_i T \in \mathcal{D}'(\Omega)$ por

$$\langle \varphi, \partial_i T \rangle = -\langle \partial_i \varphi, T \rangle, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Proposición 2.2.5. *La definición de $\partial_i T$ proporciona efectivamente una distribución. Además si T_n converge a T en $\mathcal{D}'(\Omega)$, entonces $\partial_i T_n$ converge a $\partial_i T$ en $\mathcal{D}'(\Omega)$.*

Observación 2.2.6. Podemos generalizar esta noción de derivada a órdenes superiores. Para ello, sea el operador diferencial $\partial_\alpha^{|\alpha|}$ con $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n) \in (\mathbb{N} \cup \{0\})^n$ un multiíndice, y consideremos $D = \sum_\alpha A_\alpha \partial_\alpha^{|\alpha|}$ con $A_\alpha \in \mathbb{C} \forall \alpha$. Si definimos $D' = \sum_\alpha (-1)^{|\alpha|} A_\alpha \partial_\alpha^{|\alpha|}$ como el operador diferencial traspuesto asociado a D , entonces

$$\langle \varphi, DT \rangle = \langle D' \varphi, T \rangle, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Cabe resaltar el caso particular del Laplaciano Δ , el cual aparece en numerosos ámbitos de la Mecánica Cuántica (en especial en el operador de Schrödinger) y para el que se cumple

$$\langle \varphi, \Delta T \rangle = \langle \Delta \varphi, T \rangle, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Veamos ahora la relación existente entre las distribuciones y las funciones para el caso en que estas últimas cumplan ciertas propiedades. Es necesario para ello centrarnos en el siguiente espacio:

Definición 2.2.7. Dado $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto, se define $L^1_{loc}(\Omega)$ como el conjunto de las funciones $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ medibles tales que

$$\int_K |f(x)| dx < +\infty, \quad \forall K \subset \Omega \text{ compacto.}$$

En el espacio $L^1_{loc}(\Omega)$, se define la siguiente noción de convergencia: una sucesión $f_n \in L^1_{loc}(\Omega)$ converge a $f \in L^1_{loc}(\Omega)$ si f_n converge a f en $L^1(K)$ para todo $K \subset \Omega$ compacto, i.e. si

$$\int_K |f_n(x) - f(x)| dx \rightarrow 0, \quad \forall K \subset \Omega \text{ compacto.}$$

Proposición 2.2.8. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto. Para toda $f \in L^1_{loc}(\Omega)$ se define $T_f : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$ por

$$T_f(\varphi) = \int_{\Omega} f(x)\varphi(x) dx, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega),$$

entonces $T_f \in \mathcal{D}'(\Omega)$ y la aplicación $f \in L^1_{loc}(\Omega) \mapsto T_f \in \mathcal{D}'(\Omega)$ es lineal e inyectiva. Además, si f_n converge a f en $L^1_{loc}(\Omega)$, entonces T_{f_n} converge a T_f en $\mathcal{D}'(\Omega)$.

Observación 2.2.9. Gracias a la proposición anterior podemos identificar f con T_f y verla como una distribución, en tal caso notaremos a T_f simplemente por f . Esto permite asociar una derivada a funciones que no tienen por qué ser derivables en el sentido habitual. Basta con tomar la derivada distribucional de la distribución a la que da lugar la función.

Esta noción de derivada es consistente con el caso en el que nuestra función es derivable clásicamente. Más concretamente

Proposición 2.2.10. Si $f \in C^1(\Omega)$ con $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto (y por tanto $f \in L^1_{loc}(\Omega)$ y tiene sentido hablar de derivada distribucional), la derivada clásica y la distribucional en Ω coinciden.

Aunque la multiplicación de dos distribuciones arbitrarias no es posible (por ejemplo se puede analizar el caso de la función localmente integrable en $\Omega = (-1, 1)$, $f(x) = \frac{1}{\sqrt{x}}$ y su cuadrado en ese mismo intervalo), sí es posible establecer una multiplicación entre distribuciones siempre y cuando uno de los dos factores sea suficientemente regular. Es por tanto que consideraremos que una de las distribuciones implicadas en el producto es infinitamente diferenciable en el sentido usual.

Definición 2.2.11. Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto, $T \in \mathcal{D}'(\Omega)$ y $\alpha \in C^\infty(\Omega)$, entonces existe el producto $\alpha T \in \mathcal{D}'(\Omega)$ definido por

$$\langle \varphi, \alpha T \rangle = \langle \alpha \varphi, T \rangle, \quad \forall \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Se puede comprobar que este producto así definido junto con la derivada de distribuciones antes estudiada cumplen la regla de derivación de un producto usual.

Proposición 2.2.12. (Regla de Leibnitz) Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto, $T \in \mathcal{D}'(\Omega)$ y $\alpha \in C^\infty(\Omega)$, entonces

$$\partial_i(\alpha T) = \partial_i \alpha T + \alpha \partial_i T,$$

donde la derivada se toma en el sentido de las distribuciones.

Observación 2.2.13. Aunque hemos supuesto siempre que uno de los factores es infinitamente derivable clásicamente, esta hipótesis se puede relajar dependiendo de cada caso particular. Por tanto, habrá ocasiones en las que el producto de dos distribuciones estará bien definido sin necesidad de imponer tanta regularidad a un factor.

A partir del concepto de derivada distribucional y de los espacios $L^p(\Omega)$ se pueden definir nuevos espacios vectoriales, los espacios de Sobolev.

Definición 2.2.14. Para $1 \leq p \leq \infty$ y $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto, se define el espacio $W^{1,p}(\Omega)$ por

$$W^{1,p}(\Omega) = \left\{ u \in L^p(\Omega), \nabla u \in L^p(\Omega)^N \right\}.$$

Este espacio es un espacio de Banach con la norma

$$\|u\|_{W^{1,p}(\Omega)} = \left(\|u\|_{L^p(\Omega)}^p + \|\nabla u\|_{L^p(\Omega)^N}^p \right)^{\frac{1}{p}}, \quad 1 \leq p \leq \infty.$$

En el caso particular $p = 2$, se suele notar el espacio $W^{1,2}(\Omega) = H^1(\Omega)$. Este espacio es Hilbert separable con el producto escalar

$$(u|v)_{H^1(\Omega)} = \int_{\Omega} (uv + \nabla u \cdot \nabla v) dx. \quad \forall u, v \in H^1(\Omega).$$

Análogamente se pueden definir los espacios $W^{k,p}(\Omega)$ como los espacios de funciones que son k veces derivables con derivada en $L^p(\Omega)$. En este caso notamos $W^{k,2}(\Omega) = H^k(\Omega)$.

Definición 2.2.15. Para $1 \leq p \leq \infty$, se define $W_0^{1,p}(\Omega)$ como el cierre de $\mathcal{D}(\Omega)$ en $W^{1,p}(\Omega)$. Si Ω es acotado, una norma equivalente a la de $W^{1,p}(\Omega)$ en este espacio viene dada por

$$\|u\|_{W^{1,p}(\Omega)} = \|\nabla u\|_{L^p(\Omega)^N}.$$

El espacio dual de $W^{1,p}(\Omega)$ es un espacio de distribuciones que se suele notar por $W^{-1,p'}(\Omega)$. Para el caso $p = 2$ se siguen las notaciones $W_0^{1,2}(\Omega) = H_0^1(\Omega)$ y $W^{-1,2}(\Omega) = H^{-1}(\Omega)$.

Contrariamente a los espacios $L^p(\Omega)$ en los cuales $\mathcal{D}(\Omega)$ es denso, en general los espacios $W_0^{1,p}(\Omega)$ y $W^{1,p}(\Omega)$ son distintos (esencialmente sólo son iguales para $\Omega = \mathbb{R}^N$). Sí que se tiene sin embargo el siguiente resultado de densidad.

Teorema 2.2.16. *Si Ω es un abierto regular de clase C^1 , entonces $C^\infty(\overline{\Omega})$ es denso en $W^{1,p}(\Omega)$.*

Otra propiedad importante de los espacios de Sobolev es que la existencia de derivadas en $L^p(\Omega)$ hace que estas funciones estén en un espacio de funciones más regulares que $L^p(\Omega)$. Concretamente, se tiene

Teorema 2.2.17. *(Sobolev) Sea $\Omega \subset \mathbb{R}^N$ abierto.*

- Si $1 \leq p < N$ ($p = N$ si $N = 1$) el espacio $W_0^{1,p}(\Omega)$ se inyecta con inyección continua en $L^{\frac{Np}{N-p}}(\Omega)$, y si Ω es acotado con inyección compacta en $L^r(\Omega)$, $1 \leq r \leq \frac{Np}{N-p}$.
- Si $p = N$ el espacio $W_0^{1,p}(\Omega)$ se inyecta con inyección continua en $L^q(\Omega)$, $p \leq q < \infty$.
- Si $p > N$ y Ω es acotado $W_0^{1,p}(\Omega)$ se inyecta con inyección compacta en $C^0(\overline{\Omega})$.

Los resultados anteriores son ciertos cambiando $W_0^{1,p}(\Omega)$ por $W^{1,p}(\Omega)$ si Ω es acotado y de clase C^1 . De hecho también se pueden obtener resultados similares para el caso de los espacios $W_0^{k,p}(\Omega)$ y $W^{k,p}(\Omega)$ (ver [1] Capítulo 9.3).

2.3. La transformada de Fourier

Introducimos en esta ocasión otra de las herramientas matemáticas más empleadas en la física moderna y en particular en la Mecánica Cuántica. En este caso, su utilización permite desarrollar teóricamente parte de los resultados que veremos al final de esta memoria.

Definición 2.3.1. Sea $f \in L^1(\mathbb{R})$, se define la transformada de Fourier de f como la función

$$\hat{f}(\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{-2\pi i\lambda x} dx.$$

Notaremos a la transformada tanto con \hat{f} como con $\mathcal{F}[f]$, haciendo referencia en este último caso al operador que a cada función $f \in L^1(\mathbb{R})$ le asocia su transformada de Fourier.

Observación 2.3.2. Al igual que se ha definido el operador \mathcal{F} , podemos definir otro operador que notaremos por $\overline{\mathcal{F}}$, tal que, si $f \in L^1(\mathbb{R})$

$$\overline{\mathcal{F}}[f](\lambda) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)e^{2\pi i\lambda x} dx.$$

De la definición de la transformada se pueden deducir directamente una serie de propiedades algebraicas.

Propiedades 2.3.3. Sean $f, g \in L^1(\mathbb{R})$ y $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$. Notando por \overline{f} a la conjugada de f , entonces se cumple

1. *Linealidad.* $\mathcal{F}[\alpha f + \beta g] = \alpha\mathcal{F}[f] + \beta\mathcal{F}[g]$.
2. *Conjugación.* $\mathcal{F}[\overline{f}](\lambda) = \overline{\mathcal{F}[f]}(-\lambda)$.
3. *Traslación.* Sea Z_h el operador de traslación asociado a $h \in \mathbb{R}$, i.e. $Z_h f(x) = f(x + h)$, entonces $\mathcal{F}[Z_h f](\lambda) = \mathcal{F}[f](\lambda)e^{2\pi i h \lambda}$.
4. *Modulación.* Sea $g(x) = f(x)e^{-2\pi i h x}$, entonces $\mathcal{F}[g] = Z_h \mathcal{F}[f]$.
5. *Dilatación.* Sea $k \neq 0$ y $g(x) = f(kx)$, entonces $\mathcal{F}[g](\lambda) = \frac{1}{|k|} \mathcal{F}[f](\frac{\lambda}{k})$.

Por otra parte, podemos caracterizar el espacio de llegada de \mathcal{F} así como la naturaleza del propio operador.

Proposición 2.3.4. Sea $f \in L^1(\mathbb{R})$, se tiene que $\mathcal{F}[f]$ es una función continua, además $\|\mathcal{F}[f]\|_\infty \leq \|f\|_1$ y $\lim_{\lambda \rightarrow +\infty} \mathcal{F}[f](\lambda) = \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} \mathcal{F}[f](\lambda) = 0$. Por tanto, se deduce que el operador

$$\mathcal{F} : L^1(\mathbb{R}) \rightarrow C_0(\mathbb{R})$$

es lineal y continuo (tomando en el espacio de llegada la norma infinito). Se prueba además la igualdad $\|\mathcal{F}\|_{\mathcal{L}(L^1(\mathbb{R}), C_0(\mathbb{R}))} = 1$.

Además de las propiedades antes descritas para la transformada de Fourier, se tienen también

Propiedades 2.3.5. Sean $f, g \in L^1(\mathbb{R})$, se cumple

$$1. \int_{\mathbb{R}} f(x)\mathcal{F}[g](x) dx = \int_{\mathbb{R}} g(x)\mathcal{F}[f](x) dx.$$

$$2. \text{ Si } f \in C^k(\mathbb{R}) \text{ y } f^{(i)} \in L^1(\mathbb{R}) \quad \forall i = 0, \dots, k \text{ entonces } \mathcal{F}[f^{(k)}] = (2\pi i \lambda)^k \mathcal{F}[f].$$

$$3. \text{ Si } x^i f \in L^1(\mathbb{R}) \quad \forall i = 0, \dots, k \text{ entonces } \mathcal{F}[f] \text{ es derivable } k \text{ veces y se da la igualdad } \mathcal{F}[f]^{(k)} = (-2\pi i)^k \mathcal{F}[x^k f].$$

Observación 2.3.6. El operador $\overline{\mathcal{F}}$ cumple de igual forma propiedades muy similares a las descritas para \mathcal{F} .

Damos un último resultado general para la transformada de Fourier que nos asegura poder recuperar nuestra función original a partir de la transformada siempre y cuando ésta sea integrable.

Teorema 2.3.7. (Teorema de inversión funcional) Sea $f \in L^1(\mathbb{R})$ tal que su transformada de Fourier $\mathcal{F}[f] \in L^1(\mathbb{R})$, entonces

$$\overline{\mathcal{F}}[\mathcal{F}[f]] = f \text{ e.c.t. } x \in \mathbb{R}.$$

En este caso, f es igual en casi todo a una función continua.

Una vez vistas todas las propiedades de la transformada de Fourier, nos vamos a restringir a ver cómo actúa sobre un espacio en concreto, el denominado ‘espacio de Schwartz’ o espacio de funciones de decaimiento rápido. Estudiar la transformada de Fourier sobre este espacio permitirá siguiendo [7] definirla sobre un tipo particular de distribuciones, las distribuciones temperadas.

Definición 2.3.8. Se define el espacio de funciones de decaimiento rápido o espacio de Schwartz como

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \left\{ \varphi : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}, \varphi \in C^\infty(\mathbb{R}) : \sup_{x \in \mathbb{R}} |x|^l |\varphi^{(m)}(x)| < \infty, \quad \forall l, m \in \mathbb{N} \right\}$$

A este espacio se le dota de la siguiente noción de convergencia: una sucesión $\varphi_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ se dice que converge a 0 en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ si $\forall l, m \in \mathbb{N}$ la sucesión $x^l \varphi_n^{(m)}(x) \in \mathbb{C}$ converge uniformemente a 0.

Observación 2.3.9. Notar que el espacio $\mathcal{D}(\mathbb{R}) \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$, ya que al ser las funciones en este espacio de soporte compacto cumplen trivialmente la condición de decrecimiento rápido impuesta.

Propiedades 2.3.10. Sea $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, se cumple

1. $\varphi^{(m)} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}) \quad \forall m \in \mathbb{N}$.
2. Si $P=P(x)$ es un polinomio, $P\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$.
3. $\mathcal{S}(\mathbb{R}) \subset L^p(\mathbb{R}) \quad \forall p \geq 1$.

Conociendo estas propiedades y las correspondientes a la transformada de Fourier antes vistas, se demuestran los dos resultados siguientes:

Teorema 2.3.11. Si $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, se cumple que su transformada de Fourier $\mathcal{F}[\varphi] \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ y si $\varphi_n \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$ es una sucesión convergiendo a 0 en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$, entonces $\mathcal{F}[\varphi_n]$ converge a 0 en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$.

Teorema 2.3.12. (Igualdad de Plancherel) Si $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R})$, entonces $\|\varphi\|_2 = \|\mathcal{F}[\varphi]\|_2$. Como consecuencia

$$\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R})$$

es una isometría biyectiva con la norma de $L^2(\mathbb{R})$.

El hecho de que el espacio $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ sea denso en $L^2(\mathbb{R})$ permite extender de manera única la transformada de Fourier al mismo, a esta extensión se la denomina transformada de Plancherel. Además la igualdad de Plancherel se mantiene y se sigue entonces el siguiente teorema.

Teorema 2.3.13. Existe una única aplicación $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ llamada transformada de Plancherel, que extiende a la transformada de Fourier al espacio $L^2(\mathbb{R})$ y que también verifica $\|f\|_2 = \|\mathcal{F}[f]\|_2$.

Cerramos esta sección definiendo tanto las distribuciones temperadas como la extensión de la transformada de Fourier a este nuevo espacio.

Definición 2.3.14. Una distribución $U \in \mathcal{D}'(\mathbb{R})$ se dice temperada si puede extenderse a una aplicación $U : \mathcal{S}(\mathbb{R}) \rightarrow \mathbb{C}$ lineal y continua. Denotamos al espacio de las distribuciones temperadas como $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$.

Definición 2.3.15. Sea $U \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ una distribución temperada, entonces existen $\mathcal{F}[U], \bar{\mathcal{F}}[U] \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$ y vienen definidas por

$$\langle \varphi, \mathcal{F}[U] \rangle_{\mathcal{S}(\mathbb{R}), \mathcal{S}'(\mathbb{R})} = \langle \mathcal{F}[\varphi], U \rangle_{\mathcal{S}(\mathbb{R}), \mathcal{S}'(\mathbb{R})}, \quad \forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

$$\langle \varphi, \bar{\mathcal{F}}[U] \rangle_{\mathcal{S}(\mathbb{R}), \mathcal{S}'(\mathbb{R})} = \langle \bar{\mathcal{F}}[\varphi], U \rangle_{\mathcal{S}(\mathbb{R}), \mathcal{S}'(\mathbb{R})}, \quad \forall \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}).$$

Se pueden extender algunos de los resultados antes comentados para la transformada de Fourier de funciones a distribuciones, no obstante haremos hincapié únicamente en el *Teorema de inversión*, presentando un teorema análogo para el caso de distribuciones temperadas.

Teorema 2.3.16. (*Teorema de inversión*) Los operadores \mathcal{F} y $\bar{\mathcal{F}}$ cumplen:

$$\mathcal{F}[\bar{\mathcal{F}}[U]] = \bar{\mathcal{F}}[\mathcal{F}[U]] = U \quad \forall U \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}).$$

Luego, si $\mathcal{F}[U] = V$, entonces $\bar{\mathcal{F}}[V] = U$.

Corolario 2.3.17. Si $U \in \mathcal{S}'(\mathbb{R})$, $\mathcal{F}[U] = 0 \iff U = 0$.

Observación 2.3.18. A partir de la transformada de Fourier para distribuciones se puede caracterizar el espacio de Sobolev $H^1(\mathbb{R})$:

$$H^1(\mathbb{R}) = \left\{ f \in L^2(\mathbb{R}) : \int_{\mathbb{R}} (|x|^2 + 1) |\mathcal{F}[f]|^2 dx < \infty \right\},$$

donde se ha hecho uso de la isometría dada por $\mathcal{F} : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$.

2.4. Operadores lineales entre espacios normados

A lo largo tanto de ésta como de la siguiente sección presentamos resultados referentes a operadores lineales en espacios normados, ahondando en el estudio de los operadores autoadjuntos.

Sean X, Y espacios normados, el espacio de operador lineales y continuos de X en Y , $\mathcal{L}(X, Y)$, es el definido en el Ejemplo 2.1.3. Cabe destacar el caso $Y = \mathbb{C}$.

Definición 2.4.1. Sea X espacio normado, entonces el espacio $\mathcal{L}(X, \mathbb{C})$ se denomina espacio dual de X y se denota usualmente por X' . Para $x' \in X'$ y $x \in X$, usaremos la notación $\langle x, x' \rangle_{X, X'}$ para referirnos a $x'(x)$. Cuando se sobreentienda quienes son los espacios X, X' , usaremos simplemente $\langle x, x' \rangle$.

Muchos de los operadores lineales que se encuentran en la práctica no son continuos, por lo cual deberemos de hablar de operadores no acotados, los cuales usualmente estarán definidos en un cierto subespacio $D(A)$ de X , el *Dominio del operador*. El conjunto imagen se suele llamar *Rango del operador* y se denota por $Rg(A)$. Aunque como hemos dicho es usual encontrar operadores que no son continuos, lo que sí suele ocurrir es que X sea un espacio de Banach, el dominio del operador A sea denso en X y su grafo definido por

$$G(A) = \{(x, Ax) \in D(A) \times Rg(A)\} \subset X \times Y$$

sea cerrado en $X \times Y$. Esta última condición es equivalente a que el operador A sea cerrado, es decir que para cualquier sucesión $\{u_n\} \subset D(A)$ con $u_n \rightarrow u \in X$ y tal que $\{Au_n\}$ es de Cauchy, entonces $u \in D(A)$ y además $Au_n \rightarrow Au$.

Observación 2.4.2. Si X, Y son espacios de Banach y $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ es cerrado, podemos dotar a $D(A)$ de la norma

$$\|x\|_{D(A)} = \|x\|_X + \|Ax\|_Y.$$

Con ella, $D(A)$ se convierte en un espacio de Banach y A resulta ser un operador lineal continuo de $D(A)$ en Y .

Proposición 2.4.3. Si X, Y son espacios normados y $D \subset X$ es denso, entonces para todo $A : D \subset X \rightarrow Y$ lineal y continuo existe un único operador $\hat{A} : X \rightarrow Y$ lineal y continuo tal que

$$\hat{A}x = Ax, \quad \forall x \in D(A),$$

además se tiene

$$\|\hat{A}\|_{\mathcal{L}(X, Y)} = \|A\|_{\mathcal{L}(D(A), Y)}.$$

Usualmente identificaremos A con \hat{A} y por tanto notaremos a ambos de la misma forma.

Por otra parte, recordamos también dos teoremas de especial importancia a la hora de tratar con operadores lineales entre espacios de Banach.

Teorema 2.4.4. *(De la aplicación abierta) Sean X, Y espacios de Banach, $A : X \rightarrow Y$ lineal, continuo y sobreyectivo, entonces A es abierto. Si en particular A es inyectivo, tenemos que A^{-1} es continuo.*

Teorema 2.4.5. *(Del grafo cerrado) Sean X, Y espacios de Banach, $A : X \rightarrow Y$ lineal tal que $G(A)$ es cerrado (es decir, A es cerrado), entonces A es continuo.*

Asociada a la definición de espacio dual, tenemos la definición de operador dual.

Definición 2.4.6. Dado $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ lineal con dominio denso, se define el operador dual (o conjugado) A' como el operador de dominio

$$D(A') = \{y' \in Y' : \exists C_{y'} \geq 0, |\langle Ax, y' \rangle| \leq C_{y'} \|x\|_X, \forall x \in D(A)\} \subset Y'$$

y con valores en X' definido por

$$\langle x, A'y' \rangle_{X, X'} = \langle Ax, y' \rangle_{Y, Y'}, \quad \forall y' \in D(A'), \forall x \in D(A).$$

Observar que la definición anterior de $A'y'$ proporciona efectivamente un elemento de X' gracias a la Proposición 2.4.3. Se prueban las siguientes propiedades del operador dual A' .

Proposición 2.4.7. *En las condiciones de la Definición 2.4.6, el operador A' es cerrado. Si A es continuo entonces A' está definido en todo Y' , es continuo y $\|A'\|_{\mathcal{L}(Y', X')} = \|A\|_{\mathcal{L}(X, Y)}$.*

En este trabajo estamos interesados en el caso de espacios de Hilbert. Dos resultados especialmente importantes en estos espacios son el teorema de la proyección y el teorema de Riesz, que pasamos a recordar junto con algunas definiciones y resultados relacionados.

Teorema 2.4.8. *(De la proyección) Sea H un espacio de Hilbert y $K \subset H$ un conjunto convexo y cerrado, entonces para todo $x_0 \in H$ existe un único $k_0 \in K$ tal que*

$$\|x_0 - k_0\| \leq \|x_0 - k\|, \quad \forall k \in K.$$

Además, k_0 está caracterizado por

$$k_0 \in K, \quad (x_0 - k_0 | k - k_0) \leq 0, \quad \forall k \in K.$$

Un caso especialmente interesante es cuando K es un espacio vectorial. Antes de ahondar en este caso recordamos la definición del ortogonal de un conjunto.

Definición 2.4.9. Sea H un espacio de Hilbert y E un subconjunto de H . Se define el ortogonal de E , E^\perp por

$$E^\perp = \{x \in H : (x|y) = 0, \quad \forall y \in E\}.$$

Proposición 2.4.10. Para todo $E \subset H$, el conjunto E^\perp es un subespacio cerrado de H . Además E es denso en H si y solo si $E^\perp = \{0\}$.

Proposición 2.4.11. Sea M un subespacio vectorial cerrado de un espacio de Hilbert H . Entonces la aplicación $P_M : H \rightarrow M$ definida por

$$P_M x \in M, \quad \|x - P_M x\| = \min_{y \in M} \|x - y\|,$$

es una aplicación lineal y continua con norma uno (salvo si $M = \{0\}$) y se verifica

$$x = P_M x + P_{M^\perp} x, \quad \|x\|^2 = \|P_M x\|^2 + \|P_{M^\perp} x\|^2, \quad \forall x \in H,$$

$$(P_M x | y) = (x | P_M y), \quad \forall x, y \in H, \quad P_M^2 = P_M.$$

Se dice que P_M es el operador de proyección sobre M .

Teorema 2.4.12. (Teorema de Riesz) Sea H un espacio de Hilbert, entonces para todo $x \in H$, la aplicación $R : H \rightarrow H'$ definida por

$$\langle y, R(x) \rangle = (y|x), \quad \forall x, y \in H$$

es biyectiva, continua con inversa continua y conjugada lineal en el sentido

$$R(x + y) = R(x) + R(y), \quad \forall x, y \in H, \quad R(\alpha x) = \bar{\alpha} R(x), \quad \forall \alpha \in \mathbb{C}, \quad \forall x \in H.$$

Además R preserva las normas, i.e.

$$\|R(x)\|_{H'} = \|x\|_H, \quad \forall x \in H.$$

Definición 2.4.13. Dado H un espacio de Hilbert, un operador $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ se dice monótono o no-negativo si

$$\operatorname{Re}(Au|u) \geq 0, \quad \forall u \in H.$$

El operador se dice maximal monótono si es monótono y, denotando por $I = I_H$ a la identidad sobre H , $I + A$ es sobreyectivo.

El operador se dice estrictamente monótono o coercitivo si existe una constante $\alpha > 0$ tal que

$$\operatorname{Re}(Au|u) \geq \alpha\|u\|^2, \quad \forall u \in D(A). \quad (2.4.1)$$

Como ejemplo, presentar el teorema de Lax-Milgram que nos dice que los operadores lineales, continuos y monótonos son maximales monótonos.

Teorema 2.4.14. (*Lax-Milgram*) Sea H un espacio de Hilbert y $A : H \rightarrow H$ lineal, continuo y coercitivo, entonces A es biyectivo.

Demostración. Veamos primero que A es inyectivo. Para ello sea $u \in H$ con $Au = 0$, en tal caso por ser A coercitivo: $\operatorname{Re}(Au|u) = 0 \geq \alpha\|u\|^2 \Rightarrow u = 0$. Para la sobreyectividad, haremos uso del teorema de punto fijo de Banach. Sea $v \in H$ y $\rho > 0$, entonces

$$\exists u \in H : Au = v \iff \exists u \in H : u - \rho(Au - v) = u$$

Definimos el operador $T_v : H \rightarrow H$ como aquel cumpliendo $T_v u = u - \rho(Au - v)$, basta ver existe ρ tal que T_v es contractivo. Sean $u_1, u_2 \in H$, como A es coercitivo

$$\|T_v u_1 - T_v u_2\|^2 \leq (1 + \rho^2 \|A\|_{\mathcal{L}(H)}^2 - 2\rho\alpha) \|u_1 - u_2\|^2.$$

Tomamos ρ de forma que se alcance el mínimo en la expresión anterior, se tiene que

$$\alpha\|u\|^2 \leq \operatorname{Re}(Au|u) \leq |(Au|u)| \leq \|A\|_{\mathcal{L}(H)} \|u\|^2 \quad \forall u \in H \Rightarrow \alpha \leq \|A\|_{\mathcal{L}(H)}.$$

Deducimos que $\|A\|_{\mathcal{L}(H)} \neq 0$ y sin más que derivar con respecto a ρ la expresión que queremos minimizar, se obtiene

$$\rho = \frac{\alpha}{\|A\|_{\mathcal{L}(H)}^2},$$

en cuyo caso

$$\|T_v u_1 - T_v u_2\|^2 \leq \left(1 - \frac{\alpha^2}{\|A\|_{\mathcal{L}(H)}^2}\right) \|u_1 - u_2\|^2.$$

Esto prueba que T_v es contractivo y por tanto A es sobreyectivo. \square

Observación 2.4.15. A veces es interesante aplicar el teorema de Lax-Milgram no a un operador de H en H sino a un operador de H en H' , donde ahora la coercitividad se escribe como

$$\langle u, Au \rangle \geq \alpha \|u\|^2, \quad \forall u \in H.$$

El resultado se prueba a partir del anterior sin más que usar el teorema de Riesz. El interés es que a veces no interesa hacer la identificación de H con H' .

Al definir el concepto de operador maximal monótono sólo hemos pedido a $I + A$ que sea sobreyectivo. En realidad se cumple la siguiente caracterización.

Proposición 2.4.16. Si $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ es maximal monótono entonces A tiene dominio denso, es cerrado y cumple que para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ con parte real positiva $A + \lambda I$ es biyectivo de $D(A)$ en H , $(A + \lambda I)^{-1}$ es monótono, continuo y

$$\|(A + \lambda I)^{-1}\|_{\mathcal{L}(H)} \leq \frac{1}{\operatorname{Re}(\lambda)}.$$

Demostración. Comenzamos viendo que el dominio del operador es denso, para ello basta comprobar que si $x \in H$ con $(x|y) = 0$ para todo $y \in D(A)$ entonces $x = 0$. Como $I + A$ es sobreyectivo existe $z \in D(A)$ tal que $z + Az = x$. Entonces, se tiene

$$0 = (x|z) = \|z\|^2 + (Az|z) \Rightarrow \|z\|^2 \leq 0,$$

de donde se deduce que $z = 0$ y por tanto $x = 0$. Observamos ahora que por ser A monótono, entonces para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ con parte real positiva, se tiene que $(A + \lambda I)x = y$ implica

$$\operatorname{Re}(y|x) = \operatorname{Re}((A + \lambda I)x|x) \geq \operatorname{Re}(\lambda) \|x\|^2,$$

de forma que

$$\|x\| \leq \frac{\|y\|}{\operatorname{Re}(\lambda)}.$$

Esto demuestra que $A + \lambda I$ es inyectivo ya que tiene núcleo nulo. Además $(A + \lambda I)^{-1}$ es continuo en $Rg(A + \lambda I)$ y en caso de ser $A + \lambda I$ sobreyectivo:

$$\|(A + \lambda I)^{-1}\|_{\mathcal{L}(H)} \leq \frac{1}{Re(\lambda)}.$$

También es claro que $(A + \lambda I)^{-1}$ es monótono en $Rg(A + \lambda I)$ ya que tomando x, y como antes, tenemos

$$Re((A + \lambda I)^{-1}y|y) = Re(x|(A + \lambda I)x) \geq Re(\lambda)\|x\|^2 \geq 0.$$

Veamos que A es cerrado. Tomamos $\{x_n\} \subset D(A)$ tales que existen $(x, y) \in H \times H$ con $\{x_n\}$ convergiendo a x y $\{Ax_n\}$ convergiendo a y . Entonces teniendo en cuenta que por lo probado anteriormente $I + A$ es biyectivo con $(I + A)^{-1}$ continuo sobre H

$$x_n = (I + A)^{-1}(I + A)x_n \rightarrow (I + A)^{-1}(x + y).$$

Deducimos que x pertenece a $D(A)$ y $x = (I + A)^{-1}(x + y)$ de forma que $y = Ax$, lo que prueba que A es cerrado.

Para terminar vamos a ver que si $A + \lambda_0 I$ es biyectivo para algún $\lambda_0 \in \mathbb{C}$ con parte real positiva entonces $A + \lambda I$ es sobreyectivo para todo $\lambda \in \mathbb{C}$ con $Re(\lambda)$ en un entorno adecuado de $Re(\lambda_0)$.

Sea entonces $y \in H$, queremos resolver el sistema

$$(A + \lambda I)x = y \iff x = (A + \lambda_0 I)^{-1}y - (\lambda - \lambda_0)(A + \lambda_0 I)^{-1}x$$

Por el teorema del punto fijo de Banach y $\|(A + \lambda_0 I)^{-1}\|_{\mathcal{L}(H)} \leq 1/Re(\lambda_0)$, para que esta ecuación tenga solución basta entonces que se cumpla

$$|\lambda - \lambda_0| < Re(\lambda_0),$$

Esto permite ir recubriendo de forma recursiva todo el semiplano abierto derecho de \mathbb{C} , lo que prueba el resultado. □

Observación 2.4.17. Hemos visto que si A es monótono, entonces para todo λ con parte real no negativa, $A + \lambda I$ es invertible sobre su rango con inversa continua. En particular esto significa que $Rg(A + \lambda I)$ es cerrado.

Teniendo en cuenta el resultado anterior, presentamos por último un teorema que nos da la existencia de la raíz cuadrada de un operador maximal monótono. Omitiremos la demostración del mismo por su complejidad y extensión, remitimos a [2] Capítulo V, Teorema 3.35 para los detalles.

Teorema 2.4.18. Sean H Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ maximal monótono, entonces existe un único operador $A^{\frac{1}{2}} : D(A^{\frac{1}{2}}) \rightarrow H$ tal que

- $D(A)$ es denso en $D(A^{\frac{1}{2}})$. Más aún, para cada $u \in D(A^{\frac{1}{2}})$ existe $u_n \in D(A)$ que converge a u en H y tal que $A^{\frac{1}{2}}u_n$ converge a $A^{\frac{1}{2}}u$ en H .
- $A^{\frac{1}{2}}$ es maximal monótono.
- $A^{\frac{1}{2}}A^{\frac{1}{2}}x = Ax, \forall x \in D(A)$.

2.5. Operadores autoadjuntos y teorema de descomposición polar

Ligado a la definición de operador dual pero centrándonos en el caso de espacios de Hilbert, recordamos ahora la de operador adjunto.

Definición 2.5.1. Sean H_1, H_2 dos espacios de Hilbert y $A : D(A) \subset H_1 \rightarrow H_2$ un operador lineal con dominio denso. Tomando R_1, R_2 como los operadores de Riesz correspondientes, se define el operador adjunto $A^* : D(A^*) \subset H_2 \rightarrow H_1$ de A por

$$D(A^*) = R_2^{-1}D(A'), \quad A^* = R_1^{-1}A'R_2,$$

i.e.

$$D(A^*) = \{y \in H_2 : \exists C_y \geq 0, |(Ax|y)_{H_2}| \leq C_y \|x\|_{H_1}, \forall x \in D(A)\},$$

$$(x|A^*y)_{H_1} = (Ax|y)_{H_2}, \quad \forall y \in D(A^*), \forall x \in D(A).$$

Observación 2.5.2. En las condiciones de la definición anterior, el operador $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ admite una extensión cerrada si y sólo si $A^{**} = (A^*)^*$ existe. Es más, si A es cerrado entonces A^{**} existe y $A = A^{**}$.

Definición 2.5.3. Sea H un espacio de Hilbert, un operador $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ con dominio denso se dice simétrico si verifica

$$(x|Ay) = (Ax|y), \quad \forall x, y \in D(A).$$

Observación 2.5.4. La definición anterior implica que $D(A)$ está contenido en $D(A^*)$ y $A^* = A$ en $D(A)$. Se tiene por tanto que A^* es una extensión de A . Se puede probar además que si A es simétrico entonces A^{**} existe y es simétrico, de forma que todo operador simétrico posee una extensión simétrica cerrada dada por $A^{**} = (A^*)^*$.

Definición 2.5.5. Sea H un espacio de Hilbert, un operador $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ se dice autoadjunto si $A = A^*$.

Algunas propiedades importantes de los operadores autoadjuntos son las que presentamos en los siguientes resultados. El primero de ellos es inmediato.

Proposición 2.5.6. *Todo operador autoadjunto es cerrado. Si A es continuo, entonces A es simétrico si y solo si es autoadjunto.*

Como aplicación del resultado anterior tenemos que los operadores de proyección son autoadjuntos.

Teorema 2.5.7. *Si un operador autoadjunto A es inyectivo, entonces A tiene rango denso y el operador inverso $A^{-1} : Rg(A) \subset H \rightarrow H$ es autoadjunto.*

Demostración. Sea $y \in Rg(A)^\perp$, entonces

$$(Ax|y) = 0, \quad \forall x \in D(A),$$

lo que significa que y pertenece a $D(A^*)$ y $A^*y = 0$. Como A es autoadjunto tenemos entonces $Ay = 0$ que junto a A inyectivo implica $y = 0$. Por tanto $Rg(A)$ es denso.

Veamos ahora que A^{-1} es autoadjunto. Introducimos el siguiente subespacio de $H \times H$:

$$VG(A) = \{(-Ax, x) : x \in D(A)\} \Rightarrow (VG(A))^\perp = G(A^*).$$

Por tanto, que un operador sea autoadjunto es equivalente a que $(VG(A))^\perp = G(A)$. Además se cumple $G(A^{-1}) = VG(-A)$, y como A es autoadjunto se tiene que $(VG(-A))^\perp = G(-A)$. Finalmente se deduce (sabiendo que $VG(-A)$ es cerrado por serlo A)

$$(VG(A^{-1}))^\perp = G(-A)^\perp = (VG(-A))^{\perp\perp} = VG(-A) = G(A^{-1}) \iff A^{-1} = (A^{-1})^*. \quad \square$$

Corolario 2.5.8. *Un operador A simétrico tal que $D(A) = H$ ó $Rg(A) = H$ es autoadjunto.*

Proposición 2.5.9. *Si A es autoadjunto y monótono, entonces A es maximal monótono y $A^{\frac{1}{2}}$ es autoadjunto.*

Demostración. Si A es monótono, sabemos que para todo λ con parte real positiva, el rango de $A + \lambda I$ es cerrado, como $A + \lambda I$ tiene además dominio denso y es cerrado, se sabe que $A + \lambda I$ es sobreyectivo si y sólo si $Ker(A^* + \lambda^* I)$ se reduce al espacio nulo, pero esto es inmediato de $A^* = A$ y A monótono.

El hecho de que $A^{\frac{1}{2}}$ es autoadjunto sigue del Teorema 2.4.18 . □

Un ejemplo importante de operador autoadjunto no negativo está dado por el siguiente resultado

Teorema 2.5.10. *(Von Neumann) Sean H_1, H_2 espacios de Hilbert, $A : D(A) \subset H_1 \rightarrow H_2$ un operador lineal cerrado con dominio denso, entonces los operadores A^*A, AA^* son autoadjuntos y maximales monótonos.*

Demostración. Como $(A^*Ax|x) = \|Ax\|^2 = (AA^*x|x)$ tenemos que AA^* y A^*A son monótonos, además claramente son simétricos, luego $I + AA^*$ y $I + A^*A$ son también simétricos. Basta probar para concluir que estos últimos son sobreyectivos, ya que por el Corolario 2.5.8 se deduce que son autoadjuntos y por tanto lo son AA^* y A^*A . De hecho, usando $AA^* = (A^*)^*A^*$ basta probar el resultado para el caso de A^*A . Consideramos el espacio producto $H_1 \times H_2$ y los espacios $G(A)$ y

$$VG(A^*) := \{(-A^*u, u) : u \in D(A^*)\}.$$

Ambos espacios son cerrados y cada uno es el ortogonal del otro. Por tanto, para cualquier $w \in H_1$ tenemos una descomposición única

$$(w, 0) = (u, Au) + (-A^*v, v), \quad u \in D(A), \quad v \in D(A^*),$$

lo que implica

$$w = u - A^*v, \quad 0 = Au + v$$

y por tanto

$$w = u + A^*Au.$$

□

Otros operadores importantes en espacios de Hilbert son los operadores isométricos.

Definición 2.5.11. Sean H_1, H_2 espacios de Hilbert. Un operador lineal continuo $U : H_1 \rightarrow H_2$ se dice isométrico si

$$(Ux|Uy) = (x|y) \quad \forall x, y \in H_1. \quad (2.5.1)$$

El operador se dice parcialmente isométrico si existe $M_1 \subset H_1$ cerrado tal que

$$(Ux|Uy) = (x|y) \quad \forall x, y \in M_1, \quad Ux = 0 \quad \forall x \in M_1^\perp. \quad (2.5.2)$$

El conjunto M_1 se llama conjunto inicial y UM_1 conjunto final.

Si U es isométrico y $Rg(U) = H_2$, entonces se dice que U es unitario.

Como ejemplo de operadores parcialmente isométricos tenemos los operadores de proyección. Se tienen las siguientes caracterizaciones.

Proposición 2.5.12. La condición (2.5.1) es equivalente a

$$\|Ux\| = \|x\|, \quad \forall x \in H.$$

Un operador lineal continuo en H es unitario si y solo si $U^* = U^{-1}$.

Se tiene el siguiente resultado de descomposición para un operador cerrado en un espacio de Hilbert.

Teorema 2.5.13. Sean H_1, H_2 dos espacios de Hilbert y $A : D(A) \subset H_1 \rightarrow H_2$ un operador cerrado con dominio denso, entonces existen dos únicos operadores $G : D(A) \subset H_1 \rightarrow H_1$ autoadjunto,

monótono y $U : H_1 \rightarrow H_2$ parcialmente isométrico con conjunto inicial $\overline{Rg(G)}$ y conjunto final $\overline{Rg(A)}$ tales que

$$A = UG. \quad (2.5.3)$$

Se dice que ésta es la descomposición polar de A .

Demostración. Consideremos la forma sesquilinear $\mathfrak{h}[u, v] = (Au|Av)$, se tiene (ver [2] Capítulo VI) que \mathfrak{h} es cerrada y no negativa, además su operador autoadjunto asociado es $A_{\mathfrak{h}} = H = A^*A$, el cual sabemos que es maximal monótono. Considerando $G = H^{\frac{1}{2}} : D(A) \subset H_1 \rightarrow H_1$ y aplicando el segundo teorema de representación (ver [2] Capítulo VI, Teorema 2.23) :

$$(Au|Av) = (Gu|Gv), \quad \|Au\| = \|Gu\|, \quad \forall u, v \in D(A) = D(G).$$

Esto permite definir un operador parcialmente isométrico $U : H_1 \rightarrow H_2$ con conjunto inicial $\overline{Rg(G)}$ y conjunto final $\overline{Rg(A)}$. Por tanto, se obtiene la siguiente descomposición:

$$A = UG, \quad D(A) = D(G).$$

Donde G cumple que es autoadjunto y maximal monótono por serlo A .

Veamos ahora que esta descomposición es única, para ello fijémonos en que $A^* = GU^*$ cumple $A^*A = GU^*UG = G^2$ ya que $U^*Ux = x$ para x en el conjunto inicial de U . Se deduce entonces que G es una raíz cuadrada autoadjunta y monótona de A^*A , lo que asegura su unicidad en virtud del Teorema 2.4.18. Finalmente, U queda determinado sobre $Rg(G)$ sin más que observar que $A = UG$ y por hipótesis $U \equiv 0$ sobre $Rg(G)^{\perp}$. \square

Observación 2.5.14. El resultado anterior es el equivalente para operadores lineales del hecho de que un número complejo λ se escribe en la forma $\lambda = e^{i\theta}r$, donde $r \geq 0$ y $e^{i\theta}$ tiene módulo uno. Por analogía, se suele llamar en la descomposición anterior a G el valor absoluto de A y se nota $|A|$.

De forma similar se define $|A^*|$, el cual está relacionado con $|A|$ a partir de

$$|A^*| = U|A|U^*.$$

Para probarlo, se comprueba que $G' = U|A|U^*$ es la raíz cuadrada de AA^* . Basándose en esta relación es fácil deducir que $Ker(A) = Ker(|A|)$ y $Rg(A) = Rg(|A^*|)$.

Es especialmente interesante aplicar el resultado anterior a un operador autoadjunto A sobre el espacio de Hilbert H . Tenemos $A = U|A|$ donde $|A|$ es el correspondiente operador autoadjunto monótono. Usando $A = A^*$ la unicidad de descomposición nos lleva a $U = U^*$. Por otro lado $UA = U^*A = |A| = |A^*| = AU^* = AU$. Razonando análogamente se prueba también $|A|U = U|A|$. Además $\overline{Rg(|A|)} = \overline{Rg(A)}$, que llamamos R . Se cumple, $U^2u = U^*Uu = u$ para $u \in R$, y $Uu = 0$ para $u \in R^\perp$. De hecho, todo $u \in R$ se descompone de forma única como $u = u_+ + u_-$ con

$$u_+ = \frac{1}{2}(I + U)u, \quad u_- = \frac{1}{2}(I - U)u, \quad Uu = u_+ - u_-.$$

Si se denota $M_0 = R^\perp$, M_+ el conjunto de vectores tales que $Uu = u$ y M_- el de vectores tales que $Uu = -u$, entonces se tiene que son espacios cerrados que descomponen H en suma de espacios ortogonales entre sí

$$H = M_0 + M_+ + M_-,$$

y dado $u \in D(A)$, se cumple

$$Au = 0, \quad \forall u \in M_0, \quad Au = |A|u, \quad \forall u \in M_+, \quad Au = -|A|u, \quad \forall u \in M_-.$$

Esto descompone A en su parte nula, su parte positiva y su parte negativa. Se prueba además que los operadores de proyección sobre M_0 , M_+ y M_- están dados por

$$P_0 = I - U^2, \quad P_+ = \frac{1}{2}(U^2 + U), \quad P_- = \frac{1}{2}(U^2 - U).$$

Capítulo 3

Teoría espectral para operadores autoadjuntos

3.1. Introducción a la teoría espectral

Definición 3.1.1. Sea X un espacio normado, $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ un operador lineal. Se dice que $\lambda \in \mathbb{C}$ está en la resolvente de A (o también que es un valor regular de A) si $A - \lambda I$ es inyectivo, tiene rango denso en X y la aplicación (resolvente) $(A - \lambda I)^{-1} : Rg(A - \lambda I) \subset X \rightarrow X$ es continua. Al complementario de la resolvente de A se le denomina espectro de A y se denota $\sigma(A)$. Sus elementos se llaman valores espectrales de A .

Observación 3.1.2. Si λ pertenece a la resolvente de A , como $(A - \lambda I)^{-1}$ es una aplicación lineal continua definida en un subespacio denso de X , entonces admite una prolongación única de $(A - \lambda I)^{-1}$ a todo el espacio X . De esta forma podemos entonces suponer que $(A - \lambda I)^{-1}$ está definida en todo X .

Definición 3.1.3. El espectro de A se descompone en:

- $P_\sigma(A)$ es el espectro puntual (o conjunto de autovalores) de A y está formado por el conjunto de $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $A - \lambda I$ no es inyectivo. El espacio $Ker(A - \lambda I)$ es el espacio de autovectores asociados y su dimensión se conoce como multiplicidad (geométrica) del autovalor.
- $C_\sigma(A)$ es el espectro continuo y se define como el conjunto de $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $A - \lambda I$ es inyectivo y tiene rango denso pero la inversa de $A - \lambda I$ no es continua.
- $R_\sigma(A)$ es el espectro residual y está formado por los $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $A - \lambda I$ es inyectivo pero no tiene rango denso.

Se tiene que $\sigma(A) = P_\sigma(A) \cup C_\sigma(A) \cup R_\sigma(A)$ donde estos tres conjuntos son disjuntos dos a dos.

A continuación presentamos una serie de resultados que nos permiten caracterizar el conjunto de valores regulares y la resolvente para el caso de un operador cerrado así como de un operador continuo. Las demostraciones de los mismos se pueden consultar en [8] Capítulo VIII.2.

Teorema 3.1.4. Sean X Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ un operador lineal y cerrado, entonces la resolvente de A es un subconjunto abierto del plano complejo \mathbb{C} . Además, en cada componente conexa del mismo la función $(A - \lambda I)^{-1}$ es una función holomorfa de λ .

Teorema 3.1.5. Sean X Banach, $A \in \mathcal{L}(X)$, entonces el siguiente límite existe:

$$\rho(A) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|A^n\|^{\frac{1}{n}}.$$

Este límite lo denominamos radio espectral de A y satisface la siguiente desigualdad:

$$\rho(A) \leq \|A\|.$$

Si $|\lambda| > \rho(A)$, la resolvente existe y viene dada por la siguiente serie:

$$(A - \lambda I)^{-1} = - \sum_{n=1}^{\infty} \lambda^{-n} A^{n-1}.$$

La cual converge en la norma de $\mathcal{L}(X)$.

Corolario 3.1.6. Si $A \in \mathcal{L}(X)$, la resolvente de A es no vacía.

Teorema 3.1.7. En las condiciones del teorema anterior

$$\rho(A) = \sup_{\lambda \in \sigma(A)} |\lambda|.$$

Corolario 3.1.8. La serie $\sum_{n=1}^{\infty} \lambda^{-n} A^{n-1}$ diverge para valores $|\lambda| < \rho(A)$.

Observación 3.1.9. A partir de los teoremas anteriores, se deduce que en el caso en el que $A \in \mathcal{L}(X)$ con X Banach $\sigma(A) \subset \overline{B}(0, \|A\|)$, con $\overline{B}(0, \|A\|)$ la bola euclídea cerrada de centro 0 y radio $\|A\|$.

Por otra parte, recordamos la relación entre el espectro de un operador continuo y su inverso.

Teorema 3.1.10. Sea X Banach, si $A \in \mathcal{L}(X)$ es invertible, entonces $\sigma(A^{-1}) = \{\lambda^{-1} : \lambda \in \sigma(A)\}$.

Además como aplicación del Teorema del punto fijo de Banach, se tiene

Teorema 3.1.11. Sean X, Y Banach, $A \in \mathcal{L}(X, Y)$ invertible, entonces $A + B$ es invertible para todo $B \in \mathcal{L}(X, Y)$ con $\|B\| < \|A\|$.

Un caso especialmente interesante es la resolución espectral de operadores de Fredholm o de semi-Fredholm, que se comportan de forma más cercana al caso finito-dimensional y que como vamos a ver tienen buenas propiedades de estabilidad.

Definición 3.1.12. Sean X, Y Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ un operador lineal. Se definen la nulidad del operador y su deficiencia por

$$\text{Nul}(A) = \dim(\text{Ker}(A)), \quad \text{Def}(A) = \dim(Y/\text{Rg}(A)).$$

Cuando al menos uno de estos valores es finito, se define el índice de A por

$$\text{Ind}(A) = \text{Nul}(A) - \text{Def}(A).$$

El operador A se dice Fredholm si es cerrado, $\text{Rg}(A)$ es cerrado y $\text{Nul}(A)$, $\text{Def}(A)$ son finitos.

El operador A se dice semi-Fredholm si es cerrado, $\text{Rg}(A)$ es cerrado y al menos uno de los valores $\text{Nul}(A)$, $\text{Def}(A)$ es finito.

Con estas definiciones podemos también definir siguiendo [2] el espectro esencial de un operador A por

Definición 3.1.13. Dado X Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ cerrado, se define el espectro esencial de A como el conjunto de valores $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $A - \lambda I$ no es semi-Fredholm.

Vamos a establecer algunos resultados de estabilidad para la nulidad, la deficiencia y el índice de un operador cerrado que nos permitirán estudiar la estructura del espectro de un operador cerrado.

Definición 3.1.14. Dados dos espacios cerrados M, N de un espacio de Banach X , se definen

$$\delta(M, N) = \sup_{\substack{u \in M \\ \|u\| \leq 1}} \inf_{v \in N} \|u - v\|, \quad \hat{\delta}(M, N) = \max \{ \delta(M, N), \delta(N, M) \}.$$

Observación 3.1.15. La aplicación $\hat{\delta}$ es similar a una distancia en los espacios cerrados pero no verifica la desigualdad triangular. Esto se puede solucionar fácilmente definiendo para $M, N \neq 0$

$$d(M, N) = \sup_{\substack{u \in M \\ \|u\| \leq 1}} \inf_{\substack{v \in N \\ \|v\| \leq 1}} \|u - v\|, \quad \hat{d}(M, N) = \max \{d(M, N), d(N, M)\}.$$

En otro caso

$$d(0, N) = 0 \text{ para todo } N, \quad d(M, 0) = 2 \text{ para } M \neq 0.$$

La topología inducida por esta distancia es la misma que la correspondiente a $\hat{\delta}$. Ello se deduce las siguientes desigualdades

$$\delta(M, N) \leq d(M, N) \leq 2\delta(M, N)$$

$$\hat{\delta}(M, N) \leq \hat{d}(M, N) \leq 2\hat{\delta}(M, N).$$

De hecho, por lo anterior $\hat{d}(M_n, M) \rightarrow 0$ es equivalente a $\hat{\delta}(M_n, M) \rightarrow 0$, y podemos definir la convergencia $M_n \rightarrow_{\hat{d}} M$ por $\hat{\delta}(M_n, M) \rightarrow 0$ sin necesidad de hacer referencia a \hat{d} .

Definición 3.1.16. Dados X, Y dos espacios de Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y, B : D(B) \subset X \rightarrow Y$ dos operadores lineales cerrados, se definen

$$\delta(A, B) = \delta(G(A), G(B)), \quad \hat{\delta}(A, B) = \hat{\delta}(G(A), G(B)).$$

Definición 3.1.17. Sean X, Y, Z Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ lineal. Un operador lineal $B : D(B) \subset X \rightarrow Z$ se dice A -acotado si $D(A) \subset D(B)$ y existen $a, b \geq 0$ tales que

$$\|Bu\| \leq a\|u\| + b\|Au\|, \quad \forall u \in D(A).$$

Observación 3.1.18. Si A es la identidad en X , entonces B es A -acotado si y solo si es acotado, i.e. continuo. Además un operador B continuo es A -acotado para todo A con $D(A) \subset D(B)$.

Presentamos a continuación un resultado que nos permite acotar la distancia entre dos operadores en el caso en que uno de ellos sea una perturbación continua del otro, la demostración se puede consultar en [2], Capítulo IV, Teorema 2.14.

Proposición 3.1.19. Sean X, Y espacios de Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ un operador lineal cerrado y $B \in \mathcal{L}(X, Y)$, entonces $A + B$ es cerrado y cumple:

$$\hat{\delta}(A + B, A) \leq \|B\|.$$

Definición 3.1.20. Sean X, Y, Z Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ lineal. Un operador lineal $B : D(B) \subset X \rightarrow Y$ se dice A -compacto si $D(A) \subset D(B)$ y si para toda sucesión $\{u_n\} \subset D(A)$ con $\{u_n\}, \{Au_n\}$ acotadas, se tiene que $\{Bu_n\}$ contiene una subsucesión convergente.

En el caso en que A es la identidad, se dice que el operador B es compacto.

Se tienen los siguientes resultados de estabilidad para el índice de un operador. La demostración de estos resultados es bastante extensa ya que necesita varios resultados previos y por tanto no la exponemos aquí. Para su demostración ver [2] Capítulo IV, Teoremas 5.17 y 5.26.

Teorema 3.1.21. Sean X, Y Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ semi-Fredholm, entonces existe $\delta > 0$ tal que para todo operador cerrado $B : D(B) \subset X \rightarrow Y$ con $\hat{\delta}(A, B) < \delta$ se tiene que B es semi-Fredholm e $\text{Ind}(A) = \text{Ind}(B)$.

Teorema 3.1.22. Sean X, Y Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ semi-Fredholm y $B : D(B) \subset X \rightarrow Y$, A -compacto, entonces $A + B$ es semi-Fredholm e $\text{Ind}(A) = \text{Ind}(A + B)$.

Se tiene también el siguiente resultado de estabilidad para Nul y Def

Teorema 3.1.23. Sean X, Y Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow Y$ semi-Fredholm y $B : D(B) \subset X \rightarrow Y$ A -acotado. Entonces existe $\delta > 0$ tal que si $0 < |x| < \delta$, $A + xB$ es semi-Fredholm y $\text{Nul}(A + xB)$, $\text{Def}(A + xB)$ no dependen de x . Además

$$\text{Nul}(A + xB) \leq \text{Nul}(A), \quad \text{Def}(A + xB) \leq \text{Def}(A), \quad \forall x \text{ con } 0 < |x| < \delta.$$

A partir de los Teoremas 3.1.21 y 3.1.23 es inmediato probar

Teorema 3.1.24. Sea X Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow X$, cerrado y Δ el complementario del espectro esencial, entonces $\text{Ind}(A - \lambda I)$ es constante respecto a λ en cada componente conexa Δ_n de Δ . Además existen $\nu_n, \mu_n \in \{0\} \cup \mathbb{N} \cup \{\infty\}$, al menos uno finito, tales que

$$0 \leq \text{Nul}(A - \lambda I) - \nu_n = \text{Def}(A - \lambda I) - \mu_n < \infty, \quad \forall \lambda \in \Delta_n,$$

y $\{\lambda \in \Delta_n : \text{Nul}(A - \lambda I) \neq \nu_n\}$ está formado por puntos aislados siendo a lo más numerable.

Observación 3.1.25. En particular, si Δ_n es una componente conexa donde $\nu_n = \mu_n = 0$, tenemos que los únicos valores espectrales en Δ_n son una cantidad a lo más numerable de autovalores aislados con multiplicidad algebraica finita.

Como consecuencia del Teorema 3.1.22 se obtiene el siguiente resultado, que usaremos para probar la existencia de autovalores aislados para el operador de Schrödinger.

Teorema 3.1.26. Sean X Banach, $A : D(A) \subset X \rightarrow X$ cerrado, entonces para todo $B : D(B) \subset X \rightarrow X$ A -compacto, se tiene que el espectro esencial de $A + B$ coincide con el de A .

El teorema anterior contiene en particular al teorema de descomposición espectral de Fredholm, imponemos X infinito-dimensional ya que el caso finito-dimensional es bien conocido del curso de álgebra lineal.

Corolario 3.1.27. (Fredholm) Sea X un espacio de Banach de dimensión infinita y A un operador compacto de X en Y , entonces el espectro esencial de A se reduce a $\lambda = 0$. El resto de valores espectrales es un conjunto a lo más numerable, acotado, formado por autovalores de multiplicidad geométrica finita cuyo único punto posible de acumulación es $\lambda = 0$. Además

$$Rg(A - \lambda I) \text{ es cerrado, } \forall \lambda \in \sigma(A) \setminus \{0\}.$$

Demostración. Usando la definición de espectro basta en realidad estudiar el espectro de $I + A$, el cual verifica $\sigma(I + A) = 1 + \sigma(A)$. Observar que por el Teorema 3.1.26, el espectro esencial de $I + A$ coincide con el de I , el cual al ser X un espacio de dimensión infinita está formado únicamente por $\lambda = 1$. En particular el complementario del espectro esencial sólo tiene una componente conexa Δ_1 . Además $\mu_1 = \nu_1 = 0$. El resultado sigue entonces del Teorema 3.1.24 y del hecho de que el espectro de A está contenido en $\overline{B}(0, \|A\|)$. \square

Con vistas a la aplicación a Mecánica Cuántica estamos especialmente interesados en el caso de operadores autoadjuntos en un espacio de Hilbert. Veremos en la sección siguiente como similarmente al caso finito-dimensional existe siempre una resolución espectral, pero en general ésta vendrá dada por una integral y no por una suma ya que el espectro no tiene por qué ser numerable.

Antes recordamos dos resultados simples acerca del espectro de un operador autoadjunto. El primero es útil para localizar el espectro, el segundo se refiere a la no existencia de espectro residual para operadores autoadjuntos.

Proposición 3.1.28. *Sea H un espacio de Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto, entonces $\sigma(A)$ está contenido en \mathbb{R} . Más aún, denotando $\underline{\lambda} \in [-\infty, \infty)$, $\bar{\lambda} \in (-\infty, \infty]$ por*

$$\underline{\lambda} = \inf \{(Au|u) : u \in D(A), \|u\| = 1\}, \quad \bar{\lambda} = \sup \{(Au|u) : u \in D(A), \|u\| = 1\},$$

se tiene

$$\sigma(A) \subset [\underline{\lambda}, \bar{\lambda}].$$

Además, si alguno de los valores $\underline{\lambda}$, $\bar{\lambda}$ es finito entonces pertenece al espectro de A .

Demostración. Sea λ que no pertenece al conjunto $[\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$, entonces existe $\delta > 0$ tal que

$$|(Au|u) - \lambda| > \delta, \quad \forall u \in D(A) \text{ con } \|u\| = 1,$$

lo que implica

$$|((A - \lambda I)u|u)| \geq \delta \|u\|^2, \quad \forall u \in D(A).$$

Esta desigualdad implica que el $Rg(A - \lambda I)$ es cerrado, $A - \lambda I$ es inyectivo y la aplicación $(A - \lambda I)^{-1}$ es continua sobre el rango de $A - \lambda I$. Notando como λ^* al conjugado de λ para evitar confusión y usando que $A - \lambda I$ es un operador cerrado con rango cerrado sabemos que es sobreyectivo si y sólo si $(A - \lambda I)^* = A - \lambda^* I$ es inyectivo, pero esto sigue de que si λ no pertenece a $[\underline{\lambda}, \bar{\lambda}]$ entonces λ^* tampoco pertenece con lo que aplicando lo ya probado a λ^* tenemos la sobreyectividad de $A - \lambda I$. Supongamos ahora que $\underline{\lambda}$ es finito y veamos que pertenece al espectro. Por reducción al absurdo supongamos que no, entonces $A - \underline{\lambda} I$ es biyectivo de $D(A)$ en X y la inversa es continua. Además dado $v \in X$ y tomando $u = (A - \underline{\lambda} I)^{-1}v$, se tiene

$$((A - \underline{\lambda} I)^{-1}v|v) = (u|(A - \underline{\lambda} I)u) \geq 0.$$

Esto permite en particular aplicar la desigualdad de Cauchy-Schwarz a la forma bilineal $a(v, w) =$

$((A - \underline{\lambda}I)^{-1}v|w)$ definida en $H \times H$, para probar que se tiene

$$\begin{aligned} \|(A - \underline{\lambda}I)^{-1}v\| &= \sup_{\|w\|=1} ((A - \underline{\lambda}I)^{-1}v|w) \leq \sup_{\|w\|=1} ((A - \underline{\lambda}I)^{-1}v|v)^{\frac{1}{2}} ((A - \underline{\lambda}I)^{-1}w|w)^{\frac{1}{2}} \\ &\leq ((A - \underline{\lambda}I)^{-1}v|v)^{\frac{1}{2}} \|(A - \underline{\lambda}I)^{-1}\|^{\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

Sea ahora una sucesión u_n con norma uno tal que $(Au_n|u_n)$ converge a $\underline{\lambda}$. Tomando en la desigualdad anterior $v := v_n = (A - \underline{\lambda}I)u_n$, tenemos

$$\|u_n\| \leq ((A - \underline{\lambda}I)u_n|u_n)^{\frac{1}{2}} \|(A - \underline{\lambda}I)^{-1}\|^{\frac{1}{2}} \rightarrow 0,$$

en contradicción con $\|u_n\| = 1$. Esto prueba que $\underline{\lambda}$ es un valor espectral. Análogamente se prueba que $\bar{\lambda}$ es un valor espectral. \square

Proposición 3.1.29. *Si H es Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto, entonces $R_\sigma(A) = \emptyset$.*

Demostración. Si $\lambda \in \mathbb{C}$ no pertenece al espectro puntual, entonces $A - \lambda I$ es autoadjunto e inyectivo. Por el Teorema 2.5.7 tenemos entonces que $Rg(A - \lambda I)$ es denso en H de forma que λ no pertenece a $R_\sigma(A)$. \square

3.2. Familias espectrales y teorema de descomposición espectral

Estamos ahora en posición de exponer el resultado principal correspondiente a la resolución espectral de un operador autoadjunto. Comenzamos con la definición de familia espectral

Definición 3.2.1. Sea H un espacio de Hilbert. Una familia espectral o resolución de la identidad en H es una familia $E(\lambda)$, $\lambda \in \mathbb{R}$ tal que $E(\lambda)$ es un operador de proyección en H sobre un espacio cerrado $M(\lambda)$ y se verifica

$$E(\lambda)E(\mu) = E(\mu)E(\lambda) = E(\min\{\lambda, \mu\}), \quad \forall \lambda, \mu \in \mathbb{R},$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow -\infty} E(\lambda)x = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} E(\lambda)x = x, \quad \forall x \in X,$$

$$\lim_{\lambda \rightarrow \lambda_0^+} E(\lambda)x = E(\lambda_0)x, \quad \forall x \in X.$$

Observación 3.2.2. La primera propiedad de los operadores $E(\lambda)$ significa que $M(\lambda) \subset M(\mu)$ si $\lambda < \mu$. La segunda implica que la intersección de los espacios $E(\lambda)$ es el espacio nulo y su unión es densa en H . La tercera es equivalente a

$$M(\lambda_0) = \bigcap_{\lambda > \lambda_0} M(\lambda).$$

Para $u \in H$, la aplicación $\lambda \mapsto (E(\lambda)u|u) = (E(\lambda)u|E(\lambda)v)$ es creciente en λ , continua a la derecha y verifica

$$\lim_{\lambda \rightarrow 0} (E(\lambda)u|u) = 0, \quad \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} (E(\lambda)u|u) = \|u\|^2.$$

En caso de tener un intervalo de la forma $I = (a, b]$, usaremos la notación $E(I) = E((a, b]) = E(b) - E(a)$.

Observación 3.2.3. Si $u, v \in H$, la función $\lambda \mapsto (E(\lambda)u|v) = (E(\lambda)u|E(\lambda)v)$ verifica

$$\begin{aligned} (E(\lambda)u|v) &= \frac{1}{4} \left[(E(\lambda)(u+v)|u+v) - (E(\lambda)(u-v)|u-v) \right. \\ &\quad \left. + i(E(\lambda)(u+iv)|u+iv) - i(E(\lambda)(u-iv)|u-iv) \right] \end{aligned}$$

de donde se deduce que es diferencia de dos funciones crecientes y por tanto es una función de variación acotada. Su derivada distribucional define entonces una medida de Radon $d(E(\lambda)u|v)$ en \mathbb{R} tal que

$$d(E(\lambda)u|v)(a, b) = (E(b)u|v) - (E(a)u|v) = ((E(b) - E(a))u|(E(b) - E(a))v).$$

Además

$$d|(E(\lambda)u|v)|(a, b) \leq \sqrt{(E(b)u|u) - (E(a)u|u)} \sqrt{(E(b)v|v) - (E(a)v|v)}. \quad (3.2.1)$$

Sabemos que las funciones continuas en \mathbb{R} son por tanto medibles para la derivada distribucional de $(E(\lambda)u|v)$ e integrables en intervalos acotados. La integral asociada es en verdad una integral en el sentido Riemann-Stieljes.

Teorema 3.2.4. Dada una familia espectral $\{E(\lambda)\}_\lambda$, el operador A de dominio

$$D(A) = \left\{ u \in H : \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d\|E(\lambda)u\|^2 < \infty \right\},$$

definido por

$$(Au|v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|v), \quad \forall u \in D(A), \forall v \in H,$$

está bien definido y es autoadjunto.

Demostración. Gracias a (3.2.1) y a la desigualdad de Cauchy-Schwarz tenemos

$$\int_{\mathbb{R}} |\lambda| d|(E(\lambda)u|v)| \leq \sqrt{\int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d(E(\lambda)u|u)} \sqrt{\int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)v|v)} = \sqrt{\int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d(E(\lambda)u|u)} \|v\|,$$

para todo $u \in D(A)$ y todo $v \in H$. Esto asegura la existencia de la integral

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|v)$$

y gracias al teorema de Riesz la existencia para todo $u \in H$ de un vector $Au \in H$ tal que

$$(Au|v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|v), \quad \forall v \in H.$$

Por otra parte observemos que para todo $u \in H$ y todo $\Lambda > 0$, definiendo $u_{\Lambda} = E(\Lambda)u - E(-\Lambda)u$ se verifica

$$\int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d(E(\lambda)u_{\Lambda}|E(\lambda)u_{\Lambda}) = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \lambda^2 d(E(\lambda)u|E(\lambda)u) < \infty.$$

Por tanto u_{Λ} pertenece a $D(A)$. Usando entonces que u_{Λ} converge a u en H cuando Λ tiende a infinito, tenemos que $D(A)$ es denso en H .

Falta ver que A es autoadjunto. Sea $v \in D(A^*)$, sabemos entonces que existe $C_v \geq 0$ tal que para todo $u \in D(A)$, se tiene

$$(Au|v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|v) \leq C_v \|u\|.$$

Tomando en particular

$$u = \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \lambda d(E(\lambda)v|v)$$

tenemos

$$\int_{-\Lambda}^{\Lambda} \lambda^2 d(E(\lambda)v|v) \leq C_v \sqrt{\int_{-\Lambda}^{\Lambda} \lambda^2 d(E(\lambda)v|v)} \Rightarrow \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \lambda^2 d(E(\lambda)v|v) \leq C_v^2, \quad \forall \Lambda > 0.$$

Tomando límite cuando Λ tiende a infinito se prueba entonces que v pertenece a $D(A)$. Por otra parte, para todo $u \in D(A)$, se tiene

$$(Au|v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(u|E(\lambda)v) = (u|Av),$$

y por tanto el resultado. \square

Sea A un operador autoadjunto construido a partir de una familia espectral $\{E(\lambda)\}$. Dada una función compleja medible Borel (en particular se puede tomar continua) $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$, podemos también definir

$$D(f(A)) = \left\{ u \in H : \int_{\mathbb{R}} |f(\lambda)|^2 d(E(\lambda)u|u) < \infty \right\}$$

y $f(A) : D(f(A)) \subset H \rightarrow H$ el operador dado por

$$(f(A)u|v) = \int_{\mathbb{R}} f(\lambda) d(E(u)|v), \quad \forall u \in D(A), \forall v \in H.$$

Observación 3.2.5. La idea anterior permite por ejemplo definir el valor absoluto del operador o su parte positiva y negativa que se puede ver coinciden con los dados previamente en la Observación 2.5.14. En el caso en que $M(\lambda) = \{0\}$ para todo $\lambda < 0$, i.e. el operador es monótono, esto permite también dar otra definición de la raíz cuadrada (o de cualquier otra raíz) del operador.

Definición 3.2.6. Sea $F : D(F) \subset H \rightarrow H$ un operador lineal y B un elemento de $\mathcal{L}(H)$. Se dice que F conmuta con B si

$$B(D(F)) \subset D(F) \quad \text{y} \quad FBu = BFu, \quad \forall u \in D(F).$$

Se denota por $(F)'$ el conjunto de operadores continuos que conmutan con F .

Las funciones de un operador autoadjunto definidas anteriormente cumplen la siguiente relación de conmutación.

Teorema 3.2.7. *Sea $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda)$ un operador autoadjunto construido a partir de una familia espectral, entonces*

$$(A)' \subset (f(A))'.$$

El resultado anterior admite el siguiente recíproco.

Teorema 3.2.8. (*Neumann-Riesz-Mimura*) Sea $A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda)$ un operador autoadjunto construido a partir de una familia espectral en un espacio de Hilbert separable H . Sea T un operador cerrado en H con dominio denso. Entonces una condición necesaria y suficiente para que T sea una función $f(A)$ de A es que

$$(A)' \subset (T)'$$

Hasta ahora hemos estado viendo propiedades de operadores autoadjuntos definidos a partir de una familia espectral. El siguiente resultado nos dice que en realidad todo operador autoadjunto admite esta descomposición.

Teorema 3.2.9. (*Von Neumann*) Todo operador autoadjunto admite una descomposición espectral y ésta es única.

Demostración. Para $\lambda \in \mathbb{R}$, consideramos la descomposición polar de $A - \lambda I$, $A - \lambda I = U(\lambda)|A - \lambda I|$ con $|A - \lambda I|$ el operador monótono autoadjunto correspondiente. Definimos entonces

$$E(\lambda) = I - \frac{1}{2} \left(U(\lambda) + U(\lambda)^2 \right). \quad (3.2.2)$$

Observar que $E(\lambda) = I - P_+(\lambda) = P_0(\lambda) + P_-(\lambda)$ con P_0, P_+, P_- los operadores definidos en la Observación 2.5.14 aplicada a $A - \lambda I$. Notando $M(\lambda)$ al rango de $E(\lambda)$, tenemos que $((A - \lambda I)u|u) \leq 0$, para todo $u \in D(A) \cap M(\lambda)$ y por tanto $((A - \mu I)u|u) \leq 0$, para $\mu \geq \lambda$. Además los espacios $M(\lambda)$ reducen a A en el sentido de que $D(A) \cap M(\lambda)$ es denso en $M(\lambda)$ y que $E(\lambda)$ y A conmutan. Esto permite mostrar que $M(\lambda)$ está contenido en $M(\mu)$ si $\lambda < \mu$, ver [2] página 336.

Del hecho de que $E(\lambda)$ es una sucesión creciente de proyecciones, van a existir los límites en $+\infty$ y $-\infty$ de $E(\lambda)$. Notamos $M(\pm\infty)$ a $Rg(\pm\infty)$, los cuales también reducen a A y verifican que $D(A) \cap M(\pm\infty)$ son densos en $M(\pm\infty)$ respectivamente. Sea $u \in D(A) \cap M(-\infty)$, entonces $((A - \lambda I)u|u) \leq 0$ para todo λ . En particular $\|u\|^2 \leq (Au|u)/\lambda$, para todo $\lambda < 0$ lo que implica que u es nulo. Esto prueba que $E(-\infty) = 0$. Análogamente $E(+\infty) = I$.

Veamos que $E(\lambda)$ es continua a la derecha. Se tiene que $E(\lambda + 0)$ es la proyección sobre $M(\lambda + 0)$, intersección de los espacios $M(\mu)$ con $\mu > \lambda$. Por tanto $M(\lambda + 0)$ reduce a A . Por otra parte, para todo $u \in D(A) \cap M(\lambda + 0)$, $(Au|u) \leq \mu\|u\|^2$, para todo $\mu > \lambda$ y por tanto $(Au|u) \leq \lambda\|u\|^2$, lo que

lleva a $M(\lambda + 0) \subset M(\lambda)$. Como la otra contención es inmediata, tenemos entonces la continuidad a la derecha de E .

Para terminar hay que ver que el operador $A' = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda)$ coincide con A . Teniendo en cuenta que la unión de $M(\lambda, \mu) = \text{Rg}(E(\mu) - E(\lambda))$, $\lambda < \mu$ es densa en $D(A')$ con la norma de $D(A')$, basta ver que $M(\lambda, \mu)$ está contenido en $D(A)$ y $Au = A'u$ para $u \in M(\lambda, \mu)$.

Comenzamos observando que $M(\lambda, \mu)$ reduce A y que

$$\lambda \|u\|^2 \leq (Au|u) \leq \mu \|u\|^2, \quad \forall u \in D' := M(\lambda, \mu) \cap D(A).$$

Por tanto A está acotado en D' . Como D' es denso en $M(\lambda, \mu)$, entonces debe coincidir con $M(\lambda, \mu)$ por el hecho de que A es cerrado. Como A está acotado superiormente por μ e inferiormente por λ , entonces $A - (\lambda + \mu)I/2$ está acotado superiormente por $(\mu - \lambda)/2$.

Dividimos el intervalo $I = (\lambda, \mu)$ en n subintervalos iguales I_1, \dots, I_n y llamamos λ_k el punto medio de I_k . Para $u \in M(\lambda, \mu)$, tomamos $u_k = E(I_k)u$, de forma que $u = u_1 + \dots + u_n$ con los vectores u_k mutuamente ortogonales. Por otra parte, como $E(I_k)H$ reduce a A , $Au_k \in E(I_k)H$ y se tiene que los vectores $(A - \lambda_k I)u_k$ son también mutuamente ortogonales. Además $\|(A - \lambda_k)u_k\| \leq (\mu - \lambda)\|u_k\|/(2n)$ por la observación anterior. Tenemos entonces

$$\begin{aligned} \left\| Au - \sum_k \lambda_k u_k \right\|^2 &= \left\| \sum_k (A - \lambda_k)u_k \right\|^2 \\ &= \sum_k \|(A - \lambda_k)u_k\|^2 \leq \frac{(\mu - \lambda)^2}{4n^2} \sum_k \|u_k\|^2 = \frac{(\mu - \lambda)^2}{4n^2} \|u\|^2. \end{aligned}$$

Tomando límite en $n \rightarrow \infty$ tenemos entonces que $\lim \sum_k \lambda_k E(I_k)u = Au$, lo que conduce a

$$(A'u|v) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|v) = \lim \sum_k \lambda_k (E(I_k)u|v) = (Au|v).$$

Para la unicidad remitimos a [2], donde se prueba que si existe una descomposición espectral entonces los operadores $E(\lambda)$ tienen que venir dados por (3.2.2). \square

Para terminar, veamos la conexión entre el teorema de descomposición espectral que acabamos de dar y las descomposiciones en dimensión finita usando una base formada por autovectores. Se tiene los siguientes resultados.

Proposición 3.2.10. *Sea H espacio de Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto, $\{E(\lambda)\}$ la familia espectral asociada a A , entonces $\mu \in P_\sigma(A)$ es equivalente a $E(\mu) - E(\mu^-) \neq 0$, siendo este último el operador de proyección sobre el espacio de autovectores de A asociado a μ .*

Demostración. Sea V el espacio de autovectores asociado a μ y M el rango de $E(\mu) - E(\mu^-)$. Para todo $v \in V$, se tiene

$$0 = \|(A - \mu I)v\|^2 = \int_{\mathbb{R}} |\lambda - \mu|^2 d(E(\lambda)v|v),$$

lo cual implica que $E(\lambda)v = E(\mu)v$ para todo $\lambda > \mu$ y que $E(\lambda)v = E(\mu^-)v$ para todo $\lambda < \mu$, pero esto implica $E(\mu)v = v$, $E(\mu^-)v = 0$. Por tanto V está contenido en M . Para el recíproco basta observar que si $v \in M$, entonces

$$v = \int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)v) = \int_{\{\mu\}} d(E(\lambda)v), \quad Av = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)v) = \int_{\{\mu\}} \lambda d(E(\lambda)v) = \mu v.$$

□

Corolario 3.2.11. *Si H es separable y $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto, entonces $P_\sigma(A)$ es a lo más numerable.*

Proposición 3.2.12. *Sea H espacio de Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto y $(a, b) \subset \mathbb{R}$ que no contiene autovalores de A , entonces si $\{E(\lambda)\}$ es la familia espectral correspondiente a A , $E(\lambda) = E(a)$ para todo $\lambda \in [a, b)$ es equivalente a que (a, b) no contenga valores espectrales de A .*

Demostración. Sabemos que $A - \mu I$ es invertible para todo $\mu \in (a, b)$. Por otra parte

$$(A - \mu I)^{-1} = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \mu)^{-1} dE(\lambda).$$

Que $E(\lambda)$ no sea constante en $[a, b)$ es equivalente a que existan $\mu, \lambda_n \in (a, b)$, λ_n decreciendo hacia μ y u_n con norma uno tales que

$$E(\mu)u_n = 0, \quad E(\lambda_n)u_n = u_n.$$

Si suponemos que $(A - \mu I)^{-1}$ es continua, entonces podemos aplicarla a los u_n antes definidos:

$$\begin{aligned} ((A - \mu I)^{-1}u_n|u_n) &= \int_{\mathbb{R}} (\lambda_n - \mu)^{-1} d(E(\lambda)u_n|u_n) = \int_{[\mu, \lambda_n)} (\lambda - \mu)^{-1} d(E(\lambda)u_n|u_n) \\ &\geq \int_{[\mu, \lambda_n)} (\lambda_n - \mu)^{-1} d(E(\lambda)u_n|u_n) = (\lambda_n - \mu)^{-1}, \end{aligned}$$

donde entramos en contradicción con la continuidad de $(A - \mu I)^{-1}$ y por tanto $\mu \in C_\sigma(A)$. Para la otra implicación, fijémonos que demostrar que $(A - \mu I)^{-1}$ es continua es equivalente a demostrar:

$$\|(A - \mu I)u\|^2 \geq \alpha \|u\|^2, \quad \forall u \in D(A).$$

Para probar esta desigualdad, suponemos $E(\lambda)$ constante en $[a, b)$ y denotamos $\alpha = \min\{|a - \mu|^2, |b - \mu|^2\}$, entonces

$$\begin{aligned} \|(A - \mu I)u\|^2 &= \int_{(-\infty, a)} |\lambda - \mu|^2 d(E(\lambda)u|u) + \int_{[b, +\infty)} |\lambda - \mu|^2 d(E(\lambda)u|u) \\ &\geq |a - \mu|^2 \int_{(-\infty, a)} d(E(\lambda)u|u) + |b - \mu|^2 \int_{[b, +\infty)} d(E(\lambda)u|u) \geq \alpha \|u\|^2, \quad \forall u \in D(A). \end{aligned}$$

Por tanto $(A - \mu I)^{-1}$ es continua. \square

Corolario 3.2.13. *Sea H espacio de Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto. Si μ es un valor espectral aislado de A , entonces μ pertenece a $P_\sigma(A)$ y existe $\delta > 0$ tal que $E(\lambda) = E(\mu^-)$ si $\lambda \in (\mu - \delta, \mu)$, $E(\lambda) = E(\mu)$ si $\lambda \in (\mu, \mu + \delta)$. Como μ es un autovalor debemos tener entonces $E(\mu) \neq E(\mu^-)$.*

Corolario 3.2.14. *(Hilbert-Schmidt) Sea H espacio de Hilbert, $A : D(A) \subset H \rightarrow H$ autoadjunto y compacto y $\{\lambda_n\}$ el conjunto de autovalores de A que sabemos se puede escribir como una sucesión que converge a cero y que puede o no incluir el valor nulo. Entonces, tomando V_n los espacios de autovectores correspondientes, los cuales tienen dimensión finita para todo $\lambda_n \neq 0$ y denotando P_n la proyección sobre V_n se tiene*

$$I = \sum_n P_n, \quad A = \sum_n \lambda_n P_n$$

donde las convergencias se tienen en el sentido fuerte de los operadores.

Interpretación en Mecánica Cuántica.

Como ya anunciamos al introducir los principios de la Mecánica Cuántica, a cada magnitud física le vamos a asociar un operador autoadjunto A que actúa sobre la función de ondas u , la cual supondremos definida en un espacio $L^2(\Omega)$. Tomando u con norma uno en $L^2(\Omega)$, el valor medio de

la magnitud física viene dado por $(Au|u)$. Usando la descomposición espectral de A que proporciona el Teorema 3.2.9 tenemos que este valor medio viene dado por

$$M_A(u) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|u).$$

La medida $d(E(\lambda)u|u)$ nos proporciona entonces la medida de distribución de la probabilidad asociada a la magnitud A aplicada a u . Así, la probabilidad de que la magnitud dada por A tome valores en el intervalo $(a, b]$ es

$$(E(b) - E(a)u|u).$$

La varianza correspondiente vendrá dada por

$$\text{Var}_A(u) = \int_{\mathbb{R}} \left| \lambda - \int_{\mathbb{R}} \mu d(E(\mu)u|u) \right|^2 d(E(\lambda)u|u) = \int_{\mathbb{R}} \lambda^2 d(E(\lambda)u|u) - \left(\int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u|u) \right)^2.$$

En Mecánica Cuántica es usual hablar de los estados correspondientes a la magnitud como las autofunciones correspondientes a A . Esto proporciona funciones u para las cuales la medida $d(E(\lambda)u|u)$ se reduce a una delta de Dirac en el autovalor λ_0 correspondiente. Por tanto en este caso podemos hablar del valor de la magnitud en u como un suceso seguro y no sólo en términos probabilísticos. Sin embargo, si no estamos en las condiciones del teorema de Hilbert-Schmidt, la descomposición espectral de A no viene dada por una base de autofunciones. Destacar sin embargo que si denotamos por $M(\lambda)$ el espacio asociado al operador de proyección $E(\lambda)$ entonces para toda u en $M(b) \cap M(a)^\perp$, $a < b$ se tiene que la probabilidad de que Au tome valores fuera del intervalo $(a, b]$ es nula.

Capítulo 4

Aplicaciones en Mecánica Cuántica

4.1. Leyes de conservación y ecuación de Schrödinger

En esta sección vamos a ver en qué sentido se entienden las leyes de conservación usuales en Mecánica Cuántica. Ello nos permitirá en particular definir los operadores correspondientes al impulso y al momento angular. También presentamos el operador de posición y damos una expresión más explícita de la ecuación de Schrödinger cuya existencia de solución mostramos apoyándonos en la teoría espectral.

Como ya hemos comentado, en Mecánica Cuántica las distintas magnitudes físicas no tienen un valor determinado sino que tan solo podemos hablar de probabilidad, en particular no podemos seguir el valor de una magnitud que está variando con el tiempo. De esta forma, diremos que una magnitud se conserva si partiendo de unas condiciones iniciales arbitrarias, el valor medio de esta magnitud no varía. Desde un punto de vista formal el problema sería el siguiente: consideramos la función de ondas $u = u(t, x)$ de un determinado sistema, cuya evolución viene dada a partir de la ecuación de Schrödinger a la cual hay que añadirle una condición inicial (como veremos más adelante también son necesarias condiciones de contorno), i.e. u es solución de

$$i\hbar\partial_t u = Hu, \quad u|_{t=0} = u_0, \quad (4.1.1)$$

siendo H el operador energía que sabemos debe ser autoadjunto. Supongamos A el operador correspondiente a una cierta magnitud. Suponiendo que A se conserva, tenemos que la función $t \rightarrow (Au|u)$ es constante, siendo $(\cdot|\cdot)$ el producto escalar en $L^2(\Omega)$ con Ω un abierto de \mathbb{R}^{3n} donde se encuentran las posiciones del sistema, i.e. debemos tener que para todo u se cumple

$$i\hbar\frac{d}{dt}(Au|u) = 0.$$

Limitándonos al caso de operadores independientes del tiempo y derivando formalmente, tenemos

$$0 = (Ai\hbar u'|u) - (Au|i\hbar u') = (AHu|u) - (Au|Hu) = ((AH - HA)u|u) = 0,$$

lo que teniendo en cuenta que $i(AH - HA)$ es autoadjunto resulta equivalente a que A y H conmutan.

Resaltar que la demostración anterior plantea varias dificultades desde el punto matemático cuya posible resolución merece ser analizada. La primera proviene de la existencia y unicidad de solución al problema de Schrödinger. La segunda se refiere a la composición de operadores. Recordar que en la práctica vamos a tener operadores que no están definidos en todo $\mathcal{H} := L^2(\Omega)$ y que no son continuos.

Consideremos primero el problema relativo a la existencia de solución de (4.1.1) cuestión básica en Mecánica Cuántica ya que es el problema que nos proporciona la evolución temporal de un sistema físico. Gracias al Teorema 3.2.9 sabemos que existe una descomposición espectral de H dada por los operadores de proyección $E(\lambda)$. Si existe una solución de (4.1.1) tal que $u(t) \in \mathcal{H}$, para todo $t \geq 0$, se debe verificar

$$u(t) = \int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)u(t)),$$

de forma que el problema se escribe

$$i\hbar \frac{d}{dt} \int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)u(t)) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)u(t)), \quad \int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)u(0)) = \int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)u_0).$$

que al menos en el sentido de las distribuciones se escribe $(\lambda \mapsto d(E(\lambda)u(t)))$ es una medida de Radon de \mathbb{R} en \mathcal{H}) como

$$i\hbar \frac{d}{dt} (d(E(\lambda)u(t))) = \lambda (d(E(\lambda)u(t))), \quad d(E(\lambda)u(0)) = d(E(\lambda)u_0).$$

La solución de este sistema viene dada por

$$d(E(\lambda)u(t)) = e^{-i\frac{\lambda t}{\hbar}} d(E(\lambda)u_0),$$

i.e. si existe solución, debemos tener

$$u(t) = \int_{\mathbb{R}} e^{-i\frac{\lambda t}{\hbar}} d(E(\lambda)u_0). \quad (4.1.2)$$

Suponiendo que u_0 pertenece al espacio \mathcal{H} , tenemos que esta expresión nos proporciona una función $u \in C^0(\mathbb{R}; \mathcal{H})$. Sin embargo, no es en general derivable respecto a t y por tanto sólo proporciona una

solución en un sentido generalizado. Para que podamos derivar respecto de t en el sentido usual, necesitamos que la función u_0 pertenezca al dominio del operador H

$$D(H) = \left\{ u_0 \in \mathcal{H} : \int_{\mathbb{R}} |\lambda|^2 d(E(\lambda)u_0|u_0) < \infty. \right\}$$

En este caso tenemos que u pertenece a $C^1(\mathbb{R}; \mathcal{H}) \cap C^0(\mathbb{R}; D(H))$ y es solución de (4.1.1). Además del espacio $D(H)$, podemos también definir los espacios $D(H^\alpha)$ con $\alpha \geq 0$ por ($D(H^0) = \mathcal{H}$) por

$$D(H^\alpha) = \left\{ u_0 \in \mathcal{H} : \int_{\mathbb{R}} |\lambda|^{2\alpha} d(E(\lambda)u_0|u_0) < \infty. \right\} \quad (4.1.3)$$

los cuales son un espacio de Hilbert con el producto escalar

$$(u|v)_{D(H^\alpha)} = \int_{\mathbb{R}} (1 + |\lambda|^{2\alpha}) d(E(\lambda)u|v), \quad \forall u, v \in D(H^\alpha). \quad (4.1.4)$$

Observar que si el espectro de H está contenido en $[0, \infty)$ entonces el operador H^α está bien definido y el espacio anterior coincide efectivamente con el dominio del operador H^α . Con estos espacios observamos que si u_0 pertenece a $D(H^{\alpha+1})$, $\alpha \geq 0$, entonces la solución u de (4.1.1) pertenece a $C^1(\mathbb{R}; D(H^\alpha)) \cap C^0(\mathbb{R}; D(H^{\alpha+1}))$. En la práctica es usual trabajar con soluciones de (4.1.1) donde la derivada temporal existe en el sentido de las distribuciones. En este caso el espacio más usual para las condiciones iniciales es $D(H^{\frac{1}{2}})$. Con u_0 en estas condiciones tenemos que la función u definida por (4.1.2) es solución de (4.1.1) en el siguiente sentido

$$\begin{cases} u_0 \in C^0(\mathbb{R}; D(H^{\frac{1}{2}})) \\ i\hbar \frac{d}{dt}(u(t)|w) = (Hu(t)|w) \text{ en } \mathcal{D}'(\mathbb{R}), \forall w \in D(H^{\frac{1}{2}}). \end{cases} \quad (4.1.5)$$

La unicidad de solución de este problema se puede deducir del hecho de que (4.1.1) implica la conservación de la norma en \mathcal{H} . En el caso de soluciones fuertes ($u \in C^1(\mathbb{R}; \mathcal{H}) \cap C^0(\mathbb{R}; D(H))$) esto se prueba multiplicando escalarmente (4.1.1) por u y tomando parte imaginaria, lo cual conduce a

$$\frac{d}{dt}(u|u) = 0.$$

También se deduce de la expresión explícita (4.1.2) de la solución de (4.1.1). El caso de soluciones débiles es más delicado y se obtiene por aproximación por funciones regulares.

Mencionar que las soluciones en el sentido (4.1.5) también verifican

$$\frac{d}{dt}(Hu|u) = 0 \quad (4.1.6)$$

lo cual se obtiene formalmente multiplicando en (4.1.1) por u' y tomando parte real. De forma rigurosa es una consecuencia inmediata de (4.1.2). Observar que (4.1.6) no es otra cosa que la conservación de la energía. Precisamente, la importancia física del espacio $D(H^{\frac{1}{2}})$ es que es el espacio donde podemos hablar del valor medio de la energía. Sin embargo, para que la varianza esté bien definida necesitamos u en $D(H)$.

Además de los espacios $D(H^\alpha)$ es también interesante considerar sus duales, los cuales viene dados por

$$D'(H^\alpha) = \left\{ \int_{\mathbb{R}} dE(\lambda)u : \int_{\mathbb{R}} \frac{1}{|\lambda|^{2\alpha} + 1} d(E(\lambda)u|u) < \infty \right\},$$

y están dotados de un producto escalar similar a (4.1.4). Observar que la definición de estos elementos es abstracta en el sentido de que no son en general vectores de \mathcal{H} . Se tiene

Teorema 4.1.1. (*Existencia y unicidad para el problema de Schrödinger*) Sea \mathcal{H} un espacio de Hilbert y H un operador autoadjunto en \mathcal{H} , entonces para todo $u_0 \in D(H^{\frac{1}{2}})$, el problema (4.1.1) tiene una única solución $u \in C^0(\mathbb{R}; D(H^{\frac{1}{2}}))$ con $u' \in C^0(\mathbb{R}; D'(H^{\frac{1}{2}}))$ en el sentido dado por (4.1.5). Además esta función verifica

$$(u(t)|u(t)) = (u_0|u_0), \quad (Hu(t)|u(t)) = (Hu_0|u_0), \quad \forall t \in \mathbb{R}.$$

Si $u_0 \in D(H)$, entonces u es solución fuerte de (4.1.1) y pertenece a $C^0(\mathbb{R}; D(H)) \cap C^1(\mathbb{R}; \mathcal{H})$.

Veamos ahora como dar una base matemática al cálculo hecho anteriormente para formular la conservación de una cierta magnitud física. Observar que el operador H entendido como

$$\int_{\mathbb{R}} d(E(\lambda)v) \mapsto \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)v),$$

define un operador lineal y continuo de $D(H^\alpha)$ en $D'(H^{1-\alpha})$ para todo $\alpha \in [0, 1]$, i.e

$$H \in \mathcal{L}(D(H^\alpha); D'(H^{1-\alpha})), \quad \forall \alpha \in [0, 1]. \quad (4.1.7)$$

Consideremos ahora otro operador autoadjunto A en \mathcal{H} al cual le pedimos

$$D(H) \subset D(A), \quad A \in \mathcal{L}(D(H); \mathcal{H}). \quad (4.1.8)$$

Teniendo en cuenta que A es autoadjunto, tenemos entonces para todos $u, v \in D(H)$

$$|(Au|v)| = |(u|Av)| \leq \|u\|_{\mathcal{H}} \|Av\|_{\mathcal{H}} \leq \|u\|_{\mathcal{H}} \|A\|_{\mathcal{L}(D(H); \mathcal{H})} \|v\|_{D(H)},$$

que junto a $D(H)$ denso en \mathcal{H} permite extender A un operador lineal y continuo de \mathcal{H} en $D'(H)$, i.e. tenemos

$$A \in \mathcal{L}(D(H); \mathcal{H}), \quad A \in \mathcal{L}(\mathcal{H}; D'(H)). \quad (4.1.9)$$

Usando (4.1.7), (4.1.9) y el Teorema 4.1.1, se tiene inmediatamente

Teorema 4.1.2. *Sea A un operador autoadjunto que verifica (4.1.8), entonces para todo $u_0 \in D(H)$, la solución u de (4.1.1) verifica*

$$i\hbar \frac{d}{dt}(Au|u) = ((AH - HA)u|u), \quad (4.1.10)$$

donde $AH, HA \in \mathcal{L}(D(H); D'(H))$.

Observación 4.1.3. La teoría de la interpolación ([6]) muestra que (4.1.9) implica

$$A \in \mathcal{L}(D(H^\alpha); D'(H^{\alpha-1})), \quad \forall \alpha \in [0, 1].$$

En dimensión finita, sabemos que la conmutatividad de aplicaciones autoadjuntas implica que ambas son mutuamente diagonalizables. Al presentar la teoría en términos más simples, este resultado se da a veces por cierto en libros de física en dimensión infinita. Recordar que las autofunciones correspondientes a A nos proporcionan situaciones físicas en las cuales podemos hablar exactamente del valor de A en u . Tener una base mutuamente diagonalizable para dos operadores significa por tanto que podemos hablar simultáneamente del valor de ambas magnitudes mientras que cuando dos operadores no conmutan, conocer exactamente una de las magnitudes implica sólo poder hablar de la otra en términos probabilísticos.

En la literatura no hemos encontrado un resultado general que permita asegurar que la conmutatividad de operadores implique la existencia de una descomposición espectral para ambos. El resultado más relacionado en este sentido es el Teorema 3.2.8.

Sin embargo sí que podemos obtener un resultado que nos muestra como efectivamente el hecho de que dos operadores no conmuten conlleva que conocer con mucha fiabilidad el valor de una de ellas significa muy poca fiabilidad en la otra. Para ello, la primera dificultad es qué vamos a entender por que dos operadores autoadjuntos conmuten, ya que en general al no estar definidos en todo el espacio no tiene sentido la conmutatividad. La idea está relacionada con la usada anteriormente con el operador Hamiltoniano.

Definición 4.1.4. Sea \mathcal{H} Hilbert y $A : D(A) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$, $B : D(B) \subset \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$ dos operadores autoadjuntos. Suponiendo que $D(A) \cap D(B)$ es denso en \mathcal{H} , se definen los operadores $AB, BA : D(A) \cap D(B) \rightarrow (D(A) \cap D(B))'$ por

$$\langle u, ABv \rangle = (Au|Bv), \quad \langle u, BAv \rangle = (Bu|Av), \quad \forall u, v \in D(A) \cap D(B).$$

Se tiene la siguiente versión del principio de incertidumbre.

Teorema 4.1.5. Sea A, B dos operadores autoadjuntos en \mathcal{H} tales que $D(A) \cap D(B)$ es denso en \mathcal{H} , entonces para toda $u \in D(A) \cap D(B)$ con norma uno en \mathcal{H} , se tiene

$$|(Au|Bu) - (Bu|Au)|^2 \leq 4\text{Var}_A(u)\text{Var}_B(u). \quad (4.1.11)$$

Demostración. Para todos $a, b \in \mathbb{R}$, se tiene

$$(Au|Bu) - (Bu|Au) = ((A - a)u|(B - b)u) - ((B - b)u|(A - a)u) = -2\text{Re}\left(i((A - a)u|(B - b)u)\right)$$

La desigualdad de Cauchy-Schwarz implica entonces

$$|(Au|Bu) - (Bu|Au)| \leq 2 \min_{a \in \mathbb{R}} \|(A - a)u\| \min_{b \in \mathbb{R}} \|(B - b)u\|.$$

Los mínimos que aparecen en el miembro derecho son fáciles de obtener, así

$$\min_{a \in \mathbb{R}} \|(A - a)u\|^2 = \min_{a \in \mathbb{R}} \{\|Au\|^2 + a^2 - 2a(Au|u)\},$$

es el mínimo de una parábola en a y se alcanza en

$$a = (Au|u) = M_A(u),$$

y por tanto

$$\min_{a \in \mathbb{R}} \|(A - a)u\|^2 = \|(A - M_A(u))u\|^2 = V_A(u).$$

Usando el resultado similar para B se obtiene entonces el resultado. \square

Vamos ahora a introducir algunos de los operadores más comunes en Mecánica Cuántica relacionados con magnitudes físicas de la Mecánica Clásica. Más adelante veremos algunos operadores específicos de la propia Mecánica Cuántica. En lo que sigue por fijar ideas, consideraremos operadores en $L^2(\Omega)$ con Ω un abierto de \mathbb{R}^{3n} cuyas variables se notan por x_{lj} con $1 \leq l \leq n$, $1 \leq j \leq 3$. También usaremos la notación x_l para referirnos a (x_{l1}, x_{l2}, x_{l3}) . El abierto Ω será de la forma

$$\Omega = \{x \in \mathbb{R}^{3n} : x_l \in \omega_l, 1 \leq l \leq n\}. \quad (4.1.12)$$

con ω_l un abierto de \mathbb{R}^3 que físicamente representa el conjunto donde se mueve la partícula l . Las definiciones se extienden de forma simple a otros casos como los referentes a movimientos unidimensionales o bidimensionales así como a sistemas de variables más generales.

Operador de posición. El operador correspondiente a la coordenada $j \in \{1, 2, 3\}$ de la partícula l -ésima lo vamos a denotar por X_{lj} y está definido simplemente como el operador de multiplicación

$$X_{lj}u = x_{lj}u.$$

Observar que ya para este operador tan simple, tenemos que si ω_l no es acotado, entonces el operador no es continuo sobre $L^2(\Omega)$. Su dominio vendrá dado por

$$D(X_{lj}) = \left\{ u \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} |x_{lj}|^2 |u|^2 dx < \infty \right\}.$$

Suponiendo u la función de ondas de un sistema de partículas la cual suponemos normalizada, tenemos entonces que el valor medio de la componente j -ésima de la partícula l en el instante t viene dado por

$$\int_{\Omega} x_{lj} |u(t, x)|^2 dx.$$

A partir de aquí vemos que la función $|u|^2$ es la función de distribución de la posición, i.e. para $C \subset \Omega$ medible

$$\int_C |u|^2 dx,$$

nos da la probabilidad de que las partículas del sistema cumplan $(x_1, \dots, x_n) \in C$.

Operador de impulso o cantidad de movimiento. Recordamos que en Mecánica Clásica la conservación del impulso proviene de la homogeneidad del espacio, o equivalentemente de que la Hamiltoniana H no varíe cuando realizamos una traslación en las variables, i.e.

$$H(x_1 + \tau, \dots, x_n + \tau) = H(x_1, \dots, x_n), \quad \forall \tau, x_1, \dots, x_n \in \mathbb{R}^3.$$

En el caso de la Mecánica Cuántica H es un operador y la forma de escribir la igualdad anterior es

$$H\tau u = \tau H u,$$

donde estamos notando por τ el operador de traslación asociado al vector τ , i.e.

$$\tau u(x_1, \dots, x_n) = u(x_1 + \tau, \dots, x_n + \tau).$$

Derivando respecto a τ y evaluando en $\tau = 0$ tenemos

$$H \sum_{l=1}^n \nabla_{x_l} u = \sum_{l=1}^n \nabla_{x_l} H u.$$

Esto significa que el operador $\sum_{l=1}^n \nabla_{x_l}$ conmuta con H y por tanto conlleva a una ley de conservación. Teniendo en cuenta que esta conservación proviene de la homogeneidad del espacio se llega a la conclusión de que salvo constante multiplicativa, el operador $\sum_{i=1}^n \nabla_{x_i}$ debe corresponder al impulso total del sistema. Para obtener la constante multiplicativa correspondiente recurrimos a la aproximación de la Mecánica Cuántica por la Clásica. Recordamos que en esta aproximación teníamos (1.2.9) y por tanto

$$\sum_{l=1}^n \nabla_{x_l} u \sim \frac{i}{\hbar} \left(\sum_{l=1}^n \nabla_{x_l} S \right) u.$$

Por otra parte, la ecuación de Hamilton-Jacobi nos dice que $\nabla_{x_l} S$ coincide con el momento de impulsión de la partícula l -ésima. Debemos tener por tanto que el operador

$$P = -i\hbar \sum_{i=1}^n \nabla_{x_i}$$

se corresponde con el operador impulso total. El operador

$$P_{lj} = -i\hbar \partial_{x_{lj}}$$

se correspondiente a la componente j -ésima del impulso para la partícula l . En este caso se trata de un operador diferencial que claramente no es continuo en $L^2(\Omega)$.

Operador de momento angular. La conservación del momento angular sabemos que se corresponde con la isotropía del espacio. Razonando de forma similar al impulso definimos para cada matriz de giro Q el operador que seguimos notando por Q como

$$Qu(x_1, \dots, x_n) = u(Qx_1, \dots, Qx_n).$$

La isotropía respecto al espacio se escribe por tanto como

$$HQu = QHu, \quad \forall Q \text{ matriz de giro.}$$

Consideremos por ejemplo el giro respecto al eje OX_3 , donde la matriz de giro es

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & -\text{sen } \varphi & 0 \\ \text{sen } \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Derivando respecto a φ y evaluando en $\varphi = 0$, tenemos entonces

$$H \sum_{l=1}^n (-x_{l2} \partial_{x_{l1}} u + x_{l1} \partial_{x_{l2}} u) = \sum_{l=1}^n (-x_{l2} \partial_{x_{l1}} (Hu) + x_{l1} \partial_{x_{l2}} (Hu)).$$

Esto prueba que el operador

$$\sum_{l=1}^n (-x_{l2} \partial_{x_{l1}} + x_{l1} \partial_{x_{l2}})$$

conmuta con H , pero en Mecánica Clásica la cantidad que se conserva al girar respecto al eje OX_3 es la componente x_3 del momento angular. Salvo constante multiplicativa, debemos tener entonces que $\sum_{l=1}^n (-x_{l2} \partial_{x_{l1}} + x_{l1} \partial_{x_{l2}})$ denota la tercera componente del momento angular total. La componente de la partícula l vendrá dada por $-x_{l2} \partial_{x_{l1}} + x_{l1} \partial_{x_{l2}}$. Teniendo en cuenta por otra parte que la tercera componente del momento angular de la partícula l -ésima de un sistema de n partículas es $-x_{l2} p_{l1} + x_{l1} p_{l2}$ con p_{lj} las componentes del impulso p_l asociado a la partícula l , así como la expresión anterior del impulso, deducimos que el operador mecánico-cuántico asociado a la componente x_3 del momento angular debe ser $-i\hbar(-x_{l2} \partial_{x_{l1}} + x_{l1} \partial_{x_{l2}})$. El mismo razonamiento se

puede llevar a cabo con las demás componentes. El operador correspondiente al momento angular de la partícula l viene por tanto dado por

$$L_l = x_l \wedge P_l = -i\hbar x_l \wedge \nabla_{x_l}.$$

Paridad. Otra ley de conservación importante en Mecánica Clásica es la invarianza con respecto a la simetría correspondiente a cambiar de signo las coordenadas de las posiciones. El operador correspondiente viene dado por

$$(\mathcal{P}u)(x_1, \dots, x_n) = u(-x_1, \dots, -x_n).$$

Si bien en Mecánica Clásica esta ley de conservación no aporta nada nuevo, este no es el caso en Mecánica Cuántica donde va a implicar que funciones de onda pares o impares en $t = 0$ van a conservar la paridad en todo el tiempo.

Operador de energía y ecuación de Schrödinger. En Mecánica Clásica la energía de una partícula libre se reduce a su energía cinética y viene dada por $|p|^2/(2m)$ con p el impulso de la partícula y m su masa. Si esperamos que en Mecánica Cuántica los valores que toma la energía sean los que se deducen de esta expresión y recordamos que deben venir dados por los valores espectrales del operador energía llegamos a la conclusión de que el operador correspondiente a la energía cinética de la partícula l viene dado por

$$\frac{p_l \cdot p_l}{2m_l} = \frac{(-i\hbar\nabla_{x_l}) \cdot (-i\hbar\nabla_{x_l})}{2m_l} = -\frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_{x_l}$$

con m_l la masa de esta partícula. La energía cinética total del sistema corresponderá a la suma de las energías y vendrá dada por

$$E_c = -\sum_l \frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_{x_l}.$$

Por otra parte si suponemos que las partículas se encuentran sometidas a un campo conservativo, tendremos que considerar la energía potencial que en Mecánica Clásica viene dada por una función de las componentes de las partículas $U(x_1, \dots, x_n)$. Por similitud con la posición, el operador correspondiente será simplemente multiplicar por U . De esta forma el operador Hamiltoniano correspondiente a un sistema de partículas que se mueven en un campo conservativo vendrá dado

por

$$H = - \sum_l \frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_{x_l} + U(x).$$

La ecuación de Schrödinger correspondiente (4.1.1) se escribe entonces

$$i\hbar\partial_t u = - \sum_l \frac{\hbar^2}{2m_l} \Delta_{x_l} u + U(x)u. \quad (4.1.13)$$

4.2. Resolución espectral de algunos operadores importantes y aplicaciones

Veamos algunos ejemplos de descomposiciones espectrales especialmente en el caso de funciones definidas en todo el espacio.

Operador de posición en todo el espacio. Como primer ejemplo vamos a considerar el operador X_{lj} correspondiente a la componente j de la partícula l , con dominio

$$D(X_{lj}) = \{u \in L^2(\mathbb{R}^{3n}) : x_{lj}u \in L^2(\mathbb{R}^{3n})\}.$$

En realidad como $X_{lj}u$ sólo actúa sobre la componente lj de u basta con tratar con el operador $x : \varphi \in D(x) \subset L^2(\mathbb{R}) \mapsto x\varphi \in L^2(\mathbb{R})$ con dominio $D(x) = \{\varphi \in L^2(\mathbb{R}) : x\varphi \in L^2(\mathbb{R})\}$. Claramente este operador es simétrico. Para ver que es autoadjunto hay que probar que $D(x^*)$ está contenido en $D(x)$. Por definición $v \in D(x^*)$ si y solo si existe $C > 0$ tal que

$$|(xu|v)| = \left| \int_{\mathbb{R}} xu\bar{v} dx \right| \leq C\|u\|_{L^2(\mathbb{R})}, \quad \forall u \in D(x).$$

Teniendo en cuenta la densidad de $D(x)$ en $L^2(\mathbb{R})$, el resultado sigue inmediatamente del Teorema de Riesz que identifica $L^2(\mathbb{R})$ con su dual. La obtención de la descomposición espectral de este operador es bastante simple (y da otra demostración de que este operador es autoadjunto). Dado $\lambda \in \mathbb{R}$, definimos $E_x(\lambda) \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}); L^2(\mathbb{R}))$ por

$$(E_x(\lambda)\varphi)(x) = \begin{cases} \varphi(x) & \text{si } x < \lambda \\ 0 & \text{si } x > \lambda. \end{cases}$$

Observar que $E_x(\lambda)$ es la proyección en $L^2(\mathbb{R})$ de la función φ sobre el espacio de funciones que se anulan en $(\lambda, +\infty)$. Además, para $u, v \in L^2(\mathbb{R})$,

$$(E_x(\lambda)u|v) = \int_{\mathbb{R}} E_x(\lambda)u\bar{v} dt = \int_{-\infty}^{\lambda} u(t)\overline{v(t)} dt,$$

de forma que

$$d(E_x(\lambda)u|v) = u(\lambda)\overline{v(\lambda)} d\lambda.$$

Los operadores $E_x(\lambda)$ proporcionan una familia espectral en $L^2(\mathbb{R})$ y

$$x\varphi = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E_x(\lambda)\varphi).$$

Como ya hemos comentado, en Mecánica Cuántica son importantes los estados asociados al operador definidos como las autofunciones correspondiente para las cuales la magnitud física correspondiente tiene un valor seguro. En el presente caso todos los números reales son valores espectrales del operador x (idem para X_{ij}) pero ninguno un autovalor. Todos pertenecen al espectro esencial. Podemos sin embargo asignar una familia de *autofunciones* a x si consideramos un espacio mayor que $L^2(\mathbb{R})$. Por ejemplo el espacio de las medidas de Radon con variación acotada en \mathbb{R} , donde el operador x también está bien definido con dominio el espacio de medidas μ tales que $x\mu$ tiene variación acotada. Claramente ahora no tiene sentido plantearse si estamos con un operador autoadjunto ya que este espacio no es de Hilbert.

Una medida μ es un autovector para x asociado a λ si $x\mu = \lambda\mu$ lo que lleva a $\mu = c\delta_{\{\lambda\}}$ con $c \in \mathbb{C}$, i.e. ahora todos los números reales son autovalores y tienen un espacio de dimensión uno de autovectores asociado. Observar que efectivamente la posición de una partícula que viniera dada por una función (medida) de onda de la forma $\delta_{\{x=\varphi(t)\}}$ con φ una función, correspondería a una partícula que en el instante t tiene la posición x con probabilidad uno.

Si bien $\delta_{\{\lambda\}}$ no es una función de $L^2(\mathbb{R})$, sí que se puede aproximar en el sentido de las distribuciones (más concretamente en el espacio de medidas dotado de la convergencia *-débil) por funciones de $L^2(\mathbb{R})$. La aproximación más usual consiste en usar

$$\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-\frac{|x-\lambda|^2}{\varepsilon^2}} \xrightarrow{*} \delta_{\{\lambda\}} \text{ en } \mathcal{D}'(\mathbb{R}), \text{ cuando } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Se tiene

$$M_x \left(\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-\frac{|x-\lambda|^2}{\varepsilon^2}} \right) = \lambda, \quad V_x \left(\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}} e^{-\frac{|x-\lambda|^2}{\varepsilon^2}} \right) = \frac{\varepsilon}{4\sqrt{2\pi}}.$$

Operador impulso en todo el espacio. Como en el caso anterior, teniendo en cuenta que P_{ij} sólo actúa sobre una variable, vamos a considerar el operador $p : u \in D(p) \subset L^2(\mathbb{R}) \mapsto -i\hbar u' \in L^2(\mathbb{R})$, con

$$D(p) = \{u \in L^2(\mathbb{R}) : u' \in L^2(\mathbb{R})\} = H^1(\mathbb{R}).$$

Como antes se puede comprobar directamente que p es autoadjunto o directamente buscar una descomposición espectral que en este caso se obtiene usando la transformada de Fourier definida en $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$. Sabemos que \mathcal{F} nos define un isomorfismo isométrico de $L^2(\mathbb{R})$ en $L^2(\mathbb{R})$ y verifica

$$\mathcal{F}u' = 2\pi i\xi \mathcal{F}u,$$

de forma que transforma el operador derivación en el operador multiplicación por $2\pi i\xi$. Esto significa que tomando $\bar{\mathcal{F}}$ la transformada de Fourier inversa sobre $\mathcal{S}'(\mathbb{R})$, tenemos

$$p = 2\pi\hbar \bar{\mathcal{F}}x\mathcal{F}. \quad (4.2.1)$$

De esta forma se tiene

$$pu = 2\pi\hbar \int_{\mathbb{R}} \lambda d(\bar{\mathcal{F}}E_x(\lambda)\mathcal{F}u),$$

donde $\bar{\mathcal{F}}E_x(\lambda)\mathcal{F}$ es una familia de operadores de proyección gracias a que \mathcal{F} es una isometría en $L^2(\mathbb{R})$.

Como en el caso de la posición podemos encontrar una familia de estados asociados usando un espacio más general que $L^2(\mathbb{R})$, aunque no es muy claro en qué sentido se tiene entonces la resolución espectral. Concretamente observar que tomando por ejemplo $p : W^{1,\infty}(\mathbb{R}) \subset L^\infty(\mathbb{R}) \rightarrow L^\infty(\mathbb{R})$ (la transformada de Fourier aplica el espacio de medidas en $L^\infty(\mathbb{R})$) tenemos

$$pu = \lambda u \iff -i\hbar u' = \lambda u \iff u = ce^{i\frac{\lambda x}{\hbar}},$$

con c real, i.e. ahora todos los valores $\lambda \in \mathbb{R}$ son autovalores y el espacio de autofunciones correspondiente tiene dimensión uno. Teniendo en cuenta (4.2.1), los estados $ce^{i\frac{\lambda x}{\hbar}}$ asociados al operador

impulso se pueden también encontrar a partir de los estados asociados al operador posición. Más concretamente se tiene

$$\overline{\mathcal{F}}(\delta_{\{\frac{\lambda\hbar}{2\pi}\}}) = e^{i\frac{\lambda x}{\hbar}}.$$

Así una aproximación de $e^{i\frac{\lambda x}{\hbar}}$ en el sentido de las distribuciones (más concretamente en $L^\infty(\mathbb{R})$ dotado de la convergencia *-débil) vendrá dada por

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{F}}\left(\frac{1}{\varepsilon\sqrt{\pi}}e^{-\frac{|\xi-\frac{\lambda\hbar}{2\pi}|^2}{\varepsilon^2}}\right) &= e^{-\pi^2\varepsilon^2x^2}e^{i\frac{\lambda x}{\hbar}} \xrightarrow{*} e^{i\frac{\lambda x}{\hbar}} \text{ en } \mathcal{D}'(\mathbb{R}), \\ M_p\left(e^{-\pi^2\varepsilon^2x^2}e^{i\frac{\lambda x}{\hbar}}\right) &= \lambda, \quad V_p\left(e^{-\pi^2\varepsilon^2x^2}e^{i\frac{\lambda x}{\hbar}}\right) = \frac{\pi\sqrt{\pi}\varepsilon}{\sqrt{2}\hbar^2}. \end{aligned}$$

Principio de incertidumbre. Al menos en el espacio de distribuciones, podemos realizar las composiciones px y xp que llevan a

$$xpu = -xi\hbar u', \quad pxu = -i\hbar xu' - i\hbar u,$$

de forma que $xp - px = i\hbar$. Al no conmutar estos operadores debemos esperar que no podemos conocer de forma aproximada a la vez los valores de la posición y el espacio. Una aplicación inmediata del Teorema 4.1.5 prueba de hecho el siguiente resultado

Teorema 4.2.1. (*Principio de incertidumbre de Heisenberg*) Para toda $u \in D(x) \cap D(p)$ con norma uno, se tiene

$$\frac{\hbar^2}{4} \leq \text{Var}_x(u)\text{Var}_p(u). \quad (4.2.2)$$

Operador momento angular en todo el espacio. Como en los casos anteriores, nos limitamos al caso de una sola partícula. Un cálculo directo permite establecer las reglas de conmutación entre las distintas componentes del operador momento, así como entre estas componentes y las de la posición y la impulsión (ver e.g. [5]). Así por ejemplo se comprueban las siguientes reglas de conmutación entre las componentes del momento L

$$L_yL_z - L_zL_y = i\hbar L_x, \quad L_zL_x - L_xL_z = i\hbar L_y, \quad L_xL_y - L_yL_x = i\hbar L_z. \quad (4.2.3)$$

En general éstas no conmutan, por lo que en particular y desde un punto de vista físico no podemos darle un valor exacto a cada una de esas componentes, ya que conocer con mucha precisión una

de ellas supone que la varianza del resto aumenta considerablemente (recordar el Teorema 4.1.5). Sin embargo, sí que se puede demostrar que el operador módulo al cuadrado del momento angular dado por

$$\mathbb{L} = (-i\hbar\vec{r} \times \nabla) \cdot (-i\hbar\vec{r} \times \nabla), \quad \vec{r} = (x, y, z),$$

conmuta con las tres componentes. De esta forma en principio se pueden conocer simultáneamente una componente particular y el cuadrado del módulo del momento angular total. Vamos a estudiar la descomposición espectral asociada a estos operadores, para lo cual introducimos coordenadas esféricas y consideramos como componente particular del momento angular la correspondiente al eje OZ .

$$x = r \operatorname{sen} \theta \cos \phi, \quad y = r \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi, \quad z = r \cos \theta, \quad r \in (0, \infty), \quad \theta \in (0, \pi), \quad \phi \in (0, 2\pi).$$

El vector gradiente en esféricas de una función u viene dado por

$$\nabla u = \partial_r u e_r + \frac{1}{r} \partial_\theta u e_\theta + \frac{1}{r \operatorname{sen} \theta} \partial_\phi u e_\phi,$$

con $\{e_r, e_\theta, e_\phi\}$ la base ortonormal de \mathbb{R}^3 , bien orientada, dada por

$$e_r = (\operatorname{sen} \theta \cos \phi, \operatorname{sen} \theta \operatorname{sen} \phi, \cos \theta), \quad e_\theta = (\cos \theta \cos \phi, \cos \theta \operatorname{sen} \phi, -\operatorname{sen} \theta)$$

$$e_\phi = (-\operatorname{sen} \phi, \cos \phi, 0).$$

Por tanto en esféricas se tiene

$$Lu = -i\hbar r (e_r \times \nabla)u = -i\hbar \left(\partial_\theta u e_\phi - \frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \partial_\phi u e_\theta \right).$$

En particular la componente z de L viene dada por

$$L_z u = -i\hbar \partial_\phi u,$$

mientras que el operador módulo al cuadrado del momento angular viene dado por

$$\mathbb{L}u = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\operatorname{sen} \theta} \partial_\theta \left(\operatorname{sen} \theta \partial_\theta u \right) + \frac{1}{\operatorname{sen}^2 \theta} \partial_\phi^2 u \right].$$

Vamos a estudiar la descomposición espectral de ambos operadores.

Descomposición del operador L_z . El operador sólo depende de la variable ϕ así que lo podemos estudiar como un problema unidimensional. Por otra parte teniendo en cuenta que ángulos que se diferencian 2π corresponden a la misma posición debemos considerar condiciones de periodicidad. Por tanto consideramos L_z como un operador en

$$L_z^2(0, 2\pi) = \{u \in L_{loc}^2(\mathbb{R}) : u(\phi + 2\pi) = u(\phi) \text{ e.c.t } \mathbb{R}\}.$$

Mencionar que la norma en este espacio coincide con la norma en $L^2(0, 2\pi)$. El dominio del operador es

$$D(L_z) = \{u \in L_z^2(0, 2\pi) : u' \in L_z^2(0, 2\pi)\} := H_z^1(0, 2\pi),$$

y como el problema es en una sola variable, tomaremos

$$L_z u = -i\hbar \frac{du}{d\phi}.$$

Para $\lambda \in \mathbb{R}$ nos planteamos la biyectividad del operador $L_z + \lambda I$, para lo que tenemos que resolver el problema

$$-i\hbar \frac{du}{d\phi} + \lambda u = f \text{ en } (0, 2\pi) \quad u(0) = u(2\pi).$$

Se trata de un problema de contorno para una ecuación lineal que sabemos tiene solución única si y sólo si el problema homogéneo tiene solución nula. Las soluciones de la EDO homogénea vienen dadas por

$$u = C e^{-i\frac{\lambda}{\hbar}\phi}.$$

Si buscamos soluciones no nulas, la condición $u(0) = u(2\pi)$ implica $\lambda = m\hbar$ con $m \in \mathbb{Z}$, luego si λ no es de esta forma el operador $(L_z + \lambda I)^{-1}$ es biyectivo de $L_z^2(0, 2\pi)$ en $H_z^1(0, 2\pi)$ y es inmediato probar que es continuo. Gracias a la compacidad de la inyección de $H_z^1(0, 2\pi)$ en $L_z^2(0, 2\pi)$ se deduce que fijado λ_0 que no sea de la forma $m\hbar$ el operador $(L_z + \lambda_0 I)^{-1}$ tiene una cantidad numerable de autovalores que tienden a cero y los espacios de autofunciones correspondientes proporcionan una descomposición espectral de este operador. Como consecuencia el operador L_z tiene una cantidad numerable de autovalores que tienden a infinito (como ya habíamos comprobado) y los espacios de autofunciones correspondientes proporcionan una descomposición del operador.

Esto prueba que se tiene la siguiente descomposición espectral, que no es otra que la descomposición clásica en Fourier de una función periódica. Las sumas son en el espacio $L^2_{\#}(0, 2\pi)$

$$u(\phi) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(s) e^{-ims} ds \right) e^{im\phi}, \quad \forall u \in L^2_{\#}(0, 2\pi).$$

$$(L_z u)(\phi) = \sum_{m \in \mathbb{Z}} m\hbar \left(\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(s) e^{-ims} ds \right) e^{im\phi}, \quad \forall u \in H^1_{\#}(0, 2\pi).$$

Los valores espectrales son de la forma $m\hbar$, con $m \in \mathbb{Z}$. Como ya sabemos, estos son los únicos valores que puede tomar la componente z del momento angular. Se trata por tanto de una magnitud física que sólo toma un conjunto discreto de valores contrariamente a lo que ocurre en Mecánica Clásica. Evidentemente, el resultado obtenido es en realidad válido para cualquier componente de momento angular.

Descomposición del operador \mathbb{L} . En este caso el operador depende de las variables θ y ϕ donde como antes hay condiciones de periodicidad en $\phi \in (0, 2\pi)$, pero no en $\theta \in (0, \pi)$. Para descomponer \mathbb{L} , escribimos una función de $L^2((0, \pi); L^2_{\#}(0, 2\pi))$ como

$$u = \sum_{m \in \mathbb{Z}} u_m(\theta) e^{im\phi},$$

con

$$u_m(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} u(\theta, s) e^{-ims} ds.$$

En este caso

$$\mathbb{L}u + \lambda u = \sum_{m \in \mathbb{Z}} \left(-\frac{\hbar^2}{\text{sen } \theta} \partial_{\theta} (\text{sen } \theta \partial_{\theta} u_m) + \frac{m^2 \hbar^2}{\text{sen}^2 \theta} u_m + \lambda u_m \right) e^{im\phi}.$$

El problema es entonces obtener una descomposición espectral para cada $m \in \mathbb{Z}$ del operador

$$u \mapsto -\frac{1}{\text{sen } \theta} \partial_{\theta} (\text{sen } \theta \partial_{\theta} u) + \frac{m^2}{\text{sen}^2 \theta} u.$$

Este operador es bien conocido ya anteriormente a la Mecánica Cuántica pues aparece por ejemplo en la descomposición espectral del laplaciano en una bola con condiciones de Dirichlet. Haciendo el cambio de variables $\cos \theta = t$ que convierte $(0, \pi)$ en $(-1, 1)$ y el operador anterior en

$$\mathbb{P}_m : u \mapsto -\frac{d}{dt} \left((1-t^2) \frac{du}{dt} \right) + \frac{m^2}{1-t^2} u,$$

cuyo dominio vendrá dado por

$$D(\mathbb{P}_0) = \left\{ u \in L^2(-1, 1) : \sqrt{1-t^2} \frac{du}{dt} \in L^2(-1, 1) \right\},$$

$$D(\mathbb{P}_m) = \left\{ u \in L^2(-1, 1) : \frac{1}{\sqrt{1-t^2}} u \in L^2(-1, 1), \quad \sqrt{1-t^2} \frac{du}{dt} \in L^2(-1, 1) \right\} \text{ si } m \neq 0,$$

Usando el Teorema de Lax-Milgram tenemos que para todo $\lambda > 0$, $\mathbb{P}_m + \lambda I$ es biyectivo. Por otra parte se comprueba que estos espacios se inyectan de forma continua en $L^2(-1, 1)$, lo cual es consecuencia de la desigualdad de tipo Hardy

$$\int_{-1}^1 \frac{v^2}{(1-t^2) \log^2(1-t^2)} dt \leq C \int_{-1}^1 (1-t^2) |v'|^2 dt + C \left| \int_{-1}^1 v dt \right|^2, \quad \forall v \in D(\mathbb{P}_0),$$

la cual no es difícil de probar. Esto implica que para todo $m \in \mathbb{Z}$, existen una cantidad numerable de autovalores que se pueden tomar crecientes y tendiendo a infinito. Las autofunciones correspondientes proporcionan una base de $L^2(-1, 1)$ que deshaciendo el cambio de variables proporcionan la descomposición espectral del \mathbb{L} . Estas autofunciones son los polinomios de Legendre que para cada m fijo se suelen denotar como P_l^m . En el caso $m = 0$ se trata de los polinomios de Legendre clásicos, i.e. la familia de polinomios ortogonales relativa al producto escalar usual en $L^2(-1, 1)$. Se suelen denotar por P_l en lugar de P_l^0 y son tales que P_l^0 tiene grado l .

Las familias de polinomios se pueden obtener mediante la fórmula de Rodrigues que se escribe (estas son las fórmulas clásicas aunque con esta elección no tienen norma uno)

$$P_l(t) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dt^l} (t^2 - 1)^l, \quad \forall l \in \mathbb{Z}, l \geq 0$$

$$P_l^m(t) = (1-t^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{dt^{|m|}} P_l(t), \quad \forall |m| \leq l.$$

Como los polinomios P_l generan todos los polinomios, es inmediato que son una familia completa y en particular prueba otra vez las propiedades de compacidad del operador \mathbb{P}_0 comentadas anteriormente. A partir de ello podemos comprobar también que la familia $\{P_l^m\}_l$ es completa. Observar que aunque se hable de polinomios, en realidad la familia P_l^m no está formada por polinomios para m impar.

Un razonamiento por inducción prueba que los polinomios P_l^m verifican

$$-\frac{d}{dt} \left((1-t^2) \frac{dP_l^m}{dt} \right) + \frac{m^2}{1-t^2} P_l^m = l(l+1) P_l^m, \quad \forall l, m \in \mathbb{Z}, l \geq |m|.$$

Volviendo al operador \mathbb{L} , esto prueba que sus autovalores están dados por

$$\{l(l+1)\hbar^2 : l \in \mathbb{Z}, l \geq 0\}. \quad (4.2.4)$$

Para cada l , una base del espacio de autofunciones viene dada por los llamados (salvo constante multiplicativa) armónicos esféricos

$$\{Y_l^m(\theta, \phi) = P_l^m(\cos \theta)e^{im\phi} : m \in \mathbb{Z}, |m| \leq l\}. \quad (4.2.5)$$

En particular la dimensión del espacio de autofunciones es $2l + 1$.

4.3. Descomposición espectral del Hamiltoniano. Aplicaciones clásicas

Como hemos visto la ecuación de Schrödinger nos describe el movimiento de un sistema en Mecánica Cuántica, los autovalores de este operador corresponden a los distintos valores que puede tomar la energía (operador Hamiltoniano) del sistema y las autofunciones correspondientes (en el caso de la existencia de una descomposición por autofunciones) se conocen como los estados del sistema. En esta sección vamos a establecer un par de resultados generales referentes a la descomposición espectral de este operador así como algunos ejemplos clásicos. Por simplificar consideramos el caso de una sola partícula. El operador de Schrödinger se escribe entonces

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(x),$$

Teorema 4.3.1. *Supongamos $U \in L^2(\mathbb{R}^N)$, $N \leq 3$, tal que*

$$\lim_{x \rightarrow \infty} U(x) = +\infty. \quad (4.3.1)$$

y consideremos el operador $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U$ en el espacio X definido como el cierre en $L^2(\mathbb{R}^N)$ del espacio

$$\tilde{D} = \{u \in H^2(\mathbb{R}^N) : \sqrt{U^+}u \in L^2(\mathbb{R}^N)\}.$$

entonces H tiene una cantidad numerable de autovalores que se pueden escribir como una sucesión creciente que tiende a $+\infty$. Los espacios de autofunciones correspondientes tienen dimensión finita

y extrayendo una base ortonormal en $L^2(\mathbb{R}^N)$ de cada espacio se tiene una base ortonormal del espacio X que proporciona una descomposición numerable de H .

Demostración. Vamos a probar que H se puede considerar como un operador continuo de \tilde{D} en \tilde{D}' , con \tilde{D} dotado del producto escalar

$$(u|v)_X = (u|v)_{H^1(\mathbb{R}^N)} + \int_{\mathbb{R}^N} U^+ u \bar{v} dx, \quad \forall u, v \in \tilde{D}.$$

El resultado es una consecuencia inmediata del siguiente resultado:

Existe $C > 0$ tal que para toda $u \in \tilde{D}$ se tiene

$$\int_{\mathbb{R}^N} U^- u^2 dx \leq \frac{\hbar^2}{4m} \int_{\mathbb{R}^N} |\nabla u|^2 dx + C \int_{\mathbb{R}^N} u^2 dx. \quad (4.3.2)$$

Para su demostración, tenemos en cuenta que gracias a 4.3.1 existe $M > 0$ tal que U^- se anula e.c.t. $\{|x| > M\}$. Por otra parte la inyección compacta de $H^1(\{|x| < M\})$ en $L^4(\{|x| < M\})$ implica que para todo $\varepsilon > 0$ existe $C_\varepsilon > 0$ tal que

$$\|u\|_{L^4(\{|x| < M\})}^2 \leq \varepsilon \|\nabla u\|_{L^2(\{|x| < M\})}^2 + C_\varepsilon \|u\|_{L^2(\{|x| < M\})}^2$$

y por tanto

$$\begin{aligned} \int_{\{|x| < M\}} U^- u^2 dx &\leq \|U^-\|_{L^2(\{|x| < M\})} \|u\|_{L^4(\{|x| < M\})}^2 \\ &\leq \varepsilon \|U^-\|_{L^2(\mathbb{R}^N)} \|\nabla u\|_{L^2(\{|x| < M\})}^2 + C_\varepsilon \|U^-\|_{L^2(\mathbb{R}^N)} \|u\|_{L^2(\{|x| < M\})}^2, \end{aligned}$$

lo que junto a $U^-(x) = 0$ e.c.t. si $|x| > M$, prueba (4.3.2).

Gracias a (4.3.2), se tiene también para $\lambda \in \mathbb{R}$ y $u \in \tilde{D}$

$$\begin{aligned} \langle (H + \lambda I)u, u \rangle &= \int_{\mathbb{R}^N} \left(\frac{\hbar^2}{2m} |\nabla u|^2 + (U^+ - U^- + \lambda)u^2 \right) dx \\ &\geq \int_{\mathbb{R}^N} \left(\frac{\hbar^2}{4m} |\nabla u|^2 + (U^+ + \lambda - C)u^2 \right) dx. \end{aligned}$$

Esto prueba la coercitividad de H para $\lambda > C$ con lo que podemos aplicar el teorema de Lax-Milgram para probar que $H + \lambda I$ es biyectivo y continuo con inversa continua de \tilde{D}' en \tilde{D} . En particular, gracias a la continuidad de la inyección de $L^2(\mathbb{R}^N)$ en \tilde{D}' , se tiene que $(H + \lambda I)^{-1}$ es continua de $L^2(\mathbb{R}^N)$ en \tilde{D} . Por tanto $-\lambda$ no pertenece al espectro de H .

Vamos a probar que \tilde{D} se inyecta de forma compacta en $L^2(\mathbb{R}^N)$ con lo que por composición $(H + \lambda I)^{-1}$ será un operador compacto. Para probar esta afirmación sea u_n tal que $\|u_n\|_{\tilde{D}} \leq 1$. Gracias a la inyección compacta de $H^1(\mathbb{R}^N)$ en los subconjuntos compactos de $L^2(K)$ para todo $K \subset \mathbb{R}^N$ compacto, podemos extraer una subsucesión de u_n , que seguimos notando por u_n para simplificar, la cual converge a una función u en $L^2_{loc}(\mathbb{R}^N)$. Teniendo en cuenta que u_n está acotada en $L^2(\mathbb{R}^N)$, el Lema de Fatou implica que u pertenece a $L^2(\mathbb{R}^N)$. Vamos a probar que la convergencia es fuerte en este espacio. Para ello sea $\varepsilon > 0$. Gracias a la afirmación en (4.3.1), existe $R > 0$ tal que si $|x| > R$ entonces $U > 4/\varepsilon$ y por tanto

$$\int_{\{|x|>R\}} u_n^2 dx \leq \frac{\varepsilon}{4} \int_{\mathbb{R}^N} U u_n^2 dx \leq \frac{\varepsilon}{4}.$$

Por el Lema de Fatou tenemos también

$$\int_{\{|x|>R\}} u^2 dx \leq \frac{\varepsilon}{4}$$

y por tanto

$$\int_{\{|x|>R\}} |u - u_n|^2 dx \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

Por otra parte, la convergencia de u_n a u en $L^2(\{|x| < R\})$ prueba que existe $n_0 \in \mathbb{N}$ tal que para todo $n \geq n_0$ se tiene

$$\int_{\{|x|<R\}} |u - u_n|^2 dx \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

Tenemos por tanto

$$\int_{\mathbb{R}^N} |u_n - u|^2 dx \leq \varepsilon, \quad \forall \varepsilon > 0.$$

La compacidad de $(H + \lambda I)^{-1}$ prueba entonces la tesis del teorema. \square

Para probar el otro resultado sobre la estructura de H vamos a considerar ahora el caso de una partícula libre en el espacio, i.e. $U = 0$.

Teorema 4.3.2. *En el caso $U = 0$ el espectro del operador H coincide con su espectro esencial y está formado por $[0, \infty)$. Definiendo para $\lambda \geq 0$, $E(\lambda)$ como el operador en $L^2(\mathbb{R}^N)$ dado por*

$$(E(\lambda)\varphi)(x) = \begin{cases} \varphi(x) & \text{si } |x|^2 < \lambda \\ 0 & \text{si } |x|^2 > \lambda, \end{cases}$$

se tiene que los operadores $E(\lambda)$ proporcionan una familia espectral en $L^2(\mathbb{R}^N)$. El operador H se descompone como

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(2\pi i)^2 \int_{[0, \infty)} \lambda d(\overline{\mathcal{F}}E(\lambda)\mathcal{F}).$$

El dominio de H coincide con el espacio $H^2(\mathbb{R}^N)$.

Demostración. Basta usar que la transformada de Fourier verifica

$$\mathcal{F}\Delta u = (2\pi i)^2 |x|^2 \mathcal{F}u$$

y por tanto transforma el laplaciano en el operador posición multiplicado por $|x|^2$. El resultado referente a la descomposición espectral es entonces similar al obtenido para el operador impulso. Respecto al dominio del operador, coincide con el espacio de funciones de $L^2(\mathbb{R}^N)$ tales que su transformada de Fourier verifica

$$\int_{\mathbb{R}^N} |x|^4 |\mathcal{F}u|^2 dx < \infty,$$

lo que es equivalente a decir que las derivadas segundas de u se encuentran en $L^2(\mathbb{R}^N)$, junto con $u \in L^2(\mathbb{R}^N)$ esto significa que u pertenece a $H^2(\mathbb{R}^N)$. \square

Como consecuencia tenemos

Teorema 4.3.3. *Supongamos $U \in L^2(\mathbb{R}^N)$, $N \leq 3$*

$$\lim_{x \rightarrow \infty} U(x) = 0. \quad (4.3.3)$$

entonces el dominio de H contiene a $H^2(\mathbb{R}^N)$. El espectro esencial de H como operador en $L^2(\mathbb{R}^N)$ es $[0, \infty)$. Los valores espectrales negativos de H corresponden a una cantidad a lo más numerable de autovalores de multiplicidad finita igual a su codimensión.

Demostración. Teniendo en cuenta que para $N \leq 3$, $H^2(\mathbb{R}^N)$ se inyecta de forma compacta en $C^0(K)$ para todo $K \subset \mathbb{R}^N$ compacto junto con (4.3.3) es inmediato que $H^2(\mathbb{R}^N)$ está contenido en $D(U)$ y que si una sucesión u_n está acotada en $H^2(\mathbb{R}^N)$ entonces va a existir una subsucesión tal que Uu_n converge fuerte en $L^2(\mathbb{R}^N)$. Esto prueba que U es compacto respecto del operador laplaciano en \mathbb{R}^N . El resultado es entonces consecuencia de los Teoremas 3.1.26 y 4.3.2. \square

Observación 4.3.4. Teniendo en cuenta que si $\{E(\lambda)\}_\lambda$ es una descomposición espectral de H entonces $\{E(\lambda + \mu)\}_\lambda$ es una descomposición espectral de $H + \mu I$, tenemos que el resultado anterior se puede aplicar mediante una traslación al caso en que U tiene un límite finito en infinito no necesariamente nulo. Físicamente esto corresponde al hecho de que el potencial está definido salvo una constante aditiva.

Observación 4.3.5. Recordemos que en Mecánica Clásica la conservación de la energía mecánica junto con el hecho de que la energía cinética es no negativa implica que el movimiento de una partícula (similar para un sistema) se mantiene en un conjunto acotado del espacio cuando su energía E verifica

$$\liminf_{x \rightarrow \infty} U(x) > E.$$

En este sentido, en Mecánica Cuántica se dice que un estado está ligado cuando se verifica esta condición. Los Teoremas 4.3.1 y 4.3.3 corresponden a la afirmación que se suele hacer en Mecánica Cuántica de que los estados ligados son discretos. Observar que en el Teorema 4.3.1 todos los estados están ligados mientras que en las condiciones del Teorema 4.3.3, lo están aquellos que tienen energía negativa. Como veremos más adelante hay sin embargo que comentar que para un estado ligado en Mecánica Cuántica la probabilidad de que la partícula esté en zonas donde la energía potencial es mayor que su energía puede ser positiva.

Vamos a ver ahora algunos ejemplos clásicos en lo cuales podemos calcular los estados ligados.

Pozo de potencial infinito.

Suponemos el problema unidimensional por simplificar y

$$U(x) = \begin{cases} +\infty & \text{si } |x| > a \\ 0 & \text{si } |x| < a \end{cases} \quad a > 0.$$

Desde el punto de vista clásico significa que la partícula está obligada a permanecer en el intervalo $(-a, a)$. En este intervalo se mueve libremente, sin ninguna fuerza actuando sobre ella, sin embargo en las paredes aparece una fuerza repulsiva infinita que imposibilita que se puedan atravesar. Desde el punto de vista cuántico teniendo en cuenta que el cierre en $L^2(\mathbb{R})$ de las funciones u de $H^2(\mathbb{R})$

tales que $\sqrt{U}u$ es finito coincide con $H^2(\mathbb{R}) \cap H_0^1(-a, a)$ tenemos que el operador está definido en

$$\{u \in L^2(\mathbb{R}) : u = 0 \text{ en } \mathbb{R} \setminus (-a, a)\},$$

el cual podemos identificar con $L^2(-a, a)$. Como vemos las funciones de ondas correspondientes son nulas fuera de $(-a, a)$ y por tanto, análogamente al caso clásico, la probabilidad de que una partícula esté fuera de este intervalo es nula. Por el Teorema 4.3.1 sabemos que existen una cantidad numerable de autovalores que tienden a $+\infty$ y una base numerable ortonormal de autofunciones asociadas. En este caso los autovalores son las soluciones de

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m}u'' = Eu & \text{en } (-a, a) \\ u(-a) = u(a) = 0 \end{cases}$$

que fácilmente se prueba coinciden con

$$\left\{n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} : n \geq 1\right\} \cup \left\{\left(\frac{1}{2} + n\right)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2} : n \geq 0\right\}.$$

Estos autovalores tienen multiplicidad uno y una base ortonormal de autofunciones asociada está compuesta por

$$u_n = \sin\left(\frac{n\pi}{a}x\right) \text{ si } E_n = n^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}, \quad u_n = \cos\left(\left(\frac{1}{2} + n\right)\frac{\pi}{a}x\right) \text{ si } E_n = \left(\frac{1}{2} + n\right)^2 \frac{\pi^2 \hbar^2}{2ma^2}.$$

Pozo de potencial finito.

Consideramos ahora un caso relacionado con el anterior donde U está dada por

$$U(x) = \begin{cases} 0 & \text{si } |x| > \alpha \\ -L & \text{si } |x| < \alpha, \end{cases}$$

con $L, \alpha > 0$. Desde el punto de vista clásico, usando la teoría de distribuciones, la fuerza vendría dada por $L\delta_{\{-\alpha\}} - L\delta_{\{\alpha\}}$, i.e. aparecen fuerzas solamente en los extremos del intervalo $(-\alpha, \alpha)$ en la dirección de este intervalo, Una partícula con energía negativa está obligada a permanecer en el intervalo sin embargo si tiene energía positiva puede moverse en toda la recta aunque sufrirá cambios en su velocidad al cruzar las paredes del potencial. En el caso particular de que tenga energía nula la partícula pueda estar fuera de $(-\alpha, \alpha)$ pero entonces su velocidad será nula.

Consideremos el caso cuántico. Gracias al Teorema 4.3.3, sabemos que el espectro es discreto y está formado por autovalores con multiplicidad finita para valores negativos. Sin embargo todos los valores no negativos forman parte del espectro esencial.

Vamos a estudiar el espectro discreto, i.e. nos interesamos en la existencia de soluciones no nulas del problema

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + L(\chi_{\{|x|>\alpha\}} - 1)u = Eu, \quad u \in H^2(\mathbb{R})$$

con $E < 0$. Multiplicando por u solución e integrando tenemos

$$\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\mathbb{R}} |u'|^2 dx - L \int_{-\alpha}^{\alpha} |u|^2 dx = E \int_{\mathbb{R}} |u|^2,$$

lo que va a implicar

$$-L < E. \tag{4.3.4}$$

Esto es coherente con la situación clásica, no puede haber valores de la energía menores que $-L$ que es el valor mínimo del potencial.

Para obtener los autovalores observamos primero que si u es solución entonces la función $x \rightarrow u(-x)$ también es solución y por tanto las funciones $u(x) + u(-x)$ y $u(x) - u(-x)$ son también soluciones y se verifica

$$u(x) = \frac{u(x) + u(-x)}{2} + \frac{u(x) - u(-x)}{2}$$

de forma que podemos buscar las soluciones como funciones pares o impares.

Soluciones pares. La función u verifica las ecuaciones

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' = Eu \quad \text{en } (-\infty, -\alpha) \cup (\alpha, \infty), \quad -\frac{\hbar^2}{2m}u'' - Lu = Eu \quad \text{en } (-\alpha, \alpha).$$

Como u pertenece a $H^2(\mathbb{R})$ y es par, existe $c \in \mathbb{C}$ tal que

$$u(x) = ce^{\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x} \quad \text{en } (-\infty, -\alpha), \quad u(x) = ce^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x} \quad \text{en } (\alpha, \infty).$$

Además existe $a \in \mathbb{C}$, tal que

$$u(x) = a \cos\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}x\right) \quad \text{en } (-\alpha, \alpha).$$

Estas constantes debe tomarse de forma que tanto u como su derivada sean continuas lo que implica

$$\begin{aligned} a \cos\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}\alpha\right) &= ce^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\alpha}, \\ -\sqrt{2m(L+E)} a \sin\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}\alpha\right) &= -\sqrt{-2mE}ce^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\alpha}. \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

Por tanto los autovalores (niveles de energía) negativos correspondientes a autofunciones pares están dados como las soluciones de

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}\alpha\right) = \sqrt{-\frac{E}{L+E}}, \quad -L < E < 0.$$

Análogamente, los niveles de energía correspondientes a autofunciones impares son solución de

$$\tan\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}\alpha\right) = -\sqrt{-\frac{L+E}{E}}, \quad -L < E < 0.$$

y las autofunciones correspondiente deben verificar que existe $c \in \mathbb{C}$ con

$$u(x) = -ce^{\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x} \text{ en } (-\infty, -\alpha), \quad u(x) = ce^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}x} \text{ en } (\alpha, \infty).$$

Además existe $a \in \mathbb{C}$, tal que

$$u(x) = a \sin\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}x\right) \text{ en } (-\alpha, \alpha).$$

con

$$\begin{aligned} a \sin\left(\frac{\sqrt{2m(L+E)}}{\hbar}\alpha\right) &= ce^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\alpha}, \\ \sqrt{2m(L+E)} a \cos\left(\frac{\sqrt{L+E}}{\hbar}\alpha\right) &= -\sqrt{-2mE}ce^{-\frac{\sqrt{-2mE}}{\hbar}\alpha}. \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

Las condiciones (4.3.5) y (4.3.6) muestran que la constante c no puede ser nula y por tanto estas autofunciones u no se anulan para $|x| > \alpha$. En particular esto significa que la probabilidad P de que la partícula se encuentre en el conjunto $\{|x| > \alpha\}$ verifica

$$P = \frac{\int_{\{|x|>\alpha\}} |u_n|^2 dx}{\int_{\mathbb{R}} |u_n|^2 dx} > 0.$$

Recordar sin embargo que estas autofunciones son los estados asociados a los niveles de energía negativos, i.e. son las únicas funciones de onda para las cuales podemos asegurar que la energía de

la partícula está efectivamente dada por E . Por tanto a diferencia del caso clásico una partícula con energía negativa puede cruzar el pozo de potencial.

Oscilatorio armónico.

Es el ejemplo más clásico de pozo de potencial y corresponde a la función

$$U(x) = \frac{k}{2}x^2, \quad \forall x \in \mathbb{R}$$

con k una constante positiva. Es la energía potencial que se suele asociar a un muelle elástico siendo $x = 0$ la posición de equilibrio. Más generalmente aparece al usar una aproximación de Taylor de una función V en \mathbb{R} cerca de un mínimo estricto. Concretamente suponiendo $V(0) = 0$, $V(x) \geq 0$ en un entorno de cero y $V''(0) \neq 0$, tenemos

$$V(x) \sim \frac{V''(0)}{2}x^2 \quad \text{si } x \sim 0,$$

con $V''(0) > 0$. El operador Hamiltoniano para este potencial se escribe

$$Hu = -\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \frac{k}{2}x^2u.$$

Como H tiende a infinito en infinito, se puede aplicar el Teorema 4.3.1 de forma que sabemos que existen una cantidad numerable de autovalores que tiende a $+\infty$ y una base ortonormal formada por autofunciones.

Queremos obtener soluciones no nulas de la ecuación

$$-\frac{\hbar^2}{2m}u'' + \frac{k}{2}x^2u = au$$

con $u \in L^2(\mathbb{R})$, $a \in \mathbb{R}$. Efectuamos el cambio de variables

$$v(y) = e^{\frac{y^2}{2}}u(\alpha y) \iff u(x) = e^{-\frac{x^2}{2\alpha^2}}v\left(\frac{x}{\alpha}\right)$$

con $\alpha > 0$ a determinar, lo que transforma la ecuación en

$$-\frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}v'' + \hbar^2 \frac{y}{m\alpha^2}v' + \left(\frac{k\alpha^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}\right)y^2v = \left(a - \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2}\right)v.$$

Tomamos entonces α tal que

$$\frac{k\alpha^2}{2} - \frac{\hbar^2}{2m\alpha^2} = 0 \iff \alpha^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{mk}},$$

lo que transforma la ecuación en

$$-v'' + 2yv' = \left(\frac{2a}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} - 1 \right) v$$

de forma que el problema es encontrar los autovalores del problema

$$-v'' + 2yv' = \lambda v, \quad e^{-\frac{y^2}{2}} v \in L^2(\mathbb{R}). \quad (4.3.7)$$

Este problema es bien conocido. Las autofunciones correspondientes son los polinomios de Hermite H_n , i.e. la familia de polinomios ortogonales respecto al producto escalar

$$(u, v) \rightarrow \int_{\mathbb{R}} e^{-y^2} uv \, dy.$$

Concretamente se suele definir H_n (como autofunciones están definidos salvo una constante multiplicativa) a partir de la fórmula de Rodrigues:

$$H_n(y) = (-1)^n e^{y^2} \frac{d^n}{dy^n} e^{-y^2}.$$

los cuales verifican

$$-H_n'' + 2yH_n' = 2nH_n \quad \int_{\mathbb{R}} e^{-y^2} H_n^2 dy = \sqrt{\pi} 2^n n!.$$

Esto significa que los autovalores de (4.3.7) están dados por $\lambda_n = 2n$ y las autofunciones correspondientes los polinomios de Hermite. Deshaciendo el cambio de variable, tenemos que los autovalores del oscilador armónico (niveles de energía) vienen dados por

$$\frac{2a_n}{\hbar} \sqrt{\frac{m}{k}} - 1 = 2n \Rightarrow a_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar \sqrt{\frac{k}{m}}.$$

Introduciendo la frecuencia angular del movimiento como $w = \sqrt{\frac{k}{m}}$, entonces obtenemos las energías propias del sistema expresadas por

$$a_n = \left(\frac{1}{2} + n \right) \hbar w$$

Los espacios de autovalores correspondientes tienen dimensión uno. Una familia ortonormal de autofunciones asociada está dada por

$$u_n(x) = \sqrt{\frac{mk}{(2^n n!)^4 (\pi \hbar)^2}} e^{-\frac{\sqrt{mk}}{2\hbar} x^2} H_n \left(\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}} x \right).$$

Sistema de dos partículas.

Consideramos el problema de la interacción entre dos partículas, suponiendo que la energía potencial de interacción entre ambas partículas sólo depende de la distancia entre ellas, $U = U(|x_1 - x_2|)$.

El operador de Schrödinger correspondiente es el operador en $L^2(\mathbb{R}^3 \times \mathbb{R}^3)$ definido por

$$u \mapsto -\frac{\hbar^2}{2m_1}\Delta_{x_1}u - \frac{\hbar^2}{2m_2}\Delta_{x_2}u + U(|x_1 - x_2|)u.$$

Como es usual en Mecánica Clásica al estudiar la interacción entre dos partículas, introducimos las nuevas variables

$$x_c = \frac{m_1x_1 + m_2x_2}{m_1 + m_2}, \quad x = x_2 - x_1,$$

que se corresponden respectivamente con el centro de masas de ambas partículas y el vector que une x_1 con x_2 (el cual da la posición de x_2 respecto de x_1).

En estas nuevas variables el operador se escribe ($v(x_c, x) = u(x_1, x_2)$)

$$v \mapsto -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{x_c}v - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_xv + U(|x|)v,$$

siendo

$$M = m_1 + m_2, \quad \mu = \left(\frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2}\right)^{-1},$$

la masa total de las partículas y la masa reducida respectivamente. Como los operadores

$$v \mapsto -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta_{x_c}v, \quad v \mapsto -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_xv + U(|x|)v$$

dependen de variables independientes entre sí. La descomposición del operador se reduce a calcular la descomposición de cada uno de ellos y luego sumar.

Respecto a la variable variable x_c nos encontraremos con una partícula de masa m que se mueve libremente. La descomposición viene dada por el Teorema 4.3.2. En la variable x tenemos una partícula de masa μ que se mueve bajo un potencial $U(|x|)$. El resultado es similar al clásico. El centro de masas se mueve libremente (lo cual es equivalente a la conservación del impulso) y la partícula x_2 se mueve respecto de x_1 como una partícula de masa μ sujeta a la fuerza derivada del potencial U .

Con la observación anterior el problema es estudiar la descomposición espectral del operador

$$v \mapsto -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x v + U(|x|)v. \quad (4.3.8)$$

Usando que el potencial es invariante respecto de rotaciones se va a deducir la conmutatividad del operador momento angular con respecto a este Hamiltoniano, lo que equivale a su conservación. Recordar que desde el punto de vista clásico la forma de resolver el problema equivalente es usar la conservación de la energía y del momento angular. En el presente caso la idea es simplemente escribir el operador en esféricas lo que lleva al operador

$$\begin{aligned} v &\mapsto -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\partial_r(r^2\partial_r v) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2 \sin\theta}\partial_\theta(\sin\theta\partial_\theta v) - \frac{\hbar^2}{2\mu r^2 \sin^2\theta}\partial_{\phi\phi}^2 v + U(r)v \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2}\partial_r(r^2\partial_r v) + U(r)v + \frac{1}{2\mu r^2}\mathbb{L}v \end{aligned} \quad (4.3.9)$$

siendo \mathbb{L} el operador cuadrado del módulo del momento angular. En estas variables el operador H debe ser considerado como un operador en el espacio X de funciones $v = v(r, \theta, \phi) : (0, \infty) \times (0, \pi) \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{C}$ medible tales que u es periódica de periodo 2π respecto de ϕ y verifica

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \sin\theta v^2 dr d\theta d\phi < \infty,$$

el cual es un espacio de Hilbert con el producto escalar

$$(v|w) \rightarrow \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^\infty r^2 \sin\theta vw dr d\theta d\phi.$$

Para obtener una descomposición espectral de (4.3.9) usamos la descomposición del operador \mathbb{L} obtenida anteriormente que nos permite escribir una función v de X como

$$v = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l v_{ml}(r) P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \int_0^\infty r^2 |v_{lm}|^2 dr \int_{-1}^1 |P_l^m|^2 dt < \infty.$$

Usando esta descomposición, el operador \mathbb{L} se escribe

$$v \rightarrow \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \partial_r(r^2 \partial_r v_{lm}) + U(r) v_{lm} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} v_{lm} \right) P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}.$$

De esta forma el estudio de la descomposición espectral de H en el caso de un sistema de dos partículas se reduce a estudiar la descomposición espectral de los operadores

$$w \mapsto -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \partial_r(r^2 \partial_r w) + U(r)w + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} w,$$

en el espacio de funciones $w : (0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$ tales que

$$\int_0^{\infty} r^2 w^2 dr < \infty. \quad (4.3.10)$$

Físicamente se trata del operador de Schrödinger para una partícula de masa μ en $(0, \infty)$ sometida al potencial

$$V_l(r) = U(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2}.$$

El segundo término se conoce como energía centrífuga.

Interacción de Coulomb entre dos partículas con cargas de distinto signo.

Como caso particular del ejemplo anterior consideramos uno de los ejemplos clásicos más importantes en Mecánica Cuántica, el cual explica el modelo atómico de Bohr y se encuentra en la base de la construcción de la tabla periódica. Se trata en particular el caso de la interacción eléctrica entre dos partículas de distinto signo, el cual podemos modelar como

$$U(r) = -\frac{K}{r}, \quad K > 0 \quad (4.3.11)$$

con K una constante positiva que es proporcional al producto de las cargas. El caso más importante se refiere a la interacción entre el núcleo de un átomo y un electrón que orbita alrededor, donde

$$K = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0}$$

con Z el número atómico del elemento (= número de protones), e la carga del electrón y ϵ_0 la permitividad eléctrica en el vacío.

Nos interesamos en los valores discretos de la energía que por el Teorema 4.3.3 corresponden a energías negativas y que desde el punto de vista físico sabemos que se refieren a los estados ligados, así en el caso del átomo es la energía que tienen los electrones que no pueden escapar del campo generado por el núcleo de forma que deben orbitar a su alrededor.

El problema es por tanto estudiar los autovalores $E^l < 0$ del problema

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dw}{dr} \right) - \frac{K}{r} w + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} w &= E^l w \\ \iff -\frac{\hbar^2}{2\mu} w'' - \frac{\hbar^2}{\mu r} w' - \frac{K}{r} w + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu r^2} w &= E^l w. \end{aligned} \quad (4.3.12)$$

como operador en el espacio de funciones que verifican (4.3.10). Para resolver este problema se usa el cambio de variables

$$z(s) = (\beta s)^{-l} e^{\frac{s}{2}} w(\beta s) \iff w(r) = r^l z\left(\frac{r}{\beta}\right) e^{-\frac{r}{2\beta}}$$

con

$$\beta = \frac{\hbar}{2\sqrt{-2E^l\mu}}$$

que transforma la ecuación en

$$sz'' + (2(l+1) - s)z' + \left(\frac{K\sqrt{\mu}}{\hbar\sqrt{-2E^l}} - l - 1\right)z = 0, \quad (4.3.13)$$

la cual es un caso particular de la ecuación que genera los polinomios de Laguerre. Recordar que los polinomios de Laguerre originales $L_{n'}(x)$ con son la familia de polinomios ortogonales asociada al producto escalar para funciones medibles en $(0, \infty)$ definido por

$$(u, v) = \int_{\mathbb{R}} e^{-s} u(s)v(s) ds,$$

los cuales se suelen definir a partir de la fórmula de Rodrigues

$$L_{n'}(s) = \frac{e^s}{n'!} \frac{d^{n'}}{ds^{n'}} (s^{n'} e^{-s})$$

y son solución de la ecuación diferencial

$$sy''(s) + (1 - s)y'(s) + n'y = 0.$$

Más generalmente, se definen los polinomios de Laguerre generalizados $L_{n'}^m$, $n', m \in \mathbb{N}$, $m \leq n'$ por

$$L_{n'}^m(s) = \frac{e^s}{s^m} \frac{d^{n'}}{ds^{n'}} (e^{-s} s^{n'+m}),$$

que aparecen como la familia de polinomios ortogonales respecto al producto escalar

$$(u, v) = \int_{\mathbb{R}} s^m e^{-s} u(s)v(s) ds,$$

y que verifican la ecuación diferencial

$$sz'' + (m + 1 - s)z' + n'z = 0.$$

Volviendo al problema de autovalores (4.3.13) podemos aplicar este resultado con $m = 2l + 1$ para deducir que para cada $l \geq 0$ los autovalores $E_{n'}^l < 0$ de (4.3.12) vienen dados por

$$\frac{K\sqrt{\mu}}{\hbar\sqrt{-2E_{n'}^l}} - l - 1 = n' \Rightarrow E_{n'}^l = -\frac{K^2\mu}{2(n'+l+1)^2\hbar^2}.$$

y una autofunción viene dada por

$$w_{n'}^l(r) = r^l L_{n'}^{2l+1} \left(\frac{2\sqrt{-2E_{n'}^l\mu}}{\hbar} r \right) e^{-\frac{\sqrt{-2E_{n'}^l\mu}}{\hbar} r},$$

la cual claramente verifica

$$\int_0^\infty r^2 |w_{n'}^l|^2 dr < \infty.$$

Regresando al problema (4.3.8) con U dada por (4.3.11) deducimos que los niveles de energía discretos correspondientes a los estados ligados están dados por

$$E_n = -\frac{K^2\mu}{2n^2\hbar^2}, \quad \forall n \in \mathbb{Z}, \quad n > 0.$$

Vemos que cuando n tiende a infinito se acumulan en cero. Esto es coherente con el hecho de que el espectro esencial del Hamiltoniano es $[0, \infty)$. Una base de espacio de autofunciones (estados) asociados está dada por las funciones

$$r^l L_{n-l-1}^{2l+1} \left(\frac{2\sqrt{-2E_n\mu}}{\hbar} r \right) e^{-\frac{\sqrt{-2E_n\mu}}{\hbar} r} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi}, \quad m = -l, \dots, l, \quad l \leq n-1.$$

Por tanto tiene dimensión

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2.$$

El número n (especialmente en el caso del átomo) se llama número cuántico principal, el número l se llama número cuántico acimutal y m número cuántico magnético. Los valores de l se suelen representar por letras en lugar de enteros

$$0 \equiv s, \quad 1 \equiv p, \quad 2 \equiv d, \quad 3 \equiv f, \quad \dots$$

Recordar que l se relaciona con el cuadrado del módulo del momento angular mientras que m representa las orientaciones posibles del mismo.

4.4. Observaciones finales

Para terminar este trabajo, recordamos por completitud algunos aspectos importantes de la Mecánica Cuántica que no hemos considerado en la presente memoria y que pensamos que merecen al menos ser comentados.

Como ya comentamos al hablar del operador paridad, en Mecánica Cuántica aparecen ciertos operadores (magnitudes físicas) que no tienen contrapartida en Mecánica Clásica. Desde el punto de vista matemático sus efectos desaparecen al pasar al límite cuando \hbar tiende a cero. El más importante de estos operadores es el operador de espín. Una descripción más adecuada de este operador proviene de la Mecánica Cuántica Relativista o Electrodinámica Cuántica, la cual no abordamos en el siguiente trabajo. Desde el punto de vista de la Mecánica Cuántica no Relativista se comprueba que la energía y el momento no bastan para describir los distintos estados de un sistema lo que lleva a introducir el espín, que aparece como un momento “propio” distinto del momento angular y que no tiene que ver con los movimientos de la partícula respecto al espacio. Cada partícula o sistema de partículas que actúa como un todo (por ejemplo un núcleo atómico) tiene un espín determinado que notamos por S , pero similarmente al momento angular puede tener varias direcciones, que en el caso del momento angular venían reflejadas por los distintos valores que toma la componente z del momento (o cualquier otra componente ya que esto depende del sistema de referencia elegido). Más concretamente, recordamos que el cuadrado del módulo de un momento angular viene dado por $l(l+1)$, y su proyección L_z puede tomar los valores $-l, -l+1, \dots, l-1, l$. Similarmente siendo s el valor del espín, su proyección que podemos notar por s_z aunque no está ligada al espacio, varía por un número entero, siendo el valor mínimo $-s$ y el máximo s . Sin embargo, mientras que l es un número entero no negativo, s puede tomar, dependiendo del caso, valores enteros o semi-enteros $0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. De esta forma a una partícula con número de espín asociado s se le asignan tres operadores, s_x, s_y, s_z que verifican las mismas reglas de conmutación que los operadores l_x, l_y y l_z que mostramos en (4.2.3) y que definen el operador.

Consideremos el ejemplo simple pero muy importante de una partícula con espín $1/2$ como es el caso del electrón. Su proyección sobre un eje (por ejemplo el z) puede tomar dos valores $-1/2, 1/2$.

Como consecuencia su función de onda que en el trabajo hemos considerado una función escalar es en realidad una función vectorial con dos componentes que podemos notar como $u_1(t, x)$ y $u_2(t, x)$, que representarían las componentes con respecto a una base ortonormal de autovectores asociada al operador s_z . En general los operadores s_x , s_y y s_z serán aplicaciones lineales definidos por matrices 2×2 (matrices de Pauli) de tal forma que se verifican las mismas reglas de conmutación que las de los operadores l_x , l_y , l_z que indicamos en (4.2.3). Así en el caso de la partícula de espín 2 estas matrices están dadas por

$$s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

El resultado es similar para un espín s . La función de onda tendrá en general $2s + 1$ componentes.

El hecho de que la función de onda sea en realidad una función vectorial no invalida los resultados que hemos mostrado en el trabajo ya que el espín no interactúa con los operadores considerados y más particularmente con el campo eléctrico. Simplemente la ecuaciones deben aplicarse a cada componente. Sin embargo sí que interactúa por ejemplo con el campo magnético.

Otro punto importante en la teoría es el principio de indistinguibilidad. Como ya hemos comentado, en Mecánica Cuántica no podemos hablar de la posición de una partícula ya que sólo se conoce con una cierta probabilidad. Por tanto no tiene sentido hablar de trayectorias. Dos partículas se consideran idénticas si no solo son el mismo tipo de partícula sino que además tienen asignados los mismos valores cuánticos (energía, cuadrado del momento angular, proyección del momento angular y espín). Para estas partículas, el realizar una permutación entre ellas lleva a la misma situación física. Más concretamente lo que se supone es que si tenemos la función de onda de dos partículas $u(t, \xi_1, \xi_2)$ (ξ_i denota las tres coordenadas de la partícula junto con la proyección del espín) entonces existe $\alpha \in \mathbb{R}$ tal que

$$u(t, \xi_1, \xi_2) = e^{\alpha i} u(t, \xi_2, \xi_1),$$

lo cual no cambiaría las probabilidades de la posición impulso, etc. Usando

$$u(t, \xi_1, \xi_2) = e^{\alpha i} u(t, \xi_2, \xi_1) = e^{2\alpha i} u(t, \xi_1, \xi_2)$$

llegamos a que $\alpha = 0$ o $\alpha = \pi$. Esto significa que las funciones de onda correspondientes a un sistema de partículas idénticas son o bien simétricas o bien antisimétricas. Aquellas partículas correspondientes a funciones de onda simétricas se llaman bosones (obedecen a la estadística de Bose-Einstein) mientras que las correspondientes a funciones de onda antisimétricas se llaman fermiones (obedecen a la estadística de Fermi-Dirac). A partir de la Mecánica Cuántica Relativista se llega a la conclusión de que los bosones corresponden a partículas con espín entero y los fermiones semi-entero. Los resultados mencionados tienen una gran importancia en el campo de la Física Estadística donde es necesario contar el número de posibilidades que se presentan para un determinado número de partículas. Así en el caso de bosones todas las posibles permutaciones entre partículas idénticas deben ser consideradas como una única posibilidad. En el caso de los fermiones, al ser la función de onda antisimétrica se tiene que ésta se anula si hay partículas idénticas. Por tanto no es posible que dos partículas tengan los mismos estados cuánticos. Por ejemplo en el caso de un electrón en un átomo, para un mismo nivel n de energía, el cuadrado del momento angular podía tomar n valores ($l = 0, \dots, n - 1$) y para cada valor de l teníamos que la proyección del momento tomaba $2l + 1$ valores. Teniendo en cuenta además que el espín puede ser $1/2$ o $-1/2$ se deduce que a lo más hay $2n^2$ electrones con el mismo nivel de energía.

Bibliografía

- [1] H. Brézis. *Functional Analysis, Sobolev Spaces and Partial Differential Equations*. Springer 2011.
- [2] T. Kato. *Perturbation theory for linear operators*. Springer 1980.
- [3] *A panorama of harmonic analysis*. The Mathematical Association of America, (1999).
- [4] L. Landau, E. Lifshitz. *Curso abreviado de física teórica*. Libro 1. *Mecánica y electrodinámica*. Mir, Moscú (1982).
- [5] L. Landau, E. Lifshitz. *Curso abreviado de física teórica*. Libro 2. *Mecánica cuántica*. Mir, Moscú (1982).
- [6] L. Tartar. *An introduction to Sobolev spaces and interpolation spaces*. Springer-Verlag, Berlin (2007).
- [7] L. Schwartz. *Mathematics for the physical sciences*. Herman, Paris, 1966.
- [8] K. Yoshida. *Functional Analysis*. Springer 1980.