

Operadores No Acotados en Espacios de Hilbert y su relación con la Mecánica Cuántica

Manuel Pena de Paz

Trabajo Fin de Doble Grado en Física y Matemáticas dirigido por
D. Tomás Domínguez Benavides.



*Facultad de Matemáticas
Universidad de Sevilla*

Junio de 2020

Índice general

Índice general	II
1. Preliminares	VIII
1.1. Medidas complejas. Teorema de Representación de Riesz-Markov	VIII
1.2. Espacios localmente compactos y Teorema de Stone-Weierstrass	X
1.3. Seminormas y topologías débiles	X
2. Álgebras de Banach y álgebras-C^*. Transformada de Gelfand	1
2.1. Conceptos básicos sobre álgebras de Banach	1
2.2. El Teorema de Gelfand-Mazur	3
2.3. Álgebras- C^*	6
2.3.1. Álgebras- C^* conmutativas	7
2.3.2. La Transformada de Gelfand y el Teorema de Gelfand-Naimark	9
3. Operadores no acotados en espacios de Hilbert	11
3.1. Definiciones y propiedades básicas	11
3.2. Extensión del concepto de operador adjunto	13
3.3. Operadores autoadjuntos no acotados	14
4. Teorema Espectral de Operadores No Acotados Autoadjuntos	21
4.1. Medidas espectrales	21
4.2. Cálculo funcional de operadores normales	26
4.2.1. Cálculo funcional para funciones continuas	26
4.2.2. Cálculo funcional para funciones medibles Borel y acotadas	28
4.2.3. Cálculo funcional para funciones medibles Borel no acotadas	33
4.3. La Transformada de Cayley	36
4.4. Teorema Espectral de Operadores Autoadjuntos	37
5. Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica	39
5.1. Los postulados de la Mecánica Cuántica	39
5.1.1. Postulados 1 y 2: Representación de los estados y observables físicos	39
5.1.2. Postulado 3: Significado físico de los autovalores de un observable	40
5.1.3. Postulado 4: Principio de superposición	40
5.1.4. Postulado 5: Caracterización de estados a partir de conjuntos completos de observables	40
5.1.5. Postulado 6: Interpretación probabilística	42

5.1.6. Postulado 7: Caracterización de los estados a partir de las amplitudes de probabilidad	43
5.1.7. Postulado 8: Principio de correspondencia	43
5.1.8. Postulado 9: El Hamiltoniano y la Ecuación de Schrödinger	44
5.2. Representaciones. La función de onda	47
5.2.1. Estudio del operador de posición en la representación de coordenadas	48
5.3. Resolución de problemas físicos concretos	50
5.3.1. El oscilador armónico	50
5.3.2. El átomo de hidrógeno	53
Bibliografía	57

Resumen

El objetivo principal de este trabajo es el de desarrollar una demostración del Teorema Espectral de Operadores Autoadjuntos No Acotados definidos sobre Espacios de Hilbert y estudiar sus aplicaciones en el contexto de la Mecánica Cuántica. Para ello, estudiamos la estructura de álgebra de Banach, construidas a partir de la mejor conocida de espacio de Banach, buscando construir también la denominada Transformada de Gelfand, concepto en torno al cual se enuncia uno de los teoremas que resultarán de mayor importancia para el desarrollo matemático que se realiza posteriormente en el trabajo: el Teorema de Gelfand-Naimark. Así mismo, estudiamos la generalización a operadores no necesariamente acotados de los conceptos asociados a los operadores definidos sobre espacios de Hilbert en el caso acotado; en particular, estudiamos la extensión del concepto de operador autoadjunto e introducimos los conceptos de operador simétrico y operador esencialmente acotado, buscando condiciones suficientes para que un operador simétrico pueda extenderse, en el sentido en que lo definiremos dentro del propio trabajo, a un operador autoadjunto. Por otro lado, estudiaremos también el concepto de medida espectral, que será el concepto en torno al que construiremos la Representación Espectral de un operador autoadjunto como una integral respecto de este tipo de medida.

Tras el desarrollo de estos conceptos teóricos, abordaremos la demostración del Teorema Espectral construyendo un cálculo funcional para operadores normales a partir de funciones medibles Borel e introduciendo también la Transformada de Cayley.

Una vez demostrado el Teorema Espectral, expondremos los postulados de la Mecánica Cuántica y estudiaremos su formulación en los términos en que se ha desarrollado la teoría matemática de este trabajo; concretamente, veremos cómo el Teorema Espectral nos permite definir con rigor algunos conceptos del ámbito de esta rama de la Física. Por último, estudiaremos la resolución del operador hamiltoniano de dos sistemas físicos bien conocidos y obtendremos la resolución espectral de estos hamiltonianos haciendo uso del Teorema Espectral.

Abstract

Our main goal throughout this work consists in developing a proof of the Spectral Theorem of Non-bounded Self-adjoint Operators defined in Hilbert Spaces and applying this result in the context of Quantum Mechanics. To do so, we begin studying the mathematical structure of Banach algebras, which are built from Banach spaces, in order to introduce the Gelfand transform, from which we will develop a proof of Gelfand-Naimark theorem. Likewise, we study how to generalize the concepts related with operators defined over Hilbert Spaces from bounded to non-bounded case; particularly, we study the extension of the concept of self-adjoint operator and we introduce the concepts of symmetric and essentially self-adjoint operators, looking for sufficient conditions for a symmetric operator to be able to be extended to a self-adjoint operator, in the sense that we will define this extension. On other hand, we will develop the theory around the concept of spectral measures, from which we will build the Spectral Resolution of a self-adjoint operator as a integral with respect to this kind of measures. After the development of the basic theoretical concepts, we will start with the proof of the Spectral Theorem by giving a functional calculus for normal operators from Borel measurable functions and introducing the Cayley transform.

Once we have proved the Spectral Theorem, we will present the Quantum Mechanics postulates and we will study how to apply the mathematical theory we have developed in order to rigorously formulate these postulates; specifically, we will use the Spectral Theorem to rigorously define some concepts that will be related with this branch of Physics. Finally, we will solve the hamiltonian of two well known physical systems and we will obtain the spectral resolution of these hamiltonians from the Spectral Theorem.

Introducción

En este trabajo vamos a estudiar los aspectos fundamentales de la Teoría Espectral de Operadores No Acotados en Espacios de Hilbert. Esta teoría puede verse como una extensión de la Teoría Espectral de Operadores Compactos que se estudia como parte de la asignatura optativa del Grado en Matemáticas, Análisis Funcional, pero para desarrollarla vamos a requerir herramientas que van más allá de las impartidas en las asignaturas de Grado. En este sentido, las primeras secciones del trabajo están orientadas al estudio de la estructura de álgebra de Banach, y en particular de las denominadas álgebras- C^* , y a la extensión a operadores no acotados de la Teoría Espectral de Operadores Acotados que sí se estudia en la asignatura de Análisis Funcional.

En particular, nosotros estamos interesados en desarrollar una demostración del denominado Teorema Espectral de Operadores No Acotados Autoadjuntos, en el que establecemos una forma de representar cualquier operador autoadjunto entre espacios de Hilbert como una integral respecto de un cierto tipo de medida: las medidas espectrales. Sobre este concepto tratarán las secciones siguientes.

Para aclarar conceptos sobre el objetivo que buscamos, vamos a desarrollar una breve explicación partiendo del caso de dimensión finita. Si tenemos un operador A actuando sobre \mathbb{R}^N , considerando una base ortonormal formada por autovectores de A (x_n con $n = 1, \dots, N$ verificando $Ax_n = a_n x_n \forall n = 1, \dots, N$), podremos expresar cualquier vector x en función

de estos autovectores como $x = \sum_{n=1}^N (x_n, x)x_n$, de tal manera que $Ax = \sum_{n=1}^N a_n (x_n, x)x_n$.

Obsérvese que $(x_n, x)x_n$ es la proyección de x sobre el espacio generado por el vector x_n , de tal manera que, denotando por $P(a_n)$ la proyección sobre el espacio generado por los autovectores asociados al autovalor a_n , podremos expresar Ax como $Ax = \sum_{n=1}^N a_n P(a_n)(x)$.

Esto justifica la escritura formal de A como

$$A = \sum_{n=1}^N a_n P(a_n).$$

Para espacios de dimensión infinita, conocemos que bajo algunas condiciones sigue siendo posible obtener una base ortonormal del espacio, y por tanto un desarrollo análogo al anterior nos permitiría expresar formalmente A como suma de proyecciones también en esos casos. En particular, sabemos que esto ocurre cuando trabajamos con operadores autoadjuntos y compactos, puesto que su espectro es discreto y sus autovectores generan una base del espacio. Nosotros queremos estudiar de qué manera es posible generalizar esta expresión para el caso no acotado, en el que en particular no existe garantía de que el espectro del

operador autoadjunto en cuestión sea discreto. En tal caso, en lugar de una suma (o una serie), la expresión de A en términos de proyecciones se obtendrá como una integral respecto de una cierta medida, una medida espectral, que podemos entender como una aplicación que asigna proyecciones a conjuntos borelianos. Así, la expresión que obtendremos será del tipo

$$A = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda),$$

con el significado de que $(Ax, y) = \int_{\mathbb{R}} \lambda d(E(\lambda)x, y)$, donde $d(E(\lambda)x, y)$ es una medida compleja.

El Teorema Espectral de Operadores Autoadjuntos No Acotados demuestra precisamente que lo anterior es siempre posible para operadores autoadjuntos, no necesariamente acotados, pudiendo ser el espectro tanto discreto como continuo.

Tras trabajar los conceptos de álgebras de Banach y medidas complejas y desarrollar los aspectos esenciales de la teoría de operadores autoadjuntos no acotados, desarrollaremos la teoría necesaria para abordar la demostración del Teorema Espectral. En particular, será necesario introducir la transformada de Gelfand y estudiar sus propiedades, para lo cual a su vez requeriremos del conocimiento de la topología débil-*, e igualmente será necesario el uso de la transformada de Cayley, que veremos como un caso particular de lo que podemos entender como un cálculo funcional de operadores normales. La posibilidad de definir un cálculo funcional de un operador normal a partir de una función medible Borel se abordará por etapas en las secciones que continuarán a la teoría de medidas espectrales.

La parte de teoría matemática concluye con la demostración del Teorema Espectral. Tras él, veremos su aplicación para la construcción formal de la Mecánica Cuántica. En particular, expondremos los postulados de esta rama de la Física y a partir de ellos deduciremos la ecuación de Schrödinger y la función de onda, para lo cual será necesario pasar por una breve introducción a la teoría de Semigrupos Uniparamétricos. Concluiremos el trabajo con la aplicación del Teorema Espectral para obtener la expresión del hamiltoniano de dos sistemas físicos concretos, bien conocidos y fundamentales en el desarrollo histórico de la Mecánica Cuántica: el oscilador armónico y el átomo de hidrógeno.

Por último, comentar que el libro que se ha seguido como referencia principal para este trabajo es el libro de Joan Cerdà, *Linear Functional Analysis*, [3].

Capítulo 1

Preliminares

En este trabajo vamos a considerar como conocidos los resultados relacionados con las asignaturas del Grado en Matemáticas. Especialmente destacamos la asignatura de Análisis Funcional, para la cual consideramos la referencia general [17], pero también se utilizan resultados relacionados con la asignatura de Funciones de una Variable Compleja, de Series de Funciones e Integral de Lebesgue y de Análisis de Fourier.

A parte de estos resultados, los siguientes van a resultar necesarios en algún punto de nuestro desarrollo, que requiere de conceptos que van más allá del contenido impartido en las asignaturas de Grado en lo que respecta a Análisis Funcional y Teoría de la Medida.

1.1. Medidas complejas. Teorema de Representación de Riesz-Markov

Uno de los conceptos fundamentales que se utilizan en este trabajo es el de medida espectral. Para definir este concepto, será necesario conocer previamente sobre todo el de *medida compleja*, que introducimos a partir de las siguientes definiciones. Para más información, se puede consultar por ejemplo [8].

Definición 1.1.1 (Medida de Borel). *En \mathbb{R}^n , una medida μ definida sobre el σ -álgebra de Borel se denomina una **medida de Borel** si es finita sobre conjuntos compactos.*

Definición 1.1.2 (Medida compleja). *Se entiende por **medida compleja** sobre el espacio medible (X, Σ) cualquier función $\mu : \Sigma \rightarrow \mathbb{C}$ verificando la condición de σ -aditividad, es decir, para cualquier familia de conjuntos disjuntos $\{B_k\}_{k=1}^{\infty}$,*

$$\mu\left(\bigcup_{k=1}^{\infty} B_k\right) = \sum_{k=1}^{\infty} \mu(B_k).$$

Nota 1.1.3. *Si μ es una medida compleja, la convergencia en \mathbb{C} de la serie $\sum_{k=1}^{\infty} \mu(B_k)$ es absoluta, ya que la unión del primer miembro es invariante ante permutaciones de los subíndices.*

Uno de los resultados que utilizaremos posteriormente para la demostración de algunos de los teoremas más importantes de este trabajo y que se encuentra relacionado con el concepto de medida compleja es el Teorema de Riesz-Markov. Antes de enunciarlo, vamos a mostrar también un resultado técnico que nos va a resultar necesario y que se encuentra relacionado con el concepto de *variación total de una medida compleja*.

Definición 1.1.4 (Variación total de una medida). *Si μ es una medida compleja, su **variación total** se define como la función $|\mu| : \Sigma \rightarrow \mathbb{R}$ definida por*

$$|\mu|(B) := \sup \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} |\mu(B_k)|; B = \bigcup_{k=1}^{\infty} B_k \text{ con } B_i \cap B_j = \emptyset \text{ para } i \neq j \right\}.$$

Se puede demostrar que $|\mu|$ es una medida finita que cumple que $|\mu(B)| \leq |\mu|(B)$, $\forall B \in \Sigma$.

A partir de esta definición y del Teorema de Radon-Nikodym se puede demostrar también el siguiente resultado.

Lema 1.1.5. *Si μ es una medida compleja, existe una función $|\mu|$ -integrable y única $|\mu|$ -e.c.t h tal que*

1. $|h| = 1$ y,
2. $\mu(B) = \int_B h d|\mu|$.

Teorema 1.1.6 (Teorema de Representación de Riesz-Markov). *Sea J una aplicación lineal positiva en $\mathcal{C}_c(X)$. Entonces, existe una única medida de Borel μ sobre X tal que*

$$J(g) = \int g d\mu,$$

y que verifique la propiedad de regularidad interior para conjuntos abiertos

$$\mu(G) = \sup\{\mu(K) : K \subset G, K \text{ compacto}\}.$$

Además, esta medida de Borel también tiene la propiedad de regularidad exterior:

$$\mu(B) = \inf\{\mu(G) : G \supset B, G \text{ abierto}\}.$$

1.2. Espacios localmente compactos y Teorema de Stone-Weierstrass

En lo que respecta a los preliminares relacionados con el Análisis Funcional, destacamos la versión compleja del Teorema de Stone-Weierstrass. Más allá de este resultado, en este trabajo también se trabajará con el concepto de *espacio localmente compacto*, que encontramos desarrollado en [10].

Definición 1.2.1 (Espacio topológico compacto). *Un espacio topológico K se dice **compacto** si todo recubrimiento por abiertos de K contiene un subrecubrimiento finito.*

Definición 1.2.2 (Espacio topológico localmente compacto). *Un espacio topológico A se dice **localmente compacto** si todo punto de A posee al menos un entorno compacto.*

Teorema 1.2.3 (Teorema de Stone-Weierstrass). *Sea K un espacio topológico compacto. Si un subálgebra A de $\mathcal{C}(K; \mathbb{R})$ separa puntos y no se anula en ningún punto de K , entonces $\overline{A} = \mathcal{C}(K; \mathbb{R})$.*

Corolario 1.2.4 (Versión compleja del Teorema de Stone-Weierstrass). *Sea A una subálgebra del espacio de Banach $\mathcal{C}(K; \mathbb{C})$ que separa puntos y no se anula en un punto. Si A es autoconjugada, entonces $\overline{A} = \mathcal{C}(K; \mathbb{R})$.*

1.3. Seminormas y topologías débiles

Presentamos por último los conceptos fundamentales relacionados con el de *seminorma* y *espacio localmente convexo*, cuya teoría podemos encontrar desarrollada con detalle en [4].

Definición 1.3.1 (Espacio vectorial topológico). *Se entiende por **espacio vectorial topológico** cualquier espacio vectorial E dotado con una topología τ para la cual la suma y el producto por escalares son continuos.*

Definición 1.3.2 (Seminorma). *Dado un espacio vectorial E real o complejo, una **seminorma** es una función no negativa $p : E \rightarrow [0, \infty)$ verificando:*

1. $p(\lambda x) = |\lambda|p(x)$ y,
2. $p(x + y) \leq p(x) + p(y)$.

Si p es una seminorma, se definen las p -bolas como

$$U_p(x, \varepsilon) := \{y \in E : p(x - y) < \varepsilon\}.$$

A partir de $|p(x) - p(y)| \leq p(x - y)$ deducimos que las p -bolas son convexas.

Definición 1.3.3. *Una familia \mathcal{P} de seminormas definidas sobre E se dice **suficiente** (o **separante**) si verifica que*

$$p(x) = 0 \quad \forall p \in \mathcal{P} \iff x = 0.$$

Teorema 1.3.4. *Si \mathcal{P} es una familia suficiente de seminormas sobre E , entonces el conjunto formado por todas las intersecciones finitas de bolas $U_p(x, \varepsilon)$ ($p \in \mathcal{P}, \varepsilon > 0, x \in E$) es una base local \mathcal{U} de una topología $\tau_{\mathcal{P}}$ que dota a E de estructura de espacio vectorial topológico.*

Definición 1.3.5 (Espacio localmente convexo). *Se entiende por **espacio localmente convexo** un espacio vectorial topológico cuya topología se define a partir de una familia de seminormas suficiente \mathcal{P} .*

A partir de estos conceptos, vamos a definir por último el de *topologías débiles y débiles**, que jugará un papel fundamental en la construcción de las primeras secciones de este trabajo.

Definición 1.3.6 (Topologías débil y débil*). *Se define la **topología débil** $\sigma(\mathbf{E}, \mathbf{E}')$ sobre E como la topología localmente convexa sobre E definida por la familia suficiente de seminormas $p_u(x) = |u(x)|$ con $u \in E'$.*

*De manera análoga, la **topología débil*** $\sigma(\mathbf{E}', \mathbf{E})$ se define como la topología sobre E' definida por la familia separante de seminormas $\rho_x(u) = |u(x)|$ con $x \in E$.*

Teorema 1.3.7 (Teorema de Alaoglu). *La bola unidad cerrada $B_{E'} = \{u \in E' : \|u\|_{E'} \leq 1\}$ en el dual E' de un espacio normado E es débilmente compacta. Además, si E es separable, la topología débil* restringida a $B_{E'}$ es metrizable.*

Capítulo 2

Álgebras de Banach y álgebras- C^* . Transformada de Gelfand

La estructura matemática que nos va a interesar en este trabajo es la estructura de álgebras de Banach. Concretamente, los observables cuánticos se van a caracterizar mediante operadores autoadjuntos no acotados sobre ciertos espacios de Hilbert, cuyo conjunto, dotado de la norma y las operaciones oportunas, tendrá estructura de un cierto tipo de estas álgebras. Por ello, en las primeras secciones de este capítulo vamos a definir las estructuras de álgebras de Banach y álgebras- C^* , estudiando sus principales propiedades, y presentando en particular una generalización del concepto de operador adjunto dentro del marco de este segundo tipo de álgebras. Por último, introduciremos la Transformada de Gelfand y en particular presentaremos y demostraremos el Teorema de Gelfand-Naimark, a partir de los cuales podremos iniciar en capítulos posteriores la construcción de uno de los principales instrumentos que utilizaremos para la demostración del Teorema Espectral de Operadores Autoadjuntos.

2.1. Conceptos básicos sobre álgebras de Banach

Comenzamos introduciendo el concepto de álgebra de Banach a partir del concepto conocido de espacio de Banach.

Definición 2.1.1 (Álgebra de Banach). *Se entiende por **álgebra de Banach** un espacio de Banach A sobre un cuerpo \mathbb{K} , dotado con una segunda operación interna $\cdot : A \times A \rightarrow A$ que llamaremos multiplicación y que verifica:*

1. \cdot es bilineal.
2. \cdot es asociativa.
3. $\forall \lambda \in \mathbb{K}, \forall x, y \in A, (\lambda x) \cdot y = x \cdot (\lambda y) = \lambda(x \cdot y)$.
4. $\|xy\| \leq \|x\|\|y\| \forall x, y \in A$, es decir, \cdot es continua.

Diremos que el álgebra de Banach A es **unitaria** si $\exists e \in A$ tal que $ex = xe = x, \forall x \in A$, y $\|e\| = 1$.

A continuación, vamos a mostrar algunos ejemplos en los que, sobre espacios de Banach bien conocidos y definiendo la multiplicación de manera natural, se obtienen estructuras de álgebras de Banach unitarias y no unitarias, según el caso. En cualquier caso, nosotros sólo vamos a trabajar con álgebras de Banach unitarias.

Ejemplos de álgebras de Banach

1. Dado $X \neq \emptyset$, consideramos $B(X) := \{f : X \rightarrow \mathbb{C} \text{ acotadas}\}$, con $\|f\| = \sup_{x \in X} |f(x)|$ es un espacio de Banach. Si dotamos a este espacio de la multiplicación punto a punto, construimos un álgebra de Banach unitaria, con $e \equiv 1$, ya que

$$\|fg\| = \sup |(f \cdot g)(x)| = \sup |f(x) \cdot g(x)| \leq \sup |f(x)| \sup |g(x)| = \|f\| \|g\|.$$

Si $X = K$ es un espacio topológico compacto, definimos $C(K)$ como el subespacio de $B(K)$ formado por las funciones complejas continuas sobre K , que es cerrado para $\|\cdot\|$ y contiene a la función constante 1. Como el producto de funciones continuas es una función continua, $C(K)$ es un subálgebra de Banach unitaria de $B(K)$.

2. Si Ω es un espacio medible σ -finito, $L^\infty(\Omega)$ denota el espacio de Banach de todas las funciones $f : \Omega \rightarrow \mathbb{C}$ medibles con $\|f\|_\infty < \infty$, y también tiene estructura de álgebra de Banach unitaria con la norma $\|\cdot\|_\infty$ y la multiplicación punto a punto.
3. Dado un espacio de Banach complejo $E \neq \emptyset$, $\mathcal{L}(E) = \mathcal{L}(E; E)$ dotado con el producto y la norma usual de operadores tiene estructura de álgebra de Banach unitaria.
4. Si consideramos el espacio de Banach $L^1(\mathbb{R})$ con el producto de convolución, obtenemos una estructura de álgebra de Banach no unitaria, ya que $1 \notin L^1(\mathbb{R})$.

Definición 2.1.2 (Homomorfismo de álgebras de Banach unitarias). *Se entiende por **homomorfismo** entre dos álgebras de Banach unitarias A y B cualquier homomorfismo de álgebras $\Psi : A \rightarrow B$ tal que $\Psi(e_A) = e_B$.*

Si consideramos un álgebra de Banach unitaria A , podemos decir que un elemento $a \in A$ es **invertible** si $\exists a^{-1} \in A$ tal que $a^{-1}a = aa^{-1} = e$. A partir de esta definición, podemos definir a su vez $G(A)$ como el conjunto formado por todos los elementos invertibles de A . Observando que si $a, b \in G(A)$, entonces $a^{-1}, b^{-1} \in G(A)$ y como

$$(ab)(b^{-1}a^{-1}) = (b^{-1}a^{-1})(ab) = e,$$

deducimos que $ab \in G(A)$ y además $(ab)^{-1} = b^{-1}a^{-1}$. En particular, $(G(A), \cdot)$ tiene estructura de grupo (multiplicativo).

En base a lo anterior, podemos definir el concepto de **espectro** de un elemento de A como sigue.

Definición 2.1.3 (Espectro). *Dado $a \in A$, se define el **espectro** de a como el subconjunto de \mathbb{C} :*

$$\sigma_A(a) = \sigma(a) := \{\lambda \in \mathbb{C} : \lambda e - a \notin G(A)\}. \quad (2.1)$$

Nota 2.1.4. *Si B es un subálgebra de Banach unitaria de A , entonces $G(B) \subseteq G(A)$ y por tanto $\sigma_A(b) \subseteq \sigma_B(b) \forall b \in B$.*

Ejemplos de espectros

1. Si E es un espacio de Banach complejo y $T \in \mathcal{L}(E)$, denotamos por $\sigma(T) = \sigma_{\mathcal{L}(E)}(T)$. Por el Teorema de la Aplicación Abierta, $\lambda \in \sigma(T)$ si y sólo si $T - \lambda I$ no es biyectiva.

Nota 2.1.5. *Obsérvese que tanto los autovalores de T como los autovalores aproximados están en $\sigma(T)$.*

2. El espectro de $f \in C(K)$ es su imagen $f(K)$.

2.2. El Teorema de Gelfand-Mazur

Vamos a comenzar ahora a introducir los instrumentos teóricos necesarios para desarrollar la prueba del Teorema de Gelfand-Mazur. Estos consisten fundamentalmente en los conceptos de *resolvente* y de *radio espectral* de un elemento a de un álgebra de Banach A , y en una serie de resultados técnicos relacionados con las definiciones anteriores.

Definición 2.2.1 (Resolvente). *Dado $a \in A$, se define su **resolvente** como la función*

$$R_a : \sigma(a)^c \rightarrow A,$$

dada por $R_a(\lambda) = (\lambda e - a)^{-1}$.

Obsérvese que $R_a(\lambda) = -(a - \lambda e)^{-1} = \lambda^{-1}(e - \lambda^{-1}a)^{-1}$.

Definición 2.2.2 (Radio espectral). *Dado $a \in A$, se define su **radio espectral** como*

$$r(a) := \sup\{|\lambda| : \lambda \in \sigma(a)\}. \quad (2.2)$$

A pesar de que las pruebas no son complicadas, para evitar extendernos demasiado vamos a enunciar sin demostrar dos resultados técnicos relacionados con las definiciones anteriores.

Teorema 2.2.3. 1. *Si $\|a\| < 1$, entonces $e - a \in G(A)$ y $(e - a)^{-1} = \sum_{n=0}^{\infty} a^n$.*

2. *Sea $|\lambda| > \|a\|$, entonces $\lambda \notin \sigma(a)$ y $R_a(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{-n-1} a^n$.*

3. *Más aun, $\|R_a(\lambda)\| \leq \frac{1}{|\lambda| - \|a\|}$ y $\lim_{|\lambda| \rightarrow \infty} R_a(\lambda) = 0$.*

Lema 2.2.4. 1. *Si $\|a\| < 1$, entonces $\|(e - a)^{-1} - e - a\| \leq \frac{\|a\|^2}{1 - \|a\|}$.*

2. *Si $x \in G(A)$ y $\|h\| < \frac{1}{2\|x^{-1}\|}$, entonces $x + h \in G(A)$ y*

$$\|(x + h)^{-1} - x^{-1} + x^{-1}hx^{-1}\| \leq 2\|x^{-1}\|^3\|h\|^2.$$

Nota 2.2.5. Consecuencia del Teorema 2.2.3 es que $r(a) \leq \|a\|$, y la desigualdad puede darse de forma estricta.

El lema anterior nos va a permitir demostrar el teorema fundamental en base al cual podremos demostrar a su vez el Teorema de Gelfand-Mazur, pero para su prueba vamos a requerir también el siguiente resultado, que enunciamos sin demostración.

Proposición 2.2.6. Si $p(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \lambda^n$ es un polinomio y $a \in A$, entonces

$$\sigma(p(a)) = p(\sigma(a)).$$

Teorema 2.2.7. 1. $G(A)$ es un conjunto abierto de A y $x \in G(A) \mapsto x^{-1} \in G(A)$ es continua.

2. R_a es analítica sobre $\sigma(a)^c$ y se anula en el infinito.

3. $\sigma(a)$ es un subconjunto no vacío de \mathbb{C} y

$$r(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|a^n\|^{\frac{1}{n}} = \inf_n \|a^n\|^{\frac{1}{n}}.$$

Demostración. 1. De acuerdo con el Lema 2.2.4, para cada $x \in G(A)$ tendremos que

$$B\left(x, \frac{1}{2\|x^{-1}\|}\right) \subset G(A),$$

y por tanto $G(A)$ es abierto. Más aún, si $\|h\|$ tiende a 0,

$$\|(x+h)^{-1} - x^{-1}\| \leq \|(x+h)^{-1} - x^{-1} + x^{-1}hx^{-1}\| + \|x^{-1}hx^{-1}\| \rightarrow 0,$$

por lo que $x \in G(A) \mapsto x^{-1} \in G(A)$ es continua.

2. Sobre $\sigma(a)^c$,

$$R'_a(\lambda) = \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{((\lambda + \mu)e - a)^{-1} - (\lambda e - a)^{-1}}{\mu},$$

aplicando el Lema 2.2.4 a $x = \lambda e - a$ y $h = \mu e$ (aplicable porque si $\mu \rightarrow 0$, podemos tomar μ suficientemente pequeño de tal manera que $\|h\| < \frac{1}{2\|x^{-1}\|}$) y teniendo en cuenta que $x^{-1}hx^{-1} = \mu x^{-1}x^{-1} = \mu x^{-2}$, obtenemos que si $\mu \rightarrow 0$, entonces

$$\frac{(x + \mu e)^{-1} - x^{-1}}{\mu} = \frac{(x + \mu e)^{-1} - x^{-1} + x^{-1}hx^{-1}}{\mu} - x^{-2} \rightarrow x^{-2},$$

ya que

$$\|\mu^{-1}[(x + \mu e)^{-1} - x^{-1} + x^{-1}hx^{-1}]\| \leq |\mu|^{-1}2\|x^{-1}\|^3|\mu|^2 \rightarrow 0.$$

En consecuencia, como $x^{-2} = \lambda^{-2}(e - \lambda^{-1}a)^{-2} = -R_a(\lambda)^2$, obtenemos finalmente que $R'_a(\lambda) = -R_a^2(\lambda)$, $\forall \lambda \in \sigma(a)^c$ y por tanto que R_a es analítica sobre $\sigma(a)^c$.

Por otra parte, por el Teorema 2.2.3 sabemos que $\|R_a(\lambda)\| \leq \frac{1}{|\lambda| - \|a\|}$, de donde se deduce de forma inmediata que R_a se anula en el infinito.

3. Ya sabemos que $\sigma(a) \subset \{\lambda : |\lambda| \leq r(a)\}$ y que $r(a) \leq \|a\|$. Como $\sigma(a)^c$ es abierto, $\sigma(a)$ es cerrado, y por lo anterior deducimos que de hecho es compacto. Veamos que no es vacío por reducción al absurdo.

Si fuese vacío, la función R_a entonces sería analítica en \mathbb{C} por 2. y acotada. Dada cualquier $u \in A'$, $u \circ R_a$ será una función compleja entera y acotada, por lo que sería constante por el Teorema de Liouville. Como ya sabemos que $\lim_{|\lambda| \rightarrow \infty} R_a(\lambda) = 0$, deducimos que $\lim_{|\lambda| \rightarrow \infty} u(R_a(\lambda)) = 0$, por lo que $u(R_a(\lambda)) = 0$ y por tanto $R_a(\lambda) = 0$, en contradicción con que $R_a(\lambda) \in G(A)$.

Calculemos finalmente el radio espectral. Como si $|\lambda| > r(a)$, por el Teorema 2.2.3 sabemos que $R_a(\lambda) = \lambda^{-1} \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{-n} a^n$, y la serie de potencias $\sum_{n=0}^{\infty} z^n a^n$ es absolutamente convergente cuando $|z| = |\lambda|^{-1} < \frac{1}{r(a)}$, siendo el radio de convergencia de $\sum_{n=0}^{\infty} \|a^n\| |z|^n$

$$R = \frac{1}{\limsup_{n \rightarrow \infty} \|a^n\|^{\frac{1}{n}}} \geq \frac{1}{r(a)},$$

deducimos que $r(a) \geq \limsup_{n \rightarrow \infty} \|a^n\|^{\frac{1}{n}}$.

Recíprocamente, si $\lambda \in \sigma(a)$, entonces por la Proposición 2.2.6 sabemos que $\lambda^n \in \sigma(a^n)$, por lo que $|\lambda^n| \leq \|a^n\|$ y por tanto

$$|\lambda| \leq \inf_n \|a^n\|^{\frac{1}{n}} \leq \liminf_{n \rightarrow \infty} \|a^n\|^{\frac{1}{n}},$$

de donde deducimos finalmente que $r(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} \|a^n\|^{\frac{1}{n}} = \inf_n \|a^n\|^{\frac{1}{n}}$. □

Teorema 2.2.8 (Teorema de Gelfand-Mazur). *Si todo elemento no nulo del álgebra de Banach unitaria A es invertible (i.e. $G(A) = A \setminus \{0\}$), entonces $A = \mathbb{C}e$ y la aplicación $\lambda \mapsto \lambda e$ es el único homomorfismo de álgebras unitarias entre \mathbb{C} y A .*

Demostración. Dado $a \in A$, consideramos $\lambda \in \sigma(a)$. Por definición, $\lambda \in \sigma(a)$ si y sólo si $\lambda e - a \notin G(A)$, y por las condiciones del enunciado se deduce que $\lambda e - a = 0$, por lo cual $a = \lambda e$. Como cualquier homomorfismo de álgebras unitarias entre \mathbb{C} necesariamente envía 1 en e , deducimos que necesariamente debe ser de la forma $\lambda \mapsto \lambda e$. □

Consecuencia del Teorema de Gelfand-Mazur es que \mathbb{C} es el único álgebra de Banach que es un cuerpo, en el sentido de que si A es un cuerpo, $\lambda \mapsto \lambda e$ es un isomorfismo isométrico de \mathbb{C} en A , y en tal situación, se define el *isomorfismo canónico* entra A y \mathbb{C} como el isomorfismo inverso a $\lambda \mapsto \lambda e$.

2.3. Álgebras- C^*

Pasamos ahora a introducir un tipo de álgebras de Banach unitaria que recibe el nombre de álgebras- C^* , entorno al cual vamos a desarrollar la teoría relacionada con el Teorema de Gelfand-Naimark. Para ello, comenzamos definiendo el concepto de *involución* como sigue.

Definición 2.3.1 (Involución). *Dada un álgebra de Banach A , se entiende por **involución** sobre A cualquier aplicación $*$: $A \rightarrow A$ verificando $\forall x, y \in A, \forall \alpha, \beta \in \mathbb{C}$,*

1. $(\alpha x + \beta y)^* = \bar{\alpha}x^* + \bar{\beta}y^*$.
2. $(x^*)^* = x$.
3. $(xy)^* = y^*x^*$.

Y a partir de lo anterior, se definen las *álgebras-** y en particular las *álgebras- C^** del siguiente modo.

Definición 2.3.2 (Álgebra- $*$ y álgebra- C^*). *Se entiende por **álgebra-*** la estructura $(A, *)$ formada dotando a un álgebra de Banach sobre \mathbb{C} A unitaria de una involución $*$.*

*Si además la involución satisface que $\|x^*x\| = \|x\|^2$, entonces $(A, *)$ se denomina un **álgebra- C^*** .*

Nota 2.3.3. *Las involuciones:*

- *Son siempre biyectivas y autoinversas.*
- *Si además A es un álgebra- C^* , son isometrías, ya que:*

$$\|x\|^2 = \|x^*x\| \leq \|x^*\| \|x\| \Rightarrow \|x\| \leq \|x^*\| \text{ y } \|x^*\| \leq \|x^{**}\| = \|x\|.$$

En las siguientes definiciones, A será un álgebra- C^* .

Ejemplo 2.3.4. *Si H es un espacio de Hilbert, $\mathcal{L}(H)$ es un álgebra- C^* con la involución $T \mapsto T^*$ que a cada T le asocia su adjunto.*

A partir del ejemplo anterior y como dijimos en la introducción de este capítulo, dentro de este tipo de álgebras de Banach podemos definir de manera natural una generalización de los conceptos de operador hermítico y de operador normal como sigue.

Definición 2.3.5 (Elemento autoadjunto). *Se dice que $a \in A$ es **hermítico** o **autoadjunto** si $a = a^*$.*

Definición 2.3.6 (Elemento normal). *Se dice que $a \in A$ es **normal** si $aa^* = a^*a$.*

2.3.1. Álgebras- C^* conmutativas

Concretamente, el Teorema de Gelfand-Naimark se refiere a álgebras- C^* conmutativas, y para su enunciado y demostración es necesario introducir previamente los siguientes conceptos.

Definición 2.3.7 (Caracteres y espectro). • Llamamos **carácter** de A a todo homomorfismo $\chi : A \rightarrow \mathbb{C}$ de álgebras de Banach unitarias.

- Se define el **espectro** de A como el conjunto formado por todos los caracteres de A , notado por $\Delta(A)$.

Lema 2.3.8. Supongamos que A es conmutativa:

1. Si a es autoadjunto, entonces $\sigma_A(a) \subset \mathbb{R}$.
2. Para todo $a \in A$, $\chi \in \Delta(A)$, $\chi(a^*) = \overline{\chi(a)}$.

Demostración. 1. Sea $t \in \mathbb{R}$, ya que $\|\chi\| = 1$, tendremos que

$$|\chi(a + ite)|^2 \leq \|a + ite\|^2 = \|(a + ite)^*(a + ite)\| = \|a^2 + t^2e\| \leq \|a\|^2 + t^2.$$

Sea $\chi(a) = \alpha + i\beta$ con $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$, entonces

$$\|a\|^2 + t^2 \geq |\alpha + i\beta + it|^2 = \alpha^2 + \beta^2 + 2\beta t + t^2,$$

es decir, deducimos que $\|a\|^2 \geq \alpha^2 + \beta^2 + 2\beta t, \forall t \in \mathbb{R}$, por lo que $\beta = 0$ y por tanto $\chi(a) = \alpha \in \mathbb{R}$.

2. Dado $a \in A$, considerando $x = \frac{a + a^*}{2}$ e $y = \frac{a - a^*}{2i}$, podremos escribir $a = x + iy$. Obsérvese que x e y son hermíticos por construcción, por lo que por 1. tendremos que $\chi(x), \chi(y) \in \mathbb{R}$. Además $a^* = x - iy$. Deducimos así que, $\chi(a) = \chi(x) + i\chi(y)$ y $\chi(a^*) = \chi(x) - i\chi(y) = \overline{\chi(a)}$.

□

Teorema 2.3.9. Si B es un subálgebra unitaria cerrada de A tal que $b^* \in B, \forall b \in B$, entonces $\sigma_B(b) = \sigma_A(b), \forall b \in B$.

Demostración. Consideramos primero $b \in B$ tal que $b^* = b$. Como $\langle b \rangle$ es un subálgebra conmutativa, por el Lema 2.3.8 sabemos que $\sigma_{\langle b \rangle} \subset \mathbb{R}$ y tendremos que

$$\sigma_A(b) \subset \sigma_B(b) \subset \sigma_{\langle b \rangle}(b) = \partial\sigma_{\langle b \rangle}(b).$$

Veamos ahora la inclusión inversa, para lo cual basta probar que $\partial\sigma_{\langle b \rangle}(b) \subset \sigma_A(b)$. Sea $\lambda \in \partial\sigma_{\langle b \rangle}(b)$ y supongamos que $\lambda \notin \sigma_A(b)$, entonces por definición existe $x \in A$ tal que $x(b - \lambda e) = (b - \lambda e)x = e$. Como $\lambda \in \partial\sigma_{\langle b \rangle}(b)$, existe una sucesión de $\lambda_n \notin \partial\sigma_{\langle b \rangle}(b)$ tal que $\lambda_n \rightarrow \lambda$. Por tanto tenemos que

$$(b - \lambda_n e)^{-1} \in \langle b \rangle \subset A, \quad b - \lambda_n e \rightarrow b - \lambda e, \quad (b - \lambda_n e)^{-1} \rightarrow (b - \lambda e)^{-1} = x.$$

Deducimos por tanto que $x \in \langle b \rangle$, en contradicción con que $\lambda \in \sigma_{\langle b \rangle}(b)$, con lo que concluimos que $\lambda \in \partial\sigma_{\langle b \rangle}(b)$. □

Definición 2.3.10 (Ideal). *Un ideal J de A es un subespacio vectorial tal que $AJ \subset J$ y $J \neq A$*

Obsérvese que por definición los ideales no pueden contener elementos invertibles, ya que en tal caso se tendría que $J = A$. Además, si J es un ideal, \bar{J} también, por lo que todo ideal *maximal* (i.e. todo ideal que no esté estrictamente contenido en otro ideal) es cerrado. Teniendo esto en cuenta, podemos demostrar el siguiente lema.

Lema 2.3.11.

1. *El núcleo de todo carácter es un ideal maximal y la aplicación que a cada $\chi \in \Delta(A)$ le asocia $\ker \chi$ en el conjunto de los ideales maximales de A es biyectiva.*
2. *Todo carácter $\chi \in \Delta(A)$ es continuo y $\|\chi\| = \sup_{\|a\| \leq 1} |\chi(a)| = 1$.*
3. *Un elemento $a \in A$ es invertible si y solo si $\chi(a) \neq 0, \forall \chi \in \Delta(A)$.*
4. *$\sigma(a) = \{\chi(a) : \chi \in \Delta(A)\}$ y $r(a) = \sup_{\chi \in \Delta(A)} |\chi(a)|$.*

Demostración. 1. Dado $\chi \in \Delta(A)$, sea M su núcleo. Esta claro que es un ideal, y también es un hiperplano, porque es el núcleo de una aplicación lineal no trivial. Por tanto, el subespacio complementario de M en A es unidimensional, y como χ es biyectiva sobre él, deducimos que M es maximal.

Sea ahora M un ideal maximal. Consideramos el espacio cociente A/M , que tendrá estructura de álgebra de Banach unitaria y además es un cuerpo. En particular, la proyección canónica $\pi : A \rightarrow A/M$ dada por $\pi(x) = \tilde{x}$, no es invertible en A/M , por lo que $J = \pi(xA) \neq A/M$ es un ideal contenido en A/M y $\pi^{-1}(J) \neq A$ es un ideal de A que estará contenido en un ideal maximal que contiene a M . Por tanto, $\pi^{-1}(J) = M$, por lo que $\pi(xA) \subset \pi(M) = \{0\}$ y $\tilde{x} = 0$. Por el Teorema de Gelfand-Mazur (Teorema 2.2.8) existirá el correspondiente isomorfismo canónico

$$\tilde{\chi} : A/M = \mathbb{C}e \rightarrow \mathbb{C}.$$

y M será el núcleo de $\chi_M = \tilde{\chi} \circ \pi_M$.

Cualquier otro carácter χ_1 con el mismo núcleo M factorizará como producto de π_M con un homomorfismo biyectivo entre A/M y \mathbb{C} , que tiene que ser necesariamente el isomorfismo canónico $\mathbb{C}e \rightarrow \mathbb{C}$, también como consecuencia del Teorema de Gelfand-Mazur, por lo que $\chi_1 = \chi_M$.

2. Por un lado, si $\chi = \chi_M \in \Delta(A)$, entonces por el desarrollo de 1. tendremos que $\|\chi\| \leq \|\pi_M\| \|\tilde{\chi}\| = \|\pi_M\| \leq 1$, y como $\|\chi\| \geq \chi(e) = 1$, deducimos que $\|\chi\| = 1$.
3. Si $x \in G(A)$, ya hemos visto que no pertenece a ningún ideal. Si $x \notin G(A)$, entonces xA no contiene a la unidad e y es un ideal, y por el Lema de Zorn todo ideal está contenido en un ideal maximal. Por tanto, $x \in G(A)^c$ si y sólo si x pertenece a un ideal maximal o, equivalentemente, $\chi(x) \neq 0 \forall \chi \in \Delta(A)$.

4. Por último, por β , $\lambda e - a \notin G(A)$ si y sólo si $\exists \chi \in \Delta(A)$ tal que $\chi(\lambda e - a) = 0$, es decir, $\exists \chi \in \Delta(A)$ tal que $\lambda = \chi(a)$. □

Y a partir de lo anterior, se deduce que

Corolario 2.3.12. *El espectro $\Delta(A)$ de A es un subconjunto de A' el conjunto de las aplicaciones lineales y continuas de A en \mathbb{C} . En particular $\Delta(A) \subset \overline{B_{A'}}$.*

Basándonos en el Teorema 2.3.12, podemos asociar a todo elemento a de un álgebra de Banach conmutativa y unitaria A la función \hat{a} definida como la restricción sobre $\Delta(A)$ de $\langle a, \cdot \rangle$, $\hat{a} : \Delta(A) \rightarrow \mathbb{C}$, tal que $\hat{a}(\chi) = \chi(a), \forall \chi \in \Delta(A)$.

2.3.2. La Transformada de Gelfand y el Teorema de Gelfand-Naimark

Finalmente, estamos en las condiciones necesarias para poder enunciar y probar el Teorema de Gelfand-Naimark. Este teorema en realidad trata sobre las propiedades de la *transformada de Gelfand* de las álgebras- C^* conmutativas. Con el propósito de definir esta transformada y estudiar sus propiedades, introducimos la *topología de Gelfand*, que como vemos se encuentra relacionada con el concepto de topología débil, cuya teoría se desarrolla brevemente en los Preliminares (Definición 1.3.6)

Definición 2.3.13 (Topología de Gelfand). *Se define la **topología de Gelfand** sobre $\Delta(A)$ como la restricción de la topología débil* (Definición 1.3.6) $\omega^* = \sigma(A', A)$ de A' sobre $\Delta(A)$.*

Dotado de la topología de Gelfand, es inmediato que $\hat{a} \in C(\Delta(A)), \forall a \in A$.

Definición 2.3.14 (Transformada de Gelfand). *Se define la **transformada de Gelfand** como la aplicación \mathcal{G} que a cada $a \in A$ le asocia $\hat{a} \in C(\Delta(A))$*

$$\mathcal{G} : a \in A \mapsto \hat{a} \in C(\Delta(A)). \tag{2.3}$$

Teorema 2.3.15. *Dotado de la topología de Gelfand, $\Delta(A)$ es compacto y la transformada de Gelfand $\mathcal{G} : A \rightarrow C(\Delta(A))$ es un homomorfismo continuo de álgebras de Banach conmutativas y unitarias.*

Más aún, $\|\hat{a}\| = r(a) \leq \|a\|$ y $\mathcal{G}e = 1$, por lo que $\|\mathcal{G}\| = 1$.

Demostración. Para la primera parte solo necesitamos probar que $\Delta \subset \overline{B_{A'}}$ es débilmente cerrado, ya que por el Teorema de Alaoglu (Teorema 1.3.7) $B_{A'}$ es débilmente compacta. Obsérvese que

$$\Delta = \{ \varepsilon \in \overline{B_{A'}} : \varepsilon(e) = 1, \varepsilon(xy) = \varepsilon(x)\varepsilon(y), \forall x, y \in A \}.$$

es decir, podemos ver Δ como la intersección de los subconjuntos de $\overline{B_{A'}}$ definidos por las condiciones

$$\langle xy, \cdot \rangle - \langle x, \cdot \rangle \langle y, \cdot \rangle = 0 \quad \text{y} \quad \langle e, \cdot \rangle = 1.$$

que son débilmente compactos por la continuidad de los caracteres probada en el Lema 2.3.11, de lo que deducimos la compacidad de $\Delta(A)$.

Por otro lado, como $\widehat{e}(\chi) = \chi(e) = 1$ y $\widehat{xy}(\chi) = (xy)(\chi) = x(\chi)y(\chi) = \widehat{x}(\chi)\widehat{y}(\chi)$, deducimos de forma inmediata que \mathcal{G} es un homomorfismo.

Igualmente es inmediato que $\|\widehat{a}\| = \sup_{\chi \in \Delta} |\chi(a)| \leq \|a\|$ por el Lema 2.3.11.

□

Y a partir del resultado anterior, podemos finalmente enunciar y demostrar el Teorema de Gelfand-Naimark, que mostramos a continuación.

Teorema 2.3.16 (Teorema de Gelfand-Naimark). *Si A es un álgebra- C^* conmutativa, entonces la transformada de Gelfand $\mathcal{G} : A \rightarrow C(\Delta(A))$ es un isomorfismo isométrico biyectivo de álgebras- C^* .*

Demostración. Ya sabemos que $\widehat{a^*}(\chi) = \overline{\chi(a)} = \overline{\widehat{a}(\chi)}$ y que $\mathcal{G}(a^*) = \overline{\mathcal{G}(a)}$. Sea ahora x autoadjunto, entonces $r(x) = \lim_n \|x^{2^n}\|^{\frac{1}{2^n}} = \|x\|$, ya que $\|x^2\| = \|x^*x\| = \|x\|^2$, por lo que por inducción, $\|x^{2^{n+1}}\| = \|(x^{2^n})^2\| = (\|x^{2^n}\|)^2 = \|x\|^{2^{n+1}}$.

Dado $a \in A$, entonces $x = a^*a$ es autoadjunto, por lo que $\|\widehat{a^*a}\|_\Delta = \|a^*a\|$, y por tanto

$$\|a\|^2 = \|a^*a\| = \|\widehat{a^*a}\|_\Delta = \|\overline{\widehat{a}}\|_\Delta = \|\widehat{a}\|_\Delta^2,$$

de donde en particular deducimos que $\|a\| = \|\widehat{a}\|_\Delta$ y por tanto que \mathcal{G} es una isometría.

Sabiendo ya que \mathcal{G} es un isomorfismo isométrico, tendremos que $\mathcal{G}(A)$ será una subálgebra cerrada de $C(\Delta(A))$ que contiene las funciones constantes, es autoconjugada y separa puntos, por lo que por la forma compleja del Teorema de Stone-Weierstrass (Teorema 1.2.4) deducimos que además es densa, por lo que $\mathcal{G}(A) = C(\Delta(A))$ y por tanto \mathcal{G} es biyectiva. □

Capítulo 3

Operadores no acotados en espacios de Hilbert

En esta sección, nuestro objetivo es introducir los conceptos fundamentales de la teoría espectral de operadores no acotados en espacios de Hilbert. Para ello, comenzaremos introduciendo los conceptos de *operador*, *espectro* y *operador cerrado*, entre otros, para posteriormente pasar a la teoría relativa al concepto de *operadores densamente definidos*, a partir de la cual se introducirá el concepto de *operador adjunto* de un operador no acotado y en particular de *operador autoadjunto*, presentando una serie de resultados relacionados con su espectro y con el anterior concepto de operador cerrado. Por último, introduciremos el concepto de *operador simétrico* y estudiaremos una serie de propiedades asociadas a estos operadores y algunas condiciones suficientes para que un operador simétrico sea autoadjunto. Concluiremos la sección con el concepto de operador *esencialmente autoadjunto*, y finalizaremos con el teorema que más utilizaremos en el contexto de la física para probar que ciertos operadores simétricos son esencialmente autoadjuntos.

3.1. Definiciones y propiedades básicas

Definición 3.1.1 (Operador y dominio de un operador). *Sea H un \mathbb{C} -espacio de Hilbert, se dice que $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ definido sobre el subespacio vectorial $\mathcal{D}(T)$ (que recibe el nombre de **dominio** de T) es un **operador** sobre H si es lineal.*

Nota 3.1.2. *Obsérvese que si $T \in \mathcal{L}(H)$, entonces $\mathcal{D}(T) = H$.*

Para aclarar sobre todo el concepto de dominio, consideremos el siguiente ejemplo

Ejemplo 3.1.3 (Operador derivada distribucional). *Si consideramos sobre $L^2(\mathbb{R})$ el operador derivada distribucional $D : f \mapsto f'$, el dominio de D será el espacio de Sobolev $H^1(\mathbb{R})$. Obsérvese que en este caso, $\mathcal{D}(D)$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$, pero en general esto no es verdad.*

Definición 3.1.4 (Conjunto resolvente, espectro y resolvente de un operador).

1. *Dado $\lambda \in \mathbb{C}$, si $T - \lambda I : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ es biyectiva y $(T - \lambda I)^{-1}$ es continuo, decimos que λ es un punto regular de T . El conjunto de todos los puntos regulares se denomina el **conjunto resolvente** de T .*

2. El **espectro** de T , notado por $\sigma(T)$, es el conjunto de todos los puntos no regulares de T . Así, $\lambda \in \sigma(T)$ cuando pertenece a alguno de los siguientes conjuntos:

$$\bullet \sigma_p(T) = \{\lambda \in \mathbb{C} : T - \lambda I \text{ no es inyectiva}\}.$$

$$\bullet \sigma_c(T) = \{\lambda \notin \sigma_p(T) : T - \lambda I \text{ no es sobreyectiva, pero } \overline{\text{Im}(T - \lambda I)} = H \text{ y además } (T - \lambda I)^{-1} \text{ no es acotada}\}.$$

$$\bullet \sigma_r(T) = \{\lambda \notin \sigma_p(T) : \overline{\text{Im}(T - \lambda I)} \neq H\}.$$

3. Se define la **resolvente** de T como la función $R_T : \sigma(T)^c \rightarrow \mathcal{L}(H)$ definida por $R_T(\lambda) = (T - \lambda I)^{-1}$.

Teorema 3.1.5. El conjunto $\sigma(T)^c$ es abierto y todo $\lambda_0 \in \sigma(T)^c$ tiene un entorno donde $R_T(\lambda) = -\sum_{k=0}^{\infty} (\lambda - \lambda_0)^k R_T(\lambda_0)^{k+1}$.

Demostración. Sea $\lambda_0 \in \sigma(T)^c$, consideramos $\lambda = \lambda_0 + \mu$ con $|\mu| < \|R_T(\lambda_0)\|$. Consideramos la serie de Neumann $S(\mu) := \sum_{k=0}^{\infty} \mu^k R_T(\lambda_0)^{k+1}$, que será convergente y de hecho, será la inversa de $T - \lambda I$, ya que

$$\begin{aligned} (T - \lambda I)S(\mu) &= \lim_{N \rightarrow \infty} (T - \lambda_0 I - \mu I) \sum_{k=0}^N \mu^k ((T - \lambda_0 I)^{-1})^{k+1} = \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} [I - (\mu R_T(\lambda_0))^{N+1}] = I, \end{aligned}$$

y análogamente para $S(\mu)(T - \lambda I) = I$. □

Definición 3.1.6 (Grafo). Se denomina **grafo** a todo subespacio vectorial $F \subset H \times H$ tal que, para todo $x \in H$, el conjunto $F_x := \{y : (x, y) \in F\}$ tiene a lo más un punto, y , por lo que la proyección $\pi_1(x, y) = x$ es biyectiva sobre F . Esto significa que $x \mapsto y$ ($y \in F_x$) es un operador T_F en H con dominio $D(T_F) = \{x \in H : F_x \neq \emptyset\}$ y $\mathcal{G}(T_F) = F$.

Definición 3.1.7 (Extensión de un operador). Decimos que T es una **extensión** del operador S , y lo notamos por $S \subset T$, si $\mathcal{D}(S) \subset \mathcal{D}(T)$ y $T|_{\mathcal{D}(S)} = S$, o equivalentemente si $\mathcal{G}(S) = \mathcal{G}(T)$.

Definición 3.1.8 (Operador cerrado). Un operador T se dice que es un **operador cerrado** si $\mathcal{G}(T)$ es cerrado en $H \times H$.

Decimos también que T es **cerrable** si tiene existe una extensión cerrada, que notamos por \tilde{T} .

En caso de que T sea cerrable, como $\mathcal{G}(\tilde{T})$ es cerrado y \tilde{T} es una extensión de T , $\overline{\mathcal{G}(T)} \subset \mathcal{G}(\tilde{T})$, por lo que es un grafo, ya que π_1 es inyectiva sobre $\mathcal{G}(\tilde{T})$ y por tanto también sobre $\overline{\mathcal{G}(T)}$. Recíprocamente, si $\overline{\mathcal{G}(T)}$ es un grafo, entonces es el grafo de una extensión cerrada de T , ya que $\mathcal{G}(T) \subset \overline{\mathcal{G}(T)}$.

Nota 3.1.9. Si T es cerrable, entonces \tilde{T} denotará la clausura de T , $\tilde{T} = T_{\overline{\mathcal{G}(T)}}$.

3.2. Extensión del concepto de operador adjunto

Definición 3.2.1 (Densamente definido). *Un operador T se dice **densamente definido** si $\overline{\mathcal{D}(T)} = H$.*

Nota 3.2.2. *De aquí en adelante consideraremos sólo operadores densamente definidos.*

Si T es densamente definido, entonces toda aplicación lineal acotada sobre $\mathcal{D}(T)$ tiene una única extensión a H , que además está caracterizada por el Teorema de Representación de Riesz como una aplicación de la forma $(\cdot, z)_H$. En base a lo anterior, definimos:

Definición 3.2.3 (Operador adjunto). *Se define el **operador adjunto** de T como el operador T^* definido sobre el dominio:*

$$\mathcal{D}(T^*) = \{y \in H : x \mapsto (Tx, y)_H \text{ es acotado sobre } \mathcal{D}(T)\},$$

de tal manera que si $y \in \mathcal{D}(T^*)$, se define $T^*y \in H$ como el único elemento tal que

$$(Tx, y)_H = (x, T^*y)_H \quad \forall x \in \mathcal{D}(T).$$

Por tanto, $y \in \mathcal{D}(T^*)$ si y sólo si $(Tx, y)_H = (x, y^*)$ para algún $y^* \in H$, $\forall x \in \mathcal{D}(T)$, y en tal caso $y^* = T^*y$.

A partir de esta definición, el concepto de operador *autoadjunto* se podrá definir como

Definición 3.2.4 (Operador autoadjunto). *Un operador densamente definido T se dice **autoadjunto** si $T = T^*$, es decir, si $T \subset T^*$ y $T^* \subset T$.*

Teorema 3.2.5. *Dado un operador densamente definido T . Entonces se tienen las siguientes propiedades:*

1. $(\lambda T)^* = \bar{\lambda}T^*$.
2. $(I + T)^* = I + T^*$.
3. T^* es cerrado.
4. Si $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ es una aplicación inyectiva con imagen densa, entonces T^* es también inyectiva y densamente definida, y $(T^{-1})^* = (T^*)^{-1}$.

Demostración. 1. Si $\lambda = 0$ es trivial. Si no, obsérvese que

$$\begin{aligned} \mathcal{D}((\lambda T)^*) &= \{y \in H : x \mapsto (\lambda Tx, y)_H \text{ es acotado sobre } \mathcal{D}(T)\} \\ &= \{y \in H : x \mapsto (Tx, y)_H \text{ es acotado sobre } \mathcal{D}(T)\} = \mathcal{D}(T^*), \end{aligned}$$

y lo mismo ocurre con $\mathcal{D}(\bar{\lambda}T^*)$. Por tanto, $\mathcal{D}(\bar{\lambda}T^*) = \mathcal{D}((\lambda T)^*)$ y

$$(x, (\lambda T)^*y)_H = (\lambda Tx, y)_H = \bar{\lambda}(Tx, y)_H = (x, \bar{\lambda}T^*y)_H.$$

2. Sería análogo a 1..

3. Dada una sucesión en $\mathcal{G}(T^*)$ $\{(y_n, T^*y_n)\}_n$ que converge a (y, z) en $H \times H$, queremos probar que $T^*y = z$. Dado $x \in \mathcal{D}(T)$, tendremos que $(x, T^*y_n)_H \rightarrow (x, z)_H$ y $(Tx, y_n)_H \rightarrow (Tx, y)_H$, y por definición de T^* , $(x, T^*y_n)_H = (Tx, y_n)_H$, $\forall y_n$. Deducimos así que $(x, z)_H = (Tx, y)_H$, $\forall x \in \mathcal{D}(T)$ y por tanto por definición de T^* , $z = T^*y$, de manera que $(y, z) \in \mathcal{G}(T^*)$.
4. En primer lugar, si $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ es inyectiva con imagen densa, entonces la aplicación $T^{-1} : \text{Im}(T) \rightarrow \mathcal{D}(T)$ existe y está densamente definida, pero sí tenemos que probar que $(T^*)^{-1}$ existe y coincide con $(T^{-1})^*$.

Obsérvese que $T^*y \in \mathcal{D}((T^{-1})^*)$, $\forall y \in \mathcal{D}(T^*)$, ya que la aplicación lineal

$$x \mapsto (T^{-1}x, T^*y)_H = (x, y)_H,$$

definida sobre $\mathcal{D}(T^{-1})$, es acotada y por tanto T^*y está bien definida. Más aún, como $(T^{-1}x, T^*y)_H = (x, (T^{-1})^*T^*y)_H = (x, y)_H$, $\forall x \in \mathcal{D}(T^{-1})$, se deduce que $\forall y \in \mathcal{D}(T^*)$, $(T^{-1})^*T^*y = y$, de manera que $(T^{-1})^*T^* = I$ sobre $\mathcal{D}(T^*)$. Por tanto, el operador $(T^*)^{-1} : \text{Im}(T^*) \rightarrow \mathcal{D}(T^*)$ verificará que $(T^*)^{-1} \subset (T^{-1})^*$ ya que, si $y = (T^*)^{-1}z$, por lo anterior tendremos que $(T^{-1})^*z = (T^*)^{-1}z$.

Falta probar que $(T^{-1})^* \subset (T^*)^{-1}$, consideramos $x \in \mathcal{D}(T)$ e $y \in \mathcal{D}((T^*)^{-1})$. Entonces, $Tx \in \text{Im}(T) = \mathcal{D}(T^{-1})$ y

$$(Tx, (T^{-1})^*y)_H = (x, y)_H \quad (Tx, (T^{-1})^*y)_H = (x, T^*(T^{-1})^*y)_H .$$

Por tanto, $(T^{-1})^*y \in \mathcal{D}(T^*)$ y $T^*(T^{-1})^*y = y$, de manera que $T^*(T^{-1})^* = I$ sobre $\mathcal{D}((T^*)^{-1}) = \text{Im}(T^*)$ y por tanto $(T^*)^{-1} : \text{Im}(T^*) \rightarrow \mathcal{D}(T^*)$ es biyectiva. □

3.3. Operadores autoadjuntos no acotados

Definición 3.3.1 (Operador simétrico). *Un operador $T : \mathcal{D}(T) \subset H \rightarrow H$ se dice **simétrico** si es densamente definido y*

$$(Tx, y)_H = (x, Ty)_H \quad \forall x, y \in \mathcal{D}(T)$$

Esta definición de operador simétrico coincide con la definición de operador autoadjunto en el caso de que T sea un operador acotado, y es por ello que en multitud de ocasiones en los libros de Física se define de este modo los operadores autoadjuntos. En realidad, muchas de las propiedades que se asocian en el contexto de la Física a los operadores simétricos son propias de los operadores autoadjuntos; sin embargo, a lo largo de esta sección vamos a demostrar que, bajo ciertas condiciones que en general verifican los observables físicos, todo operador simétrico puede extenderse a un operador autoadjunto. Con este objetivo, comenzamos enunciando la siguiente propiedad del operador adjunto asociado a un operador simétrico.

Proposición 3.3.2. *Si T es simétrico, entonces $T \subset T^*$.*

Demostración. Sea T un operador simétrico, sea $y \in \mathcal{D}(T)$, entonces, $\forall x \in \mathcal{D}(T)$, se cumple que $(Tx, y) = (x, Ty) < \infty$, porque Ty está bien definido. En consecuencia, la aplicación $x \mapsto (Tx, y)_H$ es acotada sobre $\mathcal{D}(T)$ y por tanto $y \in \mathcal{D}(T^*)$. \square

A continuación, enunciamos sin demostración un resultado técnico que únicamente necesitamos en este desarrollo para la demostración del resultado inmediatamente posterior.

Proposición 3.3.3. *Sea $G : H \times H \rightarrow H \times H$ el operador de rotación, dado por $G(x, y) = (-y, x)$. Si T es cerrado y densamente definido, entonces $H \times H$ puede expresarse como la siguiente suma directa*

$$H \times H = G(\mathcal{G}(T)) \oplus \mathcal{G}(T^*) = \mathcal{G}(T) \oplus G(\mathcal{G}(T^*)).$$

Además, T^* también es cerrado y densamente definido y $T^{**} = T$.

Proposición 3.3.4. *Si T es simétrico, entonces es cerrable, y su clausura es T^{**} .*

Demostración. Obsérvese que como T es densamente definido, T^* también, ya que por ser simétrico $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{D}(T^*)$ por la Proposición 3.3.2. En particular, T^{**} está bien definido. Dado T simétrico, $T \subset T^*$ con $\mathcal{G}(T^*)$ cerrado. Entonces, la clausura de $\mathcal{G}(T)$ verificará

$$\mathcal{G}(T) \subset \overline{\mathcal{G}(T)} \subset \mathcal{G}(T^*),$$

de manera que $\overline{\mathcal{G}(T)}$ es un grafo, T es cerrable y $\overline{\mathcal{G}(T)}$ es el grafo de su clausura \overline{T} .

Vamos a ver ahora que $\mathcal{D}(T^*)$ es denso, para lo cual buscamos aplicar la Proposición 3.3.3, en virtud de la cual $\forall (x, y) \in H \times H$, $(x, y) \in \mathcal{G}(T^*)$ si y sólo si $(-y, x) \in \mathcal{G}(T)^\perp$. Por tanto,

$$\begin{aligned} \overline{\mathcal{G}(T)} &= (\mathcal{G}(T)^\perp)^\perp = (\{(x, Tx); x \in \mathcal{D}(T)\}^\perp)^\perp = (\{(T^*x, x); x \in \mathcal{D}(T^*)\}^\perp)^\perp = \\ &= \{(T^*x, -x); x \in \mathcal{D}(T^*)\}^\perp. \end{aligned}$$

Es claro que $\overline{\mathcal{G}(T)}$ es un subespacio vectorial de $H \times H$. Veamos por reducción al absurdo que es un grafo. $\overline{\mathcal{G}(T)}$ no es un grafo si y sólo si existen $y, z_1, z_2 \in H$ con $z_1 \neq z_2$ tales que $(y, z_1), (y, z_2) \in \overline{\mathcal{G}(T)}$; o equivalentemente, si existe $z \neq 0$, $z \in \mathcal{D}(T^*)^\perp$, verificando que $(0, z) \in \{(T^*x, -x); x \in \mathcal{D}(T^*)\}^\perp$. En tal caso, para cualquier $x \in \mathcal{D}(T^*)$, $(z, x)_H = 0$, por lo que $\exists z \neq 0$ tal que $z \in \mathcal{D}(T^*)^\perp$, y por lo tanto $\overline{\mathcal{D}(T^*)} \neq H$, en contradicción con que T^* es densamente definido.

Para concluir, falta probar que $\overline{\mathcal{G}(T)} = \mathcal{G}(T^{**})$, lo que se deduce de que si $(v, u) \in \overline{\mathcal{G}(T)}$ y $x \in \mathcal{D}(T^*)$, como por lo anterior $\overline{\mathcal{G}(T)} = \{(T^*x, -x); x \in \mathcal{D}(T^*)\}^\perp$, tendremos que

$$((v, u), (T^*x, -x))_{H \times H} = (v, T^*x)_H - (u, x)_H = 0,$$

por lo que $\forall x \in \mathcal{D}(T^*)$, $(T^*x, v)_H = (x, u)_H < \infty$ y por tanto $v \in \mathcal{D}(T^{**})$. Más aún, $u = T^{**}v$, de manera que $(v, u) \in \mathcal{G}(T^{**})$, y la inclusión inversa es inmediata, ya que si $(x, T^{**}x) \in \mathcal{G}(T^{**})$, entonces dado $y \in \mathcal{D}(T^*)$,

$$((T^*y, -y), (x, T^{**}x))_{H \times H} = (T^*y, x)_H - (y, T^{**}x)_H = (y, T^{**}x)_H - (y, T^{**}x)_H = 0,$$

y por tanto $(x, T^{**}x) \in \overline{\mathcal{G}(T)}$. \square

Nota 3.3.5. Obsérvese que equivalentemente, podríamos decir que T es autoadjunto si es simétrico y $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(T)$.

Antes del teorema fundamental de esta sección, vamos a demostrar algunos resultados en los que se enuncian algunas de las propiedades de mayor relevancia de los operadores autoadjuntos o simétricos de cara a su uso en el contexto de la Mecánica Cuántica.

Proposición 3.3.6. Si T es simétrico, entonces su espectro puntual es real.

Demostración. Sea $\lambda \in \sigma_p(T)$, entonces $\exists x \neq 0 \in H$ tal que $Tx = \lambda x$. En particular, $x \in \mathcal{D}(T)$, y en consecuencia

$$\bar{\lambda}(x, x)_H = (x, Tx)_H = (Tx, x)_H = \lambda(x, x)_H,$$

y por tanto $\lambda = \bar{\lambda}$. □

Teorema 3.3.7. Supongamos que T es autoadjunto. Entonces se cumple que:

1. $\lambda \in \sigma(T)^c$ si y sólo si $\exists c > 0$ tal que $\|Tx - \lambda x\|_H \geq c\|x\|_H, \forall x \in \mathcal{D}(T)$.
2. El espectro $\sigma(T)$ es real.
3. $\lambda \in \sigma(T)$ si y sólo si existe una sucesión $\{x_n\}$ en $\mathcal{D}(T)$ tal que $\|x_n\|_H = 1, \forall n \in \mathbb{N}$, y $Tx_n - \lambda x_n \rightarrow 0$.
4. $\|R_T(\lambda)\| \leq \frac{1}{|\Im \lambda|}$.

Demostración. 1. Si $\lambda \in \sigma(T)^c$, entonces $R_T(\lambda) \in \mathcal{L}(H)$ y por tanto

$$\|x\|_H \leq \|R_T(\lambda)\| \|(T - \lambda I)x\|_H = c^{-1} \|(T - \lambda I)x\|_H.$$

Supongamos ahora que $\|Tx - \lambda x\|_H \geq c\|x\|_H$ y sea $M = \text{Im}(T - \lambda I)$, de tal manera que $T - \lambda I : \mathcal{D}(T) \rightarrow M$ y tiene inversa continua. Queremos probar que $M = H$. Para ello, vamos a probar que M es cerrado y $M^\perp = \{0\}$.

Dado $z \in M^\perp$, entonces para todo $Tx - \lambda x \in M$ tenemos

$$0 = (Tx - \lambda x, z)_H = (Tx, z)_H - \lambda(x, z)_H,$$

por lo que $(Tx, z)_H = (x, \bar{\lambda}z)_H$ si $x \in \mathcal{D}(T)$, y por tanto $Tz = T^*z = \bar{\lambda}z$ y $z \in \mathcal{D}(T^*) = \mathcal{D}(T)$. En particular, deducimos que $\lambda \in \sigma_p(T)$, y por la Proposición 3.3.6, $\lambda = \bar{\lambda}$, por lo que $Tz - \lambda z = 0$ y por tanto si $z \in M$, por lo que $z \in M \cap M^\perp = \{0\}$ y $z = 0$.

Veamos ahora que M es cerrado en H . Para ello, sea $y_n \in M$, $y_n = Tx_n - \lambda x_n$ y supongamos que $y_n \rightarrow y \in H$. entonces por hipótesis,

$$\|x_n - x_m\|_H \leq c^{-1} \|Tx_n - \lambda x_n - (Tx_m - \lambda x_m)\|_H = \|y_n - y_m\|_H \rightarrow 0,$$

es decir, $\{x_n\}$ es de Cauchy y por completitud de H existirá $x \in H, x = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n$, y por tanto $\exists \lim_{n \rightarrow \infty} Tx_n = y + \lambda x$. Como, por ser autoadjunto, T es cerrado, deducimos que $Tx = y + \lambda x$ y por tanto $y \in M$.

2. Sea $\lambda = \alpha + i\beta \in \sigma(T)$, sea $x \in \mathcal{D}(T)$, tendremos que

$$\overline{(Tx - \lambda x, x)_H} = \overline{(Tx, x)_H - \lambda(x, x)_H} = (Tx, x)_H - \overline{\lambda}(x, x)_H.$$

Restando, obtenemos:

$$\overline{(Tx - \lambda x, x)_H} - (Tx - \lambda x, x)_H = 2i\beta\|x\|_H^2,$$

De manera que,

$$|\beta|\|x\|_H^2 \leq |(Tx - \lambda x, x)_H| \leq \|Tx - \lambda x\|_H\|x\|_H,$$

y por tanto, $\forall x \in \mathcal{D}(T)$, $|\beta|\|x\|_H \leq \|Tx - \lambda x\|_H$, y si $\beta \neq 0$, entonces por 1., $\lambda \in \sigma(T)^c$, llegando a contradicción.

3. Sea $\lambda \in \sigma(T)$, entonces $\forall n \in \mathbb{N}$, por 1., tomando $c = \frac{1}{n}$, existirá $x_n \in \mathcal{D}(T)$ con $\|x_n\|_H = 1$ tal que $\|Tx_n - \lambda x_n\|_H \leq \frac{1}{n}$, de manera que λ es un autovalor aproximado de T , por lo que $\lambda \in \sigma(T)$, ya que, si $(T - \lambda I)^{-1}$ fuese acotado sobre H , entonces de que $Tx_n - \lambda x_n \rightarrow 0$ deduciríamos que $x_n = (T - \lambda I)^{-1}(Tx_n - \lambda x_n)_H \rightarrow 0$, en contradicción con que $\|x_n\|_H = 1$.

4. Sea $y \in \mathcal{D}(T)$ y $\lambda = \Re\lambda + i\Im\lambda \notin \mathbb{R}$, entonces

$$\begin{aligned} \|(T - \lambda I)y\|_H^2 &= (Ty - \lambda y, Ty - \lambda y)_H = (Ty - (\Re\lambda + i\Im\lambda)y, Ty - (\Re\lambda + i\Im\lambda)y)_H = \\ &= (Ty - \Re\lambda y, Ty - \Re\lambda y)_H + (Ty - \Re\lambda y, -i\Im\lambda y)_H + \\ &+ (-i\Im\lambda y, Ty - \Re\lambda y)_H + (-i\Im\lambda y, -i\Im\lambda y)_H \\ &= (Ty - \Re\lambda y, Ty - \Re\lambda y)_H + i\Im\lambda(Ty, y)_H - i\Im\lambda(y, Ty)_H + \\ &+ i\Re\lambda\Im\lambda(y, y)_H - i\Re\lambda\Im\lambda(y, y)_H + (-i)i((\Im\lambda)y, (\Im\lambda)y)_H = \\ &= (Ty - \Re\lambda y, Ty - \Re\lambda y)_H + ((\Im\lambda)y, (\Im\lambda)y)_H \geq ((\Im\lambda)y, (\Im\lambda)y)_H = \\ &= |\Im\lambda|^2\|y\|_H^2. \end{aligned}$$

Entonces, sea $x = (T - \lambda I)y \in H$, tendremos que $y = R_T(\lambda)x$ y $\|x\|_H^2 \geq |\Im\lambda|^2\|R_T(\lambda)x\|_H^2$, de donde concluimos que

$$\|R_T(\lambda)\| \leq \frac{1}{|\Im(\lambda)|}.$$

□

En particular, en el caso de que T sea simétrico, como ocurre con frecuencia en el caso de muchos operadores físicos, la condición $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$ es una condición suficiente para que sea autoadjunto, como se deduce del siguiente resultado.

Teorema 3.3.8. *Supongamos que T es simétrico. Si existe $z \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ tal que $z, \bar{z} \in \sigma(T)^c$, entonces T es autoadjunto.*

Demostración. Como T es simétrico, basta que probemos que $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(T)$.

Dado T simétrico y dado $z \in \mathbb{C}$ tal que $z, \bar{z} \in \sigma(T)^c$, vamos a ver en primer lugar que $((T - zI)^{-1})^* = (T - \bar{z}I)^{-1}$. Para ello, dados $x_1, x_2 \in H$, queremos ver que

$$((T - zI)^{-1}x_1, x_2)_H = (x_1, (T - \bar{z}I)^{-1}x_2)_H.$$

Sean $y_1 = (T - zI)^{-1}x_1$, $y_2 = (T - \bar{z}I)^{-1}x_2$, lo anterior equivale a que

$$(y_1, (T - \bar{z}I)y_2)_H = ((T - zI)y_1, y_2)_H,$$

pero como T es simétrico, lo anterior se cumple siempre que $y_1, y_2 \in \mathcal{D}(T)$. Como las imágenes de $T - zI$ y $T - \bar{z}I$ son ambas todo H , $Ty_1 = (T - zI)y_1 + zy_1 = x_1 + y_1 \in H$ (y análogamente para y_2), por lo que $y_1, y_2 \in \mathcal{D}(T)$ y por tanto deducimos finalmente que $\forall x_1, x_2 \in H$

$$((T - zI)^{-1}x_1, x_2)_H = (x_1, (T - \bar{z}I)^{-1}x_2)_H,$$

A partir de lo anterior, estamos en condiciones de probar que $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(T)$. Dado $v \in \mathcal{D}(T^*)$, sea $w = T^*v$, por definición $\forall y_1 \in \mathcal{D}(T)$

$$(Ty_1, v)_H = (y_1, w)_H,$$

por lo que

$$((T - zI)y_1, v)_H = (Ty_1, v)_H - z(y_1, v)_H = (y_1, w - \bar{z}v)_H.$$

Sean ahora $x_1, x_2 = w - \bar{z}v \in H$, y de nuevo $y_1 = (T - zI)^{-1}x_1$, $y_2 = (T - \bar{z}I)^{-1}x_2$, por lo probado anteriormente

$$\begin{aligned} (x_1, v)_H &= ((T - zI)y_1, v)_H = (y_1, w - \bar{z}v)_H = ((T - zI)^{-1}x_1, w - \bar{z}v)_H = \\ &= (x_1, (T - \bar{z}I)^{-1}(w - \bar{z}v))_H, \end{aligned}$$

y por tanto $v = (T - \bar{z}I)^{-1}(w - \bar{z}v)$ y en consecuencia $v \in \text{Im}(T - \bar{z})^{-1}$, es decir, $\exists u \in H$ tal que $(T - \bar{z})^{-1}u = v$, y por tanto, $Tv = (T - \bar{z}I)v + \bar{z}v = u + \bar{z}v$, de manera que $v \in \mathcal{D}(T)$. \square

Definición 3.3.9. *Sea T un operador simétrico, T se dice **esencialmente autoadjunto** si su clausura es un operador autoadjunto.*

De hecho, si un operador es esencialmente autoadjunto, su clausura es su única extensión autoadjunta.

Finalmente y a modo de conclusión de esta sección, vamos a enunciar y demostrar el resultado fundamental de la misma. Este resultado nos proporciona una condición suficiente para que un operador simétrico sea esencialmente autoadjunto, y es relevante porque esta condición se satisface en multitud de situaciones físicas, de las que posteriormente veremos algunos ejemplos.

Teorema 3.3.10. *Si T es simétrico y $\{u_n\}_{n \in \mathbb{N}} \subset \mathcal{D}(T)$ es una base ortonormal de H tal que $Tu_n = \lambda_n u_n$ ($n \in \mathbb{N}$), entonces T es esencialmente autoadjunto y el espectro de su extensión autoadjunta \bar{T} es $\sigma(\bar{T}) = \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\}$.*

Demostración. Comenzamos definiendo

$$\mathcal{D}(\bar{T}) := \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n : \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 + \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n^2 |\alpha_n|^2 < \infty \right\}.$$

Veamos que es un subespacio de H que contiene a $\mathcal{D}(T)$. Para ello, dado $x \in \mathcal{D}(T)$, como $\{u_n\}_n$ es una base ortonormal de H , existirán unos coeficientes $\{\alpha_n\}_n$ tales que $x = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n$,

y análogamente, existirán $\{\beta_n\}_n$ tales que $Tx = \sum_{n=1}^{\infty} \beta_n u_n \in H$. Como los u_n son autovectores de T y T es simétrico, tendremos que

$$\beta_n = (Tx, u_n)_H = (x, Tu_n)_H = \lambda_n(x, u_n)_H = \lambda_n \alpha_n,$$

por tanto, por definición de base ortonormal, $\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 < \infty$ y $\sum_{n=1}^{\infty} |\lambda_n \alpha_n|^2 < \infty$, por lo que $\{\alpha_n\}, \{\lambda_n \alpha_n\} \in \ell^2$. Por tanto, $\mathcal{D}(\bar{T})$ es un subespacio de H y además, $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{D}(\bar{T})$ por definición.

Sobre $\mathcal{D}(\bar{T})$, definimos el operador \bar{T} como:

$$\bar{T}\left(\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n\right) := \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \alpha_n u_n.$$

Vamos a ver que \bar{T} es una extensión autoadjunta de T .

En primer lugar, es claro que \bar{T} , ya que $\mathcal{D}(\bar{T})$ es densamente definido por contener a $\mathcal{D}(T)$ y como los autovalores $\lambda_n \in \mathbb{R}$ son reales (Proposición 3.3.6), $\forall x, y \in \mathcal{D}(\bar{T})$

$$\begin{aligned} (\bar{T}x, y)_H &= \left(\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \alpha_n u_n, \sum_{m=1}^{\infty} \beta_m u_m \right)_H = \sum_{n,m=1}^{\infty} \lambda_n \alpha_n \bar{\beta}_m \delta_{n,m} = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \alpha_n \bar{\beta}_n = (x, \bar{T}y)_H. \end{aligned}$$

Además, $T \subset \bar{T}$, ya que $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{D}(\bar{T})$ y $\bar{T}|_{\mathcal{D}(T)} = T$ por construcción. Por otro lado, los λ_n también son autovalores de \bar{T} , por lo que $\{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\} \subset \sigma(\bar{T})$. Si $\lambda \notin \{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\}$, entonces $\exists \delta > 0$ tal que $|\lambda - \lambda_n| \geq \delta \forall n \in \mathbb{N}$. Vamos a ver que en tal caso $\lambda \notin \sigma(\bar{T})$. Para ello, consideramos el operador

$$R\left(\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n\right) := \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_n}{\lambda_n - \lambda} u_n.$$

Obsérvese que si $x = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n$, entonces $\|x\|_H^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2$, por lo que si $\|x\|_H = 1$,

$$\|Rx\|^2 = \left\| \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\alpha_n}{\lambda_n - \lambda} u_n \right\|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{\alpha_n}{\lambda_n - \lambda} \right|^2 \leq \inf_n \frac{1}{|\lambda_n - \lambda|^2} \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 \leq \frac{1}{\delta^2}.$$

por lo que $\|R\| \leq \frac{1}{\delta}$ y por tanto deducimos que $R \in \mathcal{L}(H)$. Además, su imagen es $\mathcal{D}(\bar{T})$, ya que $\sum_{n=1}^{\infty} \left| \frac{\alpha_n}{\lambda_n - \lambda} \right|^2 \lambda_n^2 \leq \sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 \left(1 + \frac{\lambda}{\delta}\right)^2 < \infty$ y es inyectiva por ser $\{u_n\}$ una base

ortonormal. Por tanto, a cada $x = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n \in \mathcal{D}(\bar{T})$ podemos asociarle $y \in H$ tal que $Ry = x$. En consecuencia, R es la inversa de

$$(T - \lambda I)\left(\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n (\lambda_n - \lambda) u_n.$$

Más aún, R es la inversa de $(\bar{T} - \lambda I)$, ya que

$$(\bar{T} - \lambda I)R\left(\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} -\frac{\alpha_n}{\lambda - \lambda_n} (\bar{T} - \lambda I)u_n = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n,$$

y por tanto $\lambda \notin \sigma(\bar{T})$, de donde concluimos que

$$\overline{\{\lambda_n : n \in \mathbb{N}\}} = \sigma(\bar{T}).$$

Veamos ahora que \bar{T} es autoadjunto. Para ello, basta comprobar que $\mathcal{D}((\bar{T})^*) \subset \mathcal{D}(\bar{T})$. Si $x = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n \in \mathcal{D}((\bar{T})^*)$ y consideramos $y = (\bar{T})^* x$, entonces, $\forall n \in \mathbb{N}$,

$$(y, u_n)_H = (x, \bar{T}u_n)_H = \lambda_n (x, u_n)_H = \lambda_n \alpha_n,$$

y por tanto $\sum_{n=1}^{\infty} |\lambda_n \alpha_n|^2 < \infty$, y como $\sum_{n=1}^{\infty} |\alpha_n|^2 < \infty$, deducimos que $x \in \mathcal{D}(\bar{T})$.

Finalmente, para probar que \bar{T} es la clausura de T , consideramos el par

$$(x, \bar{T}x) = \left(\sum_{n=1}^{\infty} \alpha_n u_n, \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n \alpha_n u_n \right) \in \mathcal{G}(\bar{T}).$$

Definiendo $x_N := \sum_{n=1}^N \alpha_n u_n \in \mathcal{D}(T)$, tendremos que $(x_N, Tx_N) = \left(\sum_{n=1}^N \alpha_n u_n, \sum_{n=1}^N \lambda_n \alpha_n u_n \right)$ converge a $(x, \bar{T}x)$ en $H \times H$ gracias a que $\{\alpha_n\}_n, \{\lambda_n \alpha_n\}_n \subset \ell^2$, de manera que $\mathcal{G}(\bar{T}) \subset \overline{\mathcal{G}(T)}$ y es cerrado, por lo que \bar{T} es la extensión autoadjunta de T . □

Nota 3.3.11. 1. Téngase en cuenta que en general un operador simétrico no tiene por qué tener extensiones autoadjuntas.

2. Si T es esencialmente autoadjunto, por definición también es simétrico, y recordemos que por tanto, por la Proposición 3.3.4, T^{**} es la única extensión autoadjunta de T .

Capítulo 4

Teorema Espectral de Operadores No Acotados Autoadjuntos

En este capítulo vamos a mostrar finalmente el enunciado y la demostración del Teorema Espectral de operadores autoadjuntos. Para ello, en primer lugar vamos a desarrollar la teoría matemática relacionada con el concepto de *medida espectral*, que será explícitamente utilizado para el enunciado del teorema. Posteriormente, buscaremos demostrar una versión de este teorema para operadores normales y acotados, que utilizaremos en la demostración del Teorema Espectral del siguiente modo: aplicaremos el teorema del caso normal y acotado a través del concepto de transformada de Cayley, que también definiremos en este capítulo, y definiremos un cálculo funcional para operadores normales con funciones acotadas, que posteriormente extenderemos a cualquier función medible Borel.

4.1. Medidas espectrales

Como decíamos, en primer lugar vamos a presentar uno de los objetos matemáticos que nos faltaba por estudiar para enunciar el Teorema Espectral. Este es el concepto de *medida espectral*, el cual, tras presentar algunos resultados relacionados con las propiedades relevantes para nuestros objetivos, nos va a permitir definir a su vez un homomorfismo de álgebras- C^* que posteriormente utilizaremos para enunciar y demostrar el Teorema espectral en el caso de operadores normales y acotados.

Comenzamos introduciendo la definición de medida espectral y presentando alguna notación que nos será de utilidad para enunciar los resultados relacionados con dicho concepto.

Definición 4.1.1 (Medida espectral). *Sea H un espacio de Hilbert, y sea X un conjunto y S un σ -álgebra sobre X . Se entiende por **medida espectral** [7] sobre X cualquier aplicación $E : S \rightarrow \mathcal{L}(H)$ verificando:*

1. *Sus valores son operadores hermíticos e idempotentes, es decir, proyecciones ortogonales.*
2. $E(\emptyset) = 0$ y $E(X) = 1$.

3. σ -aditividad: Para toda sucesión de conjuntos disjuntos $\{B_n\}_n \subset S$,

$$E\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} M_n\right) = \sum_{n=1}^{\infty} E(B_n).$$

Ejemplo 4.1.2. Sea (X, S, μ) un espacio de medida, consideramos el espacio de Hilbert $\mathcal{L}_2(\mu)$ formado por todas las funciones de X en \mathbb{C} medibles- μ cuyo cuadrado es μ -integrable, entonces la función $E(B) \in \mathcal{L}_2(H)$, definida por $E(B)f = \chi_B f$ para $B \in S$, es una medida espectral sobre X .

1. $E(B)f = \chi_B f$ para todo $f \in \mathcal{L}_2(\mu)$, por lo que

$$E(B)E(B)f = \chi_B \chi_B f = \chi_B f = E(B)f,$$

y es hermítico.

2. $E(\emptyset) = 0, \forall f \in \mathcal{L}_2(\mu)$.

3. Si $\{B_n\}_n$ es una familia finita de conjuntos disjuntos de $S, \forall f \in \mathcal{L}_2(\mu)$

$$E\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n\right)f = \chi_{\cup_n B_n} f = \sum_{n=1}^{\infty} \chi_{B_n} f = \sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)f.$$

Nota 4.1.3. De aquí en adelante, si $\text{Im}E(B_1) \subset \text{Im}E(B_2)$, escribiremos $E(B_1) \leq E(B_2)$.

Proposición 4.1.4. Si E es una medida espectral sobre X definida a partir de H , entonces se cumple que:

1. Regularidad: Si $B_1 \subset B_2$, entonces $E(B_1) \leq E(B_2)$ y $E(B_2 \setminus B_1) = E(B_2) - E(B_1)$.

2. Modularidad: $E(B_1 \cup B_2) + E(B_1 \cap B_2) = E(B_1) + E(B_2)$.

3. Multiplicatividad: $E(B_1 \cap B_2) = E(B_1)E(B_2) = E(B_2)E(B_1)$.

4. Continuidad: Si B_n es una sucesión de conjuntos que converge superior o inferiormente a B , entonces

$$\lim_n E(B_n)x = E(B)x \quad \forall x \in H.$$

El resultado anterior simplemente presenta algunas propiedades de interés que verifican las medidas espectrales y que nos interesan sobre todo de cara a trabajar con ellas de cara al desarrollo de las demostraciones posteriores. El siguiente resultado, en cambio, ya nos presenta una propiedad fundamental y que de hecho justifica el uso de esta herramienta de cara al enunciado del Teorema Espectral, y que podemos resumir en que las medidas espectrales nos permiten generar una familia de medidas complejas, de tal manera que en el Teorema lo que estudiaremos es la posibilidad de representar los operadores como integrales respecto de medidas de esta familia.

Proposición 4.1.5. *Dado un espacio de medida (X, S) y un espacio de Hilbert H , dada $E : S \rightarrow \mathcal{L}(H)$. Entonces E es una medida espectral si y sólo si:*

1. $E(X) = 1$.
2. $\forall x, y \in H$, la función $E_{x,y} : S \rightarrow \mathbb{C}$ definida por $E_{x,y}(B) = (E(B)x, y)_H$ es una medida compleja.

Demostración. Si E es una medida espectral, entonces 1. se cumple por definición. Por otra parte, dada $\{B_n\}_{n=1}^{\infty}$ una sucesión de conjuntos disjuntos, se cumple que

$$\begin{aligned} E_{x,y}\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n\right) &= \left(E\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n\right)x, y\right)_H = \left(\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)x, y\right)_H = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} (E(B_n)x, y)_H = \sum_{n=1}^{\infty} E_{x,y}(B_n). \end{aligned}$$

Recíprocamente, supongamos que se cumplen 1. y 2.. Sean B_1 y B_2 dos conjuntos medibles disjuntos, entonces como $\forall x, y \in H$,

$$(E(B_1 \cup B_2)x, y)_H = (E(B_1)x, y)_H + (E(B_2)x, y)_H = ((E(B_1) + E(B_2))x, y),$$

deducimos que $E(B_1 \cup B_2) = E(B_1) + E(B_2)$, es decir, E es finitamente aditiva. Análogamente, si $\{B_n\}_{n=1}^{\infty}$ es una familia de conjuntos medibles disjuntos y $B = \bigcup_{n=1}^{\infty} B_n$, entonces $\forall x, y \in H$

$$(E(B)x, y) = \sum_{n=1}^{\infty} (E(B_n)x, y)_H = \left(\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)x, y\right)_H \quad \forall x, y \in H,$$

por lo que, si $\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)$ está bien definido, $E(B) = \sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)$. Para ver que esto es así, como E es aditiva y por tanto multiplicativa, deducimos que $\{E(B_n)\}_{n=1}^{\infty}$ es una sucesión ortogonal de proyecciones y por tanto, $\{E(B_n)x\}_{n=1}^{\infty}$ es una sucesión ortogonal de vectores $\forall x \in H$. Por tanto, como

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|E(B_k)x\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} (E(B_k)x, x) = (E(B)x, x) = \|E(B)x\|^2,$$

deducimos que $\{E(B_n)x\}_{n=1}^{\infty}$ es sumable $\forall x \in H$, y si su suma es Ax , entonces claramente A es una aplicación lineal de H en sí mismo y además es acotada, por lo que $\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)$ está bien definida y con ello concluye la demostración. \square

A partir de ahora, K será un subconjunto localmente compacto de \mathbb{C} , \mathcal{B}_K el σ -álgebra de Borel sobre K , y consideraremos el espacio medible (K, \mathcal{B}_K) . Dado un espacio de Hilbert H , consideramos $E : \mathcal{B}_K \rightarrow \mathcal{L}(H)$ una medida espectral.

Denotamos a partir de ahora por \mathcal{B} el conjunto de todas las funciones complejas medibles Borel definidas sobre K . Vamos a enunciar y demostrar ahora otro resultado que jugará un papel fundamental en la obtención de las distintas versiones del Teorema Espectral y en la definición de los cálculos funcionales que nos van a interesar, y que ya recoge la idea nuclear del Teorema Espectral de representar un operador mediante integrales respecto de la familia de medidas complejas que se obtienen a partir de una medida espectral. Para ello, consideramos antes sin demostración el siguiente resultado.

Teorema 4.1.6. *Si A es un operador sobre H y $\forall x, y \in H$ $\phi(x, y) = (Ax, y)$, entonces ϕ es un operador bilineal acotado y $\|\phi\| = \|A\|$. Recíprocamente, si ϕ es un operador bilineal acotado, entonces existe un único operador $A \in \mathcal{L}(H)$ tal que $\phi(x, y) = (Ax, y) \forall x, y \in H$.*

A partir de él, podemos demostrar el resultado que buscábamos.

Teorema 4.1.7. *Si E es una medida espectral y $f \in \mathcal{B}$ es acotada, entonces existe un único operador A tal que*

$$(Ax, y)_H = \int f(\lambda) d(E(\lambda)x, y)_H,$$

para todo par de vectores $x, y \in H$.

Demostración. Recordemos que, por ser E una medida espectral $\forall x, y \in H$, $(E(\lambda)x, y)_H$ define una medida compleja en virtud de la Proposición 4.1.5. Por tanto, como f es acotada, la integral $\phi(x, y) = \int f(\lambda) d(E(\lambda)x, y)$ es una aplicación bilineal que está bien definida $\forall x, y \in H$. Sea $N(f) = \sup\{|f(\lambda)| : \lambda \in \mathbb{K}\}$, como f es acotada, $N(f) < \infty$, y tendremos que

$$|\phi(x, x)| \leq \int |f(\lambda)| d\|E(\lambda)x\|^2 \leq N(f) \cdot \|x\|^2.$$

Deducimos que ϕ es acotada y por tanto por el Teorema 4.1.6 existe un único operador cumpliendo las condiciones que buscamos para A . \square

Nota 4.1.8. *Si A es el operador del teorema anterior, utilizaremos la notación*

$$A = \int f dE = \int f(\lambda) dE(\lambda). \quad (4.1)$$

Antes de construir el espacio $L^\infty(E)$, comentar que entendemos que una propiedad P definida sobre K se verifica “ E -en casi todo” (E -e.c.t) si el conjunto de puntos $x \in K$ en los que no se verifica tiene medida espectral nula, es decir, si este conjunto lo notamos por Y

$$E(Y) \equiv 0.$$

Definición 4.1.9 (Función E -esencialmente acotada). *Dada una medida espectral E , y dada $f \in \mathcal{B}$, decimos que f se encuentra E -esencialmente acotada si $\exists M \geq 0$ verificando que $|f(x)| \leq M$ E -e.c.t. $x \in K$.*

Denotamos por $L^\infty(E)$ al espacio

$$L^\infty(E) := \{f \in \mathcal{B} : f \text{ es } E\text{-esencialmente acotada}\}. \quad (4.2)$$

Considerando la norma

$$\|f\|_\infty = E\text{-sup}|f| = \inf\{M \geq 0 : |f| \leq M \text{ } E\text{-e.c.t.}\},$$

y definiendo N como $N = \{f \in \mathcal{B} : f = 0 \text{ } E\text{-e.c.t.}\} \subset L^\infty(E)$, se puede probar que N es un ideal cerrado de $L^\infty(E)$, y por tanto $L^\infty(E)/N$ tiene estructura de espacio de Banach. Más aun, con la multiplicación puntual y la conjugación compleja como involución, si consideramos $N = \{f \in \mathcal{B} : f = 0 \text{ } E\text{-e.c.t.}\}$, se puede probar que N es un ideal cerrado de $L^\infty(E)$, y por tanto $L^\infty(E)/N$ tiene estructura de álgebra- C^* , como consecuencia del Lema 2.3.11, con la función constante 1 como unidad, que denotaremos igualmente como $L^\infty(E)$. Además, se puede demostrar que toda $f \in L^\infty(E)$ tiene un representante acotado.

Definición 4.1.10 (Integral de una función respecto de una medida espectral). *Dada $f \in L^\infty(E)$, se define su **integral respecto de E** como el operador*

$$\Phi_E(f) := \int f dE,$$

entendido en el sentido del Teorema 4.1.7.

Nota 4.1.11. *Obsérvese que la integral anterior se encuentra bien definida, ya que si tomamos $f \in L^\infty(E)$, entonces $\forall x, y \in H$, la integral $\int f(\lambda)d(E(\lambda)x, y)_H < \infty$.*

Para concluir esta sección, presentamos sin demostración el siguiente resultado, del que se va a desprender de manera natural el teorema que nos va a permitir definir el homomorfismo de álgebras- C^* que utilizaremos para definir los cálculos funcionales que necesitaremos para demostrar el Teorema Espectral. Este concepto lo definiremos en la siguiente sección.

Proposición 4.1.12. *Dadas $f, g \in \mathcal{B}$, $\alpha, \beta \in \mathbb{C}$, se cumple que:*

1. $\int (\alpha f)dE = \alpha \int f dE.$
2. $\int (f + g)dE = \int f dE + \int g dE.$
3. $\int \bar{f}dE = (\int f dE)^*.$
4. $(\int f dE)(\int g dE) = \int f g dE.$

Partiendo de este resultado, el siguiente teorema nos permite definir el homomorfismo de álgebras- C^* a partir del cual vamos a construir los cálculos funcionales en las secciones siguientes, dentro del desarrollo matemático que precederá a la demostración del Teorema Espectral. Este homomorfismo se define a través del siguiente teorema, que se deduce a partir de la Proposición 4.1.12 y del Teorema 4.1.7.

Teorema 4.1.13. *Dado un espacio localmente compacto K , y dada una medida espectral $E : \mathcal{B}_K \rightarrow \mathcal{L}(H)$, existe un único homomorfismo de álgebras- C^* $\Phi_E : L^\infty(K) \rightarrow \mathcal{L}(H)$ tal que, $\forall x, y \in H, f \in L^\infty(K)$,*

$$(\Phi_E(f)x, y)_H = \int_K f dE_{x,y},$$

verificando además que, $\forall x \in H, f \in L^\infty(K)$,

$$\|\Phi_E(f)x\|_H^2 = \int_K |f|^2 dE_{x,x}.$$

4.2. Cálculo funcional de operadores normales

Nuestra intención ahora es obtener, a partir de un operador normal T , un cálculo funcional para funciones medibles Borel no necesariamente acotadas. Recordemos que la idea del cálculo funcional consiste en, dado un operador T , un espacio localmente compacto K y una función medible Borel acotada f , definir $f(T)$. En concreto, queremos definir estos cálculos funcionales a partir de medidas espectrales definidas sobre el espectro $\sigma(T)$ de un operador normal T . Para ello, comenzaremos definiendo un cálculo funcional para funciones continuas a partir de la transformada de Gelfand \mathcal{G} 2.3 definida sobre el subálgebra generada por un elemento a de un álgebra- C^* genérica. Partiendo de la existencia de este cálculo funcional y dado $T \in \mathcal{L}(H)$ podremos definir, haciendo uso del Teorema de Riesz-Markov 1.1.6, una familia de medidas complejas a la cual asociaremos una medida espectral. Definiremos el cálculo funcional asociado al operador normal T para funciones medibles Borel y acotadas sobre $\sigma(T)$ y concluiremos extendiendo este cálculo funcional a funciones medibles Borel no necesariamente acotadas.

4.2.1. Cálculo funcional para funciones continuas

Como punto de partida, consideramos la siguiente propiedad de la transformada de Gelfand.

Teorema 4.2.1. *Sea A un álgebra- C^* , $\Delta = \Delta\langle a \rangle$ el espectro de la subálgebra generada por a y sea $\mathcal{G} : \langle a \rangle \rightarrow \mathcal{C}(\Delta)$ la transformada de Gelfand 2.3. Entonces la función $\hat{a} : \Delta \rightarrow \sigma_A(a) = \sigma_{\langle a \rangle}(a)$ es un homeomorfismo.*

Demostración. Como consecuencia del Lema 2.3.11, sabemos que $\sigma(a) = \hat{a}(\Delta)$, y por tanto \hat{a} es sobreyectiva. Veamos que también es inyectiva.

Sean $\chi_1, \chi_2 \in \Delta$, si $\hat{a}(\chi_1) = \hat{a}(\chi_2)$, entonces por definición $\chi_1(a) = \chi_2(a)$. Como $\langle a \rangle$ es un C^* -álgebra conmutativa, por el Lema 2.3.8 sabemos que $\chi(a^*) = \overline{\chi(a)}$ de donde se deduce en particular que $\chi_1(a^*) = \overline{\chi_1(a)} = \overline{\chi_2(a)} = \chi_2(a^*)$, y como $\chi_1(e) = 1 = \chi_2(e)$, podemos concluir que, $\forall x \in \langle a \rangle$, se cumple que $\chi_1(x) = \chi_2(x)$, de manera que $\chi_1 = \chi_2$.

Por otra parte, del Teorema 2.3.15 deducimos que \hat{a} es continua y Δ es compacto, y por el Teorema 2.3.9 sabemos que $\sigma_{\langle a \rangle}(a)$ también es compacto. Por tanto, \hat{a} es biyectiva y continua entre dos espacios compactos, por lo que su inversa también es continua y por tanto es un homeomorfismo. \square

A partir del hecho de que \widehat{a} es un homeomorfismo, podemos definir un isomorfismo isométrico de álgebras- C^* , $\tau : \mathcal{C}(\sigma(a)) \rightarrow \mathcal{C}(\Delta)$ dado por $[g(\lambda)] \mapsto [G(\chi)] = [g(\widehat{a}(\chi))]$. Como por el Teorema de Gelfand-Naimark (Teorema 2.3.16) \mathcal{G} es un isomorfismo isométrico de álgebras- C^* entre A y $\mathcal{C}(\Delta(A))$, la composición

$$\Phi_a = \mathcal{G}^{-1} \circ \tau : \mathcal{C}(\sigma(a)) \rightarrow \langle a \rangle,$$

tal que $g \in \mathcal{C}(\sigma(a)) \mapsto \mathcal{G}^{-1}(g(\widehat{a})) \in \langle a \rangle$, también es un isomorfismo isométrico de álgebras- C^* . Además, como $\Phi_a(g) \in A$, $\forall g \in \mathcal{C}(\sigma(a))$, podemos considerar $\widehat{\Phi_a(g)} = \mathcal{G} \circ \mathcal{G}^{-1} \circ g \circ \widehat{a} = g(\widehat{a})$, lo cual nos permite dotar de sentido a $g(a) := \Phi_a(g)$.

Así, obtenemos el isomorfismo isométrico de álgebras- C^*

$$\Phi_a : g \in \mathcal{C}(\sigma(a)) \mapsto g(a) \in \langle a \rangle,$$

tal que, si $g_0(\lambda) = \lambda$ es la identidad sobre $\sigma(a)$, entonces $\widehat{\Phi_a(g_0)} = \widehat{a}$ y $g_0(a) = a$, ya que $\tau(g_0) = \widehat{a} = \mathcal{G}(a)$. Así mismo, $\overline{g_0}(a) = a^*$, y si p es de la forma $p(\lambda) = \sum_{0 \leq j, k \leq N} c_{j,k} \lambda^j \overline{\lambda}^k$,

entonces

$$p(a) = \sum_{0 \leq j, k \leq N} c_{j,k} a^j (a^*)^k.$$

Definición 4.2.2 (Cálculo funcional para funciones continuas). *Se define el **cálculo funcional para funciones continuas** como el isomorfismo isométrico anterior Φ_a .*

Proposición 4.2.3. *El cálculo funcional para funciones continuas es el único homomorfismo de álgebras- C^* $\Phi : \mathcal{C}(\sigma(a)) \rightarrow A$ tal que, si p es de la forma anterior,*

$$\Phi(p) = \sum_{0 \leq j, k \leq N} c_{j,k} a^j (a^*)^k(a).$$

Demostración. Es consecuencia del Teorema de Stone-Weierstrass (Teorema 1.2.4), en virtud del cual el subálgebra \mathcal{P} de los polinomios de la forma $p(z) = \sum_{0 \leq j, k \leq N} c_{j,k} z^j \overline{z}^k$ es denso en

$\mathcal{C}(\sigma(a))$, por lo que si $g \in \mathcal{C}(\sigma(a))$, entonces existirá una sucesión de polinomios $\{p_n\}_n$ con $g = \lim_{n \rightarrow \infty} p_n$ en $\mathcal{C}(\sigma(a))$, por lo que

$$\Phi(g) = \lim_{n \rightarrow \infty} p_n(a) = \Phi_a(g).$$

□

4.2.2. Cálculo funcional para funciones medibles Borel y acotadas

Consideramos ahora operadores normales $T \in \mathcal{L}(H)$. Por el Teorema 2.3.9, tendremos que

$$\sigma(T) = \sigma_{\mathcal{L}(H)}(T) = \sigma_{\langle T \rangle}(T),$$

y además es un subconjunto compacto no vacío de \mathbb{C} , por lo que en particular será un conjunto localmente compacto.

A partir de ahora, denotaremos por $B(\sigma(T))$ el C^* -álgebra de todas las funciones medibles Borel acotadas $f : \sigma(T) \rightarrow \mathbb{C}$, dotadas con la involución $f \mapsto \bar{f}$ y con la norma uniforme. Obsérvese que $\mathcal{C}(\sigma(T))$ es un subálgebra cerrada y unitaria de $B(\sigma(T))$.

Recuperando lo desarrollado en la sección anterior, vamos a utilizar el cálculo funcional para funciones continuas en $\sigma(T)$:

$$g \in \mathcal{C}(\sigma(T)) \mapsto g(T) \in \langle T \rangle \subset \mathcal{L}(H),$$

que, recordemos, es un isomorfismo isométrico de álgebras- C^* .

Dados $x, y \in H$, definimos, para cada $g \in \mathcal{C}(\sigma(T))$, la aplicación lineal

$$u_{x,y}(g) := (g(T)x, y)_H,$$

que además será continua porque, sea cual sea $g \in \mathcal{C}(\sigma(T))$, $g(T)$ es acotado, y

$$|u_{x,y}(g)| = |(g(T)x, y)_H| \leq \|x\|_H \|y\|_H \|g\|_{\sigma(T)}.$$

Por el Teorema de Representación de Riesz-Markov (Teorema 1.1.6), sabemos que para cada $x, y \in H$, existirá una única medida de Borel compleja $\mu_{x,y}$ definida sobre $B(\sigma(T))$ verificando

$$(g(T)x, y)_H = u_{x,y}(g) = \int_{\sigma(T)} g d\mu_{x,y}.$$

Definición 4.2.4 (Familia de medidas espectrales). *Llamamos a $\{\mu_{x,y}\}_{x,y \in H}$ la familia de medidas espectrales complejas de T .*

La extensión de una función continua g a cualquier función medible Borel y acotada f puede obtenerse como sigue. Sea ahora cualquier función medible Borel y acotada f definida en $\sigma(T)$, para cualesquiera $x, y \in H$, podemos definir $u_{x,y}(f)$ como

$$u_{x,y}(f) = \int f d\mu_{x,y},$$

que estará bien definida $\forall x, y \in H$ porque $\{\mu_{x,y}\}$ es una familia de medidas de Borel, con lo que $u_{x,y}$ pasa a ser una aplicación lineal definida sobre todo $B(\sigma(T))$. Además, como f es acotada, se seguirá verificando que

$$|u_{x,y}(f)| \leq \|x\|_H \|y\|_H \|f\|_{\sigma(T)}.$$

Ahora, nuestro objetivo es ver que también podemos definir $f(T) \in \mathcal{L}(H)$ para todo f en la álgebra- C^* $B(\sigma(T))$, dotada de la involución $f \mapsto \bar{f}$ y de la norma uniforme, de tal forma que se siga verificando $(f(T)x, y)_H = u_{x,y}(f) = \int_{\sigma(T)} f d\mu_{x,y}$, lo cual se consigue mediante el siguiente teorema.

Teorema 4.2.5. *Dado $T \in \mathcal{L}(H)$ un operador normal, y sea $\{\mu_{x,y}\}$ su familia de medidas espectrales complejas. Entonces, existe un único homomorfismo de álgebras- C^**

$$\Phi_T : B(\sigma(T)) \rightarrow \mathcal{L}(H),$$

tal que, $\forall x, y \in H, \forall f \in B(\sigma(T))$,

$$(\Phi_T(f)x, y)_H = \int_{\sigma(T)} f d\mu_{x,y}. \quad (4.3)$$

Este homomorfismo es, además, una extensión del cálculo funcional para funciones continuas $g \mapsto g(T)$, y cumple que $\|\Phi_T(f)\| \leq \|f\|_{\sigma(T)}$, $\forall f \in B(\sigma(T))$.

Demostración. Observemos que si μ_1 y μ_2 son dos medidas de Borel complejas definidas sobre $\sigma(T)$, y si $\forall g \in \mathcal{C}(\sigma(T))$, $\int g d\mu_1 = \int g d\mu_2$, entonces $\mu_1 = \mu_2$ por la unicidad del Teorema de Representación de Riesz-Markov 1.1.6.

Si $g \in \mathcal{C}(\sigma(T))$ es una función real, se tendrá que $\overline{g(T)^*} = \overline{g(T)} = g(T)$, y por tanto $g(T)$ es autoadjunto. Por tanto, $\forall x, y \in H$, $(g(T)x, y)_H = \overline{(g(T)x, y)_H}$ y en consecuencia

$$\int_{\sigma(T)} g d\mu_{x,y} = \overline{\int_{\sigma(T)} g d\mu_{x,y}} = \int_{\sigma(T)} g d\bar{\mu}_{x,y},$$

de donde deducimos que $\mu_{x,y} = \bar{\mu}_{y,x}$.

Por otra parte, la aplicación $(x, y) \mapsto \int_{\sigma(T)} g d\mu_{x,y} = (g(T)x, y)_H$ es sexquilineal y continua, y por la unicidad del Teorema de Representación de Riesz-Markov, la aplicación $(x, y) \mapsto \mu_{x,y}(B)$ también será sexquilineal para cualquier conjunto medible Borel $B \subset \sigma(T)$. Como para funciones continuas se cumple que

$$\int_{\sigma(T)} g d\mu_{x,\lambda y} = \overline{\lambda(g(T)x, y)_H} = \int_{\sigma(T)} g d\lambda\mu_{x,y},$$

deducimos que $\mu_{x,\lambda y} = \lambda\mu_{x,y}$.

Además, para la extensión a funciones medibles Borel acotadas se sigue verificando que $|u_{x,y}(f)| \leq \|x\|_H \|y\|_H \|f\|_{\sigma(T)}$. Para cualquier función f medible Borel y acotada definida en $\sigma(T)$, la aplicación $(x, y) \mapsto B_f(x, y) := \int_{\sigma(T)} f d\mu_{x,y}$ es continua y sexquilineal, y cumple que $\overline{B_f(x, y)} = B_f(y, x)$. Vamos a ver que el Teorema de Representación de Riesz-Markov nos permite deducir que existe un único operador $\Phi_T(f) \in \mathcal{L}(H)$ tal que $B_f(x, y) = (\Phi_T(f)x, y)_H$.

Para ello, obsérvese que $B_f(\cdot, x) \in H'$ y existe un único $\Phi_T(f)x \in H$ tal que $\forall y \in H$, $B_f(y, x) = (y, \Phi_T(f)x)_H$. Por tanto,

$$(\Phi_T(f)x, y)_H = \overline{B_f(y, x)} = B_f(x, y) = \int_{\sigma(T)} f d\mu_{x,y}.$$

Está claro que B_f es lineal en f y que así definida $\Phi_T : B(\sigma(T)) \rightarrow \mathcal{L}(H)$ es una aplicación lineal y acotada que cumple que $|(\Phi_T(f)x, y)_H| \leq \|f\|_{\sigma(T)} \|x\|_H \|y\|_H$, y en consecuencia $\|\Phi_T(f)\| \leq \|f\|_{\sigma(T)}$. Más aún, así definida, Φ_T extiende trivialmente al cálculo funcional con

funciones continuas $g \mapsto g(T)$. Tenemos que probar que Φ_T es un homomorfismo continuo de álgebras- C^* , para lo cual tenemos que comprobar que se comporta bien con la involución y con el producto.

Si f es real, entonces como $\mu_{x,y} = \bar{\mu}_{y,x}$, obtenemos que $(\Phi_T(f)x, y)_H = \overline{(\Phi_T(f)y, x)_H}$ y $\Phi_T(f)^* = \Phi_T(f)$. En el caso de una función compleja, se sigue también por linealidad que $\Phi_T(f)^* = \Phi_T(f)$.

Finalmente, para probar $\Phi_T(f_1 f_2) = \Phi_T(f_1) \Phi_T(f_2)$, es necesario observar que, para funciones continuas,

$$\int_{\sigma(T)} h g d\mu_{x,y} = (h(T)g(T)x, y)_H = \int_{\sigma(T)} h d\mu_{g(T)x,y},$$

y por tanto $\forall x, y \in H$, $g d\mu_{x,y} = d\mu_{g(T)x,y}$. Así, si f_1 es acotada, también se cumplirá que

$$\int_{\sigma(T)} f_1 g d\mu_{x,y} = \int_{\sigma(T)} f_1 d\mu_{g(T)x,y},$$

y por tanto

$$\int_{\sigma(T)} f_1 g d\mu_{x,y} = (\Phi_T(f_1)g(T)x, y)_H = (g(T)x, \Phi_T(f_1)^* y)_H = \int_{\sigma(T)} g d\mu_{x, \Phi_T(f_1)^* y}.$$

De nuevo tendremos por tanto que $f_1 d\mu_{x,y} = d\mu_{x, \Phi_T(f_1)^* y}$, y también se cumplirá que $\int_{\sigma(T)} f_1 f_2 d\mu_{x,y} = \int_{\sigma(T)} f_2 d\mu_{x, f_1(T)^* y}$ cuando tanto f_1 como f_2 son acotadas. Concluimos así que

$$(\Phi_T(f_1 f_2)x, y)_H = \int_{\sigma(T)} f_1 f_2 d\mu_{x,y} = \int_{\sigma(T)} f_2 d\mu_{x, \Phi_T(f_1)^* y} = (\Phi_T(f_1) \Phi_T(f_2)x, y)_H,$$

y por tanto $\Phi_T(f)$ respeta el producto y es un homomorfismo de álgebras- C^* . \square

A partir de este resultado, podemos concluir lo siguiente.

Teorema 4.2.6. *Si $T \in \mathcal{L}(H)$ es un operador normal, entonces existe una única medida espectral $E : \mathcal{B}_{\sigma(T)} \rightarrow \mathcal{L}(H)$ verificando que*

$$T = \int_{\sigma(T)} \lambda dE(\lambda).$$

De hecho,

$$f(T) = \int_{\sigma(T)} f(\lambda) dE(\lambda) \quad \forall f \in B(\sigma(T)), \quad (4.4)$$

y $E(B) = \chi_B(T)$, $\forall B \in \mathcal{B}_{\sigma(T)}$.

Demostración. Si $\Phi_T : B(\sigma(T)) \rightarrow \mathcal{L}(H)$ es el homomorfismo dado por el Teorema 4.2.5, definimos E para que cumpla que $E(B) = \chi_B(T)$ como $E(B) := \Phi_T(\chi_B)$. Vamos a comprobar que E es una medida espectral.

Es claro que, así definida, E cumple que $E(B) = E(B)^2$ y $E(B)^* = E(B)$, ya que χ_B es real. Por tanto, $E(B)$ es una proyección ortogonal.

A partir de las propiedades del cálculo funcional a partir de funciones continuas, $E(\sigma(T)) = \Phi_T(1) = 1(T) = I$ y $E(\emptyset) = \Phi_T(0) = 0$. Por otra parte, como Φ es lineal, E es aditiva, y a partir de que $(E(B)x, y)_H = (\Phi(\chi_B)x, y)_H = \mu_{x,y}(B)$ obtenemos que $\forall f \in B(\sigma(T))$,

$$\int_{\sigma(T)} f dE = \Phi_T(f),$$

Sea ahora una sucesión de conjuntos borelianos disjuntos $\{B_n\}_n$, entonces si $n \neq m$, $E(B_n)E(B_m) = 0$, de manera que $\forall x \in H$, $\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)x$ cumplirá que $\sum_{n=1}^{\infty} \|E(B_n)x\|_H^2 \leq \|x\|_H^2$ y por tanto deducimos que $\exists Px \in H$ tal que $\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)x = Px$. En tal caso, $\forall x, y \in H$,

$$(Px, y)_H = \sum_{n=1}^{\infty} (E(B_n)x, y)_H = \mu_{x,y}\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n\right) = (E\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n\right)x, y)_H,$$

lo que nos permite concluir que $\sum_{n=1}^{\infty} E(B_n)x = Px = E\left(\bigcup_{n=1}^{\infty} B_n\right)x$.

Por último, la unicidad se deduce de la unicidad del cálculo funcional Φ_T y de la unicidad de las medidas del Teorema de Representación de Riesz-Markov. \square

Y a partir de los dos resultados anteriores, tiene ya sentido definir el cálculo funcional para funciones medibles Borel acotadas y la resolución espectral de un operador normal como sigue.

Definición 4.2.7 (Cálculo funcional para funciones medibles Borel acotadas). *Dado un operador $T \in \mathcal{L}(H)$ normal, se define el **cálculo funcional para funciones medibles Borel acotadas** asociado a T como el homomorfismo $\Phi_T : B(\sigma(T)) \rightarrow \mathcal{L}(H)$ del teorema anterior.*

Definición 4.2.8 (Resolución espectral de operadores normales). *A la expresión*

$$T = \int_{\sigma(T)} \lambda dE(\lambda),$$

*le denominamos la **resolución espectral** del operador normal $T \in \mathcal{L}(H)$.*

Antes de concluir esta sección, vamos a demostrar, como aplicación del Teorema 4.2.6, dos teoremas que vamos a utilizar posteriormente para la demostración del Teorema Espectral de Operadores Autoadjuntos. El primer teorema nos permite caracterizar si un operador es autoadjunto o unitario a partir de su espectro, mientras que el segundo nos da una caracterización de los autovalores de los operadores normales acotados.

Teorema 4.2.9. Sea $T \in \mathcal{L}(H)$ un operador normal. Entonces:

1. T es autoadjunto si y sólo si $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$.
2. T es unitario si y sólo si $\sigma(T) \subset \mathbb{S} = \{\lambda \in \mathbb{C} : |\lambda| = 1\}$.

Demostración. Vamos a aplicar el cálculo funcional Φ_T de T a la función identidad $g(\lambda) = \lambda$ sobre $\sigma(T)$, de tal manera que $g(T) = T$ y $\bar{g}(T) = T^*$.

1. Por la inyectividad de Φ_T , $T = T^*$ si y sólo si $g = \bar{g}$, lo que equivale a que $\lambda = \bar{\lambda}$, $\forall \lambda \in \sigma(T)$, por lo cual $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$.
2. De manera similar, T es unitaria, por definición, si $TT^* = T^*T = I$, es decir, cuando $g\bar{g} \equiv 1$, lo que equivale a que $|\lambda| = 1 \forall \lambda \in \sigma(T)$.

□

Teorema 4.2.10. Sea $T = \int_{\sigma(T)} \lambda dE(\lambda)$ la resolución espectral del operador normal $T \in \mathcal{L}(H)$, y sea $\lambda_0 \in \sigma(T)$, entonces

$$\ker(T - \lambda_0 I) = \text{Im}(E(\{\lambda_0\})),$$

de tal forma que λ_0 es un autovalor de T si y sólo si $E(\{\lambda_0\}) \neq 0$.

Demostración. Consideramos ahora la función $g(\lambda) = \lambda - \lambda_0$ y $f = \chi_{\{\lambda_0\}}$. Se verifica que $fg = 0$, y por tanto, $g(T)f(T) = 0$. Entonces, como $f(T) = E(\{\lambda_0\})$, deducimos que

$$\text{Im}(E(\{\lambda_0\})) \subset \ker(g(T)) = \ker(T - \lambda_0 I).$$

Para probar la inclusión inversa, consideramos $G = \sigma(T) \setminus \{\lambda_0\}$. Como $\sigma(T)$ es compacto, podemos recubrir G con una sucesión de abiertos disjuntos de $\sigma(T)$ como $G = \bigcup_n B_n$ con $d(\lambda_0, B_n) > 0$, por ejemplo tomando $B_n = \{\lambda \in \sigma(T) : |\lambda - \lambda_0| \geq 1/n\}$ y definir la sucesión de funciones acotadas

$$f_n(\lambda) = \frac{\chi_{B_n}(\lambda)}{\lambda - \lambda_0}.$$

Entonces,

$$\begin{aligned} f_n(T)(T - \lambda_0 I) &= \int_{\sigma(T)} f_n(\lambda) dE(\lambda) \int_{\sigma(T)} (\lambda - \lambda_0) dE(\lambda) = \int_{\sigma(T)} f_n(\lambda)(\lambda - \lambda_0) dE(\lambda) = \\ &= \int_{\sigma(T)} \chi_{B_n}(\lambda) dE(\lambda) = E(B_n), \end{aligned}$$

de manera que si $(T - \lambda_0 I)x = 0$, entonces $E(B_n)x = 0$ y $E(G)x = \sum_n E(B_n)x = 0$. Por tanto, como $x = E(G)x + E(\{\lambda_0\})x = E(\{\lambda_0\})x$, es decir, $x \in \text{Im}(E(\{\lambda_0\}))$. □

4.2.3. Cálculo funcional para funciones medibles Borel no acotadas

En esta sección vamos a extender finalmente el concepto de cálculo funcional desarrollado en la sección anterior para funciones medibles Borel acotadas a cualquier función medible Borel sobre el espacio localmente compacto $K \subset \mathbb{C}$. Para ello, vamos a hacer uso del homomorfismo de álgebras- C^* que definimos en el Teorema 4.1.13 sobre el espacio de funciones medibles Borel E -esencialmente acotadas.

Teorema 4.2.11. *Supongamos que K es un subconjunto localmente compacto de \mathbb{C} y $E : \mathcal{B}_K \rightarrow \mathcal{L}(H)$ es una medida espectral. Sea h una función medible Borel definida sobre K y*

$$\mathcal{D}(h) := \left\{ x \in H : \int_K |h(\lambda)|^2 dE_{x,x} < \infty \right\}.$$

Entonces, existe un único operador lineal $\Phi_E(h)$ sobre H , representado por

$$\Phi_E(h) = \int_K h dE,$$

con dominio $\mathcal{D}(\Phi_E(h)) = \mathcal{D}(h)$ y tal que, $\forall x \in \mathcal{D}(h), y \in H$

$$(\Phi_E(h)x, y)_H = \int_K h(\lambda) dE_{x,y}(\lambda).$$

Este operador está densamente definido y, si f y h son medibles Borel sobre K , se cumple que:

1. $\|\Phi_E(h)x\|_H^2 = \int_K |h|^2 dE_{x,x}$ si $x \in \mathcal{D}(h)$.
2. $\Phi_E(f)\Phi_E(h) \subset \Phi_E(fh)$ y $\mathcal{D}(\Phi_E(f)\Phi_E(h)) = \mathcal{D}(h) \cap \mathcal{D}(fh)$.
3. $\Phi_E(h)^* = \Phi_E(\bar{h})$ y $\Phi_E(h)^*\Phi_E(h) = \Phi_E(|h|^2) = \Phi_E(h)\Phi_E(h)^*$.

Demostración. Es fácil comprobar que $\mathcal{D}(h)$ es un subespacio vectorial de H . Por ejemplo, obsérvese que $\|E(B)(x+y)\|_H^2 \leq 2\|E(B)x\|_H^2 + 2\|E(B)y\|_H^2$, y por lo tanto

$$E_{x+y, x+y}(B) \leq 2E_{x,x}(B) + 2E_{y,y}(B).$$

Obsérvese que además, $\mathcal{D}(h) + \mathcal{D}(h) \subset \mathcal{D}(h)$. Veamos que de hecho es denso. Si $y \in H$, consideramos $B_n := \{|h| \leq n\}$. Obsérvese que $\{B_n\}_n$ es una sucesión creciente cuya unión es K , por lo que por la σ -aditividad fuerte de E , $y = E(K)y = \lim_{n \rightarrow \infty} E(B_n)y$ y para todo n , $x_n := E(B_n)y \in \mathcal{D}(h)$, ya que $E(B)x_n = E(B)E(B_n)x_n = E(B \cap B_n)x_n$ y en particular $E_{x_n, x_n}(B) = E_{x_n, x_n}(B \cap B_n)$, por lo que

$$\int_K |h|^2 dE_{x_n, x_n} = \int_{B_n} |h|^2 dE_{x_n, x_n} \leq n^2 \|x_n\|_H^2 < \infty,$$

y concluimos que $y = \lim_{n \rightarrow \infty} x_n$ y por tanto que $\mathcal{D}(h)$ es denso en H .

Si h es acotado, de la representación polar de una medida compleja (Lema 1.1.5) deducimos que existe una función medible Borel ρ tal que $|\rho| = 1$ y $\rho h dE_{x,y} = |h| d|E_{x,y}|$. Entonces, $\forall x, y \in H$,

$$\left| \int_K h dE_{x,y} \right| \leq \int_K |h| d|E_{x,y}| = \int_K \rho h dE_{x,y} = (\Phi_E(\rho h)x, y)_H,$$

donde hemos utilizado el cálculo funcional asociado a medidas espectrales para funciones medibles Borel acotadas Φ_E . De sus propiedades (ver Teorema 4.1.13), tendremos que

$$\begin{aligned} \left| \int_K h dE_{x,y} \right| &\leq \|\Phi_E(\rho h)x\|_H \|y\|_H = \left(\int_K |\rho h|^2 dE_{x,x} \right)^{\frac{1}{2}} \|y\|_H = \\ &= \left(\int_K |h|^2 dE_{x,x} \right)^{\frac{1}{2}} \|y\|_H < \infty, \end{aligned}$$

de donde deducimos que $\Phi_E(h)$ está bien definida.

Si h no está acotado, para definir $\Phi_E(h)x$ para todo $x \in \mathcal{D}(h)$, vamos a probar que, fijado $x \in \mathcal{D}(h)$, la aplicación

$$y \mapsto \int_K h dE_{x,y},$$

es una aplicación conjugado-lineal acotada sobre H . Para ello, definimos $h_n(z) = h(z)\chi_{B_n}(z)$, que tiende claramente a $h \forall z \in K$, y que es una sucesión de funciones acotadas, por lo que por lo anterior

$$\left| \int_K h_n dE_{x,y} \right| \leq \left(\int_K |h_n|^2 dE_{x,x} \right)^{\frac{1}{2}} \|y\|_H,$$

y tomando límite, obtenemos que h también verifica que $\forall x \in \mathcal{D}(h)$,

$$\left| \int_K h dE_{x,y} \right| \leq \left(\int_K |h|^2 dE_{x,x} \right)^{\frac{1}{2}} \|y\|_H.$$

En consecuencia, la aplicación $y \mapsto \int_K h dE_{x,y}$ es acotada con norma menor o igual que

$\left(\int_K |h|^2 dE_{x,x} \right)^{\frac{1}{2}}$, y por tanto por el Teorema de Representación de Riesz-Markov (Teorema 1.1.6), existe un único $\Phi_E(h)x \in H$ tal que $\forall y \in H$,

$$(\Phi_E(h)x, y)_H = \int_K h(\lambda) dE_{x,y}(\lambda),$$

y en particular, $\|\Phi_E(h)x\|_H \leq \left(\int_K |h|^2 dE_{x,x} \right)^{\frac{1}{2}}$, y el operador Φ_E será lineal, ya que $E_{x,y}$ es lineal en x , y densamente definido. Vamos a probar ahora las propiedades 1. 2. y 3.

Sabemos que 1. se tiene siempre que h sea acotado. Si no lo es, sea de nuevo $h_n = h\chi_{B_n}$, observemos que $\mathcal{D}(h - h_n) = \mathcal{D}(h)$, y por el Teorema de la Convergencia Dominada,

$$\|\Phi_E(h)x - \Phi_E(h_n)x\|_H^2 = \|\Phi_E(h - h_n)x\|_H^2 \leq \int_K |h - h_n|^2 dE_{x,x} \rightarrow 0,$$

por lo que, como por el Teorema 4.1.13, h_n cumple 1. $\forall n \in \mathbb{N}$, h también lo verificará por continuidad al tomar límite en n .

Vamos a probar 2. Sea primero f medible Borel acotada, obsérvese que $\mathcal{D}(fh) \subset \mathcal{D}(h)$ y que $dE_{x, \bar{\Phi}_E(f)z} = fdE_{x,z}$. Por tanto, para todo $z \in H$,

$$(\Phi_E(f)\Phi_E(h)x, z)_H = (\Phi_E(h)x, \bar{\Phi}_E(f)z) = \int_K hdE_{x, \bar{\Phi}_E(f)z} = (\Phi_E(fh)x, z)_H,$$

y si $x \in \mathcal{D}(h)$, por 1. deducimos que $\forall x \in \mathcal{D}(h)$,

$$\int_K |f|^2 dE_{\Phi_E(h)x, \Phi_E(h)x} = \int_K |fh|^2 dE_{x,x}.$$

Por tanto, $\Phi_E(f)\Phi_E(h) \subset \Phi_E(fh)$. Si f es no acotada, basta tomar límites y obtenemos

$$\int_K |f|^2 dE_{\Phi_E(h)x, \Phi_E(h)x} = \int_K |fh|^2 dE_{x,x},$$

y por tanto

$$\mathcal{D}(\Phi_E(f)\Phi_E(h)) = \{x \in \mathcal{D}(h) : \Phi_E(h)x \in \mathcal{D}(f)\} = \mathcal{D}(h) \cap \mathcal{D}(f),$$

Sea ahora $x \in \mathcal{D}(h) \cap \mathcal{D}(fh)$, consideramos la sucesión de funciones acotadas $f_n = f\chi_{B_n}$, de tal manera que $fh_n \rightarrow fh$ en $L^2(E_{x,x})$. Por 1. sabemos que $\Phi_E(f_n h)x \rightarrow \Phi_E(fh)x$.

$$\Phi_E(f)\Phi_E(h)x = \lim_n \Phi_E(f_n)\Phi_E(h)x = \lim_n \Phi_E(f_n h)x = \Phi_E(f_n h)x,$$

lo cual termina por probar 2.

Falta por demostrar 3. Para ello, sea $x, y \in \mathcal{D}(h) = \mathcal{D}(\bar{h})$. Si $h_n = h\chi_{B_n}$, entonces

$$(\Phi_E(h)x, y)_H = \lim_n (\Phi_E(h_n)x, y)_H = \lim_n (x, \Phi_E(\bar{h}_n)y)_H = (x, \Phi_E(\bar{h})y)_H,$$

y deducimos que $y \in \mathcal{D}(\Phi_E(h)^*)$ y que $\bar{\Phi}_E(h) \subset \Phi_E(h)^*$.

Para terminar la prueba, vamos a demostrar que $\mathcal{D}(\Phi_E(h)^*) \subset \mathcal{D}(h) = \mathcal{D}(\bar{h})$. Para ello, sea $z \in \mathcal{D}(\Phi_E(h)^*)$, por 2. aplicado a $h_n = h\chi_{B_n}$, tendremos que, como χ_{B_n} es acotada y real, $\Phi_E(h_n) = \Phi_E(h)\Phi_E(\chi_{B_n})$, y $\Phi_E(\chi_{B_n})$ es acotado y autoadjunto. Entonces

$$\Phi_E(\chi_{B_n})\Phi_E(h)^* = \Phi_E(\chi_{B_n})^*\Phi_E(h)^* \subset (\Phi_E(h)\Phi_E(\chi_{B_n}))^* = \Phi_E(h_n)^* = \Phi_E(\bar{h}_n),$$

y $\chi_{B_n}(\Phi_E(h)^*)z = \Phi_E(\bar{h}_n)z$. Como $|\chi_n| \leq 1$, tendremos que

$$\int_K |h_n|^2 dE_{z,z} = \int_K |\chi_{B_n}|^2 dE_{\Phi_E(h)^*z, \Phi_E(h)^*z} \leq E_{\Phi_E(h)^*z, \Phi_E(h)^*z}(K).$$

Tomando límite cuando $n \rightarrow \infty$, obtenemos que $z \in \mathcal{D}(h)$.

Y por último, la última parte de 3. la podemos deducir de 2. sin más que aplicar que $\mathcal{D}(\Phi_E(h\bar{h})) \subset \mathcal{D}(h)$. \square

El teorema anterior extiende el Teorema 4.2.6 a funciones medibles Borel no necesariamente acotadas tomando $K = \sigma(T)$, que es localmente compacto cuando T es normal (de hecho es compacto).

4.3. La Transformada de Cayley

El último instrumento matemático que necesitamos conocer para desarrollar la demostración del Teorema Espectral es la transformada de Cayley, que se define como sigue

Definición 4.3.1 (Transformada de Cayley de operadores autoadjuntos y acotados). *Si T es un operador autoadjunto y acotado sobre H , se define la **transformada de Cayley** de T como:*

$$U = g(T) = (T - iI)(T + iI)^{-1}. \quad (4.5)$$

Nota 4.3.2. *Obsérvese que $g(t) = \frac{t-i}{t+i}$ es una biyección continua de \mathbb{R} en $\mathbb{S} \setminus \{1\}$.*

Vamos a ver que también puede definirse para operadores no acotados autoadjuntos. Dado un operador autoadjunto T sobre H , en particular será simétrico y en consecuencia $\|Ty \pm iy\|_H^2 = \|y\|_H^2 + \|Ty\|_H^2 \pm (iy, Ty)_H \pm (Ty, iy)_H = \|y\|_H^2 + \|Ty\|_H^2$. Por tanto, los operadores $T \pm iI : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ son biyectivos y acotados, y además sus inversas son continuas, ya que $\pm i \in \sigma(T)^c$, ya que $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$ por ser T autoadjunto.

Entonces, dado $x \in H$, $\exists y \in \mathcal{D}(T)$ tal que $x = Ty + iy$. Definimos entonces U como $Ux = U(Ty + iy) = Ty - iy$, es decir, $\forall x \in H$,

$$Ux = (T - iI)(T + iI)^{-1}x.$$

Así, $(I + U)x = 2Ty$ y $(I - U)x = 2iy$, por lo que si $(I - U)x = 0$, entonces $y = 0$, y en tal caso $(I + U)x = 0$, de donde, restando, deducimos que $2Ux = 0$ y por tanto $x = 0$. En consecuencia, $I \pm U$ son biyectivos. De hecho, U es una isometría biyectiva sobre H , ya que $\|Ty + iy\|_H^2 = \|Ty - iy\|_H^2$ y $\text{Im}(T \pm iI) = H$.

Definición 4.3.3 (Transformada de Cayley de operadores autoadjuntos). *Dado un operador autoadjunto T , se define la **transformada de Cayley** como la aplicación U anterior.*

Lema 4.3.4. *Dado T un operador autoadjunto y U su transformada de Cayley. Se verifica:*

1. U es unitario.
2. $T = i(I + U)(I - U)^{-1}$ sobre $\mathcal{D}(T)$.

Demostración. 1. $U^* = (T - iI)^* ((T + iI)^{-1})^* = (T^* + iI)(T^* - iI)^{-1} = (T + iI)(T - iI)^{-1}$
por lo que $U^*U = UU^* = I$.

2. Por las cuentas anteriores, $(I + U)x = 2Ty$, por lo que:

$$2Ty = (I + U)(I - U)^{-1}(I - U)x = (I + U)(I - U)^{-1}2iy,$$

de donde se deduce que $T = i(I + U)(I - U)^{-1}$.

□

4.4. Teorema Espectral de Operadores Autoadjuntos

Teorema 4.4.1. *Dado T un operador autoadjunto sobre H , existe una única medida espectral E sobre \mathbb{R} verificando*

$$T = \int_{\mathbb{R}} t dE(t), \quad (4.6)$$

en el sentido de que $(Tx, y)_H = \int_{-\infty}^{+\infty} t dE_{x,y}(t)$, $\forall x \in \mathcal{D}(T), y \in H$.

Si T es una función medible Borel sobre \mathbb{R} , entonces

$$f(T) = \int_{\mathbb{R}} f(t) dE(t),$$

es un operador densamente definido tal que

$$(f(T)x, y)_H = (\Phi_E(f)x, y)_H = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) dE_{x,y}(t); \quad \forall x \in \mathcal{D}(f), y \in H,$$

donde $\mathcal{D}(f) = \left\{ x \in H : \int_{-\infty}^{+\infty} |f(\lambda)|^2 dE_{x,x} < \infty \right\}$.

Además, este cálculo funcional verifica:

1. $\|f(T)x\|_H^2 = \int_{\sigma(T)} |f|^2 dE_{x,x}$ para todo $x \in \mathcal{D}(f(T))$.
2. $f(T)h(T) \subset (fh)(T)$, $\mathcal{D}(f(T)h(T)) = \mathcal{D}(h(t)) \cap \mathcal{D}((fh)(T))$.
3. $f(T)^* = \bar{f}(T)$ y $f(T)^*f(T) = |f|^2(T) = f(T)f(T)^*$.

Si f es acotado, entonces $\mathcal{D}(f) = H$ y $f(T)$ es un operador normal acotado. Si f es real, entonces $f(T)$ es autoadjunto.

Demostración. Sea T un operador autoadjunto sobre H , consideramos su transformada de Cayley U . Como U es unitario, en virtud del Teorema 4.2.9 el espectro de U es un subconjunto cerrado del círculo unidad \mathbb{S} , y además 1 no es un autovalor de U , ya que, por ser $I - U$ inyectiva, la función $g(t) = \frac{t-i}{t+i}$ va de \mathbb{R} en $\mathbb{S} \setminus \{1\}$ y $U = g(T)$. Como $U \in \mathcal{L}(H)$, podemos aplicar el Teorema 4.2.6 y decir que existe una única medida espectral E' de U , que además verificará $E'\{1\} = 0$ por el Teorema 4.2.10.

Suponiendo que E' está definida sobre $\Omega = \mathbb{S} \setminus \{1\}$, como Ω es localmente compacto, podemos utilizar el cálculo funcional para funciones medibles Borel sobre Ω y acotadas 4.4, de manera que

$$f(U) = \int_{\sigma(U)} f(\lambda) dE'(\lambda) = \int_{\Omega} f(\lambda) dE'(\lambda).$$

Además, por el Teorema 4.2.11, sabemos que este cálculo funcional puede extenderse a funciones no acotadas.

Sea ahora $h(\lambda) := i \frac{1+\lambda}{1-\lambda}$ definida sobre Ω , tendremos que, para $x \in \mathcal{D}(h(U)), y \in H$,

$$(h(U)x, y)_H = \int_{\Omega} h(\lambda) dE'_{x,y}(\lambda),$$

siendo $\mathcal{D}(h(U)) = \left\{ x \in H : \int_{\Omega} |h|^2 dE'_{x,x} < \infty \right\}$. Obsérvese que, como consecuencia del Teorema 4.2.11, el operador $h(U)$ es autoadjunto, ya que h es real y como consecuencia de este resultado, $h(U)^* = \bar{h}(U) = h(U)$. Por este mismo teorema y por el hecho de que $h(\lambda)(1 - \lambda) = i(1 + \lambda)$ deducimos que

$$h(U)(I - U) = i(I + U),$$

ya que $\mathcal{D}(I - U) = H$. En particular, $\text{Im}(I - U) \subset \mathcal{D}(h(U))$.

Por las propiedades de la transformada de Cayley 4.3.1, en particular por el Lema 4.3.4, sabemos que $T = i(I + U)(I - U)^{-1}$, por lo que

$$T(I - U) = i(I + U) \quad \mathcal{D}(T) = \text{Im}(I - U) \subset \mathcal{D}(h(U)) ,$$

es decir, $h(U)$ es una extensión autoadjunta del operador autoadjunto T . Como T es maximalmente simétrico, deducimos que $T = h(U)$, es decir, $\forall x \in \mathcal{D}(T), y \in H$,

$$(Tx, y)_H = \int_{\Omega} h(\lambda) dE'_{x,x}(\lambda).$$

Por otra parte, la función $t = h(\lambda)$ es un homeomorfismo entre Ω y \mathbb{R} que nos permite definir $E(B) := E'(h^{-1}(B))$, y es fácil comprobar que E es una medida espectral sobre \mathbb{R} tal que

$$(Tx, y)_H = \int_{\mathbb{R}} t dE_{x,y}(t).$$

Y recíprocamente, si E es una medida espectral sobre \mathbb{R} que verifica

$$(Tx, y)_H = \int_{\mathbb{R}} t dE_{x,y}(t),$$

entonces definiendo $E'(B) := E(h(B))$ obtenemos una medida espectral sobre Ω tal que

$$(h(U)x, y)_H = \int_{\Omega} h(\lambda) dE'_{x,y}(\lambda).$$

Pero como $U = h^{-1}(h(U))$, y como

$$(Ux, y)_H = \int_{\Omega} \lambda dE'_{x,y}(\lambda),$$

por la unicidad de E' deducimos la unicidad de E .

Para concluir, basta aplicar el cálculo funcional para medidas espectrales demostrado en secciones anteriores y extendido a funciones no acotadas en el Teorema 4.2.11 ahora a cualquier f medible Borel sobre \mathbb{R} con la medida E para definir el cálculo funcional

$$f(T) = \int_{-\infty}^{+\infty} f dE \quad \text{para} \quad T = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dE(\lambda),$$

y de hecho tendremos que $f(T) = f(h(U))$. □

Capítulo 5

Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica

Llegados a este punto, ya tenemos los instrumentos matemáticos necesarios para poder formular con rigor los fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica. Nosotros vamos a presentar concretamente lo que se conoce como los axiomas de Dirac-von Neumann. Estos axiomas pueden presentarse mediante dos formulaciones diferentes: mediante espacios de Hilbert y mediante álgebras- C^* , y se puede demostrar su equivalencia a través del Teorema de Gelfand-Naimark. Por ello, nosotros vamos a presentar aquí la formulación en términos de espacios de Hilbert, que es la utilizada en física de forma mayoritaria. Para más detalle, se pueden ver las referencias generales [5] y [15].

5.1. Los postulados de la Mecánica Cuántica

5.1.1. Postulados 1 y 2: Representación de los estados y observables físicos

Antes de enunciar el primer y el segundo postulado, observemos que dado un espacio normado X , en $X \setminus \{0\}$ la siguiente relación es una relación de equivalencia:

$$x \sim y \Leftrightarrow \frac{x}{\|x\|} = \frac{y}{\|y\|}.$$

Teniendo esto en mente, enunciamos el primer postulado como sigue:

Postulado 1. *El estado de un sistema cuántico en un instante de tiempo t se representa mediante una de las clases de equivalencia $[\psi] \subset \mathcal{H}$ obtenidas a partir de la relación anterior. Como representante de estas clases, escogeremos los vectores $\psi \in \mathcal{H}$ tales que $\|\psi\|_{\mathcal{H}} = 1$.*

Nota 5.1.1. *Desde un punto de vista físico, el vector nulo no tiene significado.*

Y al igual que este postulado establece el objeto matemático que representa a los estados físicos, el segundo establece el objeto asociado a las magnitudes físicas medibles.

Postulado 2. *Los observables físicos se representan mediante operadores autoadjuntos que no dependen del tiempo.*

En este postulado se pone de manifiesto por primera vez la importancia del Teorema Espectral que hemos demostrado en la sección anterior. A partir de él, si \hat{A} es el operador autoadjunto sobre \mathcal{H} que representa a un observable físico A , entonces podemos aplicarle el Teorema Espectral y considerar su representación espectral, dada por la ecuación 4.6:

$$\hat{A} = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE(\lambda).$$

Nota 5.1.2. *Con frecuencia, cuando hablemos de una magnitud física haremos directamente referencia a su operador hermítico asociado.*

5.1.2. Postulado 3: Significado físico de los autovalores de un observable

Una vez establecido el Postulado 2, es inmediato preguntarse cuál es la relación entre las propiedades de la magnitud física en cuestión y las de su correspondiente operador hermítico. Este es el sentido en el que profundiza el tercer postulado.

Postulado 3. *Dada una magnitud física de un sistema físico concreto, los valores que podemos obtener al medir dicha magnitud en cualquier estado del sistema son los valores λ correspondientes con elementos del espectro del operador autoadjunto que representa a dicha magnitud.*

5.1.3. Postulado 4: Principio de superposición

Por otro lado, el siguiente postulado es el que sienta definitivamente las bases para reducir el estudio de cualquier sistema cuántico al estudio de un espacio de Hilbert y de los operadores que se definen sobre él.

Postulado 4. *Dado un sistema físico concreto, todo operador autoadjunto sobre su espacio de Hilbert característico \mathcal{H} se corresponde con una magnitud física observable, y todas las clases de equivalencia $[\psi]$ se corresponden con posibles estados de dicho sistema.*

5.1.4. Postulado 5: Caracterización de estados a partir de conjuntos completos de observables

Antes de seguir con los postulados es necesario introducir el concepto de *conmutador* de dos operadores.

Definición 5.1.3 (Conmutador). *Dados dos observables \hat{A} y \hat{B} , se define su conmutador como:*

$$[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}. \quad (5.1)$$

En Física decimos típicamente que dos operadores *conmutan* si $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$, pero esta definición no es del todo precisa con el formalismo matemático que hemos desarrollado en las secciones anteriores. Por ejemplo, si A es un operador no acotado, entonces si 0 es el operador nulo $A0 \neq 0A$, pero sí lo es en $\mathcal{D}(A)$, que sabemos que es denso. Esto se soluciona

teniendo en cuenta que $\mathcal{D}([\hat{A}, \hat{B}]) = \mathcal{D}(\hat{A}) \cap \mathcal{D}(\hat{B})$, pero la intersección de dos dominios densos no es un conjunto denso, en general.

Para solucionar lo anterior, vamos a volver a la representación espectral.

Definición 5.1.4 (Conmutación de dos operadores). *Si \hat{A}_1, \hat{A}_2 son dos operadores autoadjunto sobre el espacio de Hilbert \mathcal{H} con representaciones espectrales*

$$\hat{A}_1 = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE^1(\lambda) \quad ; \quad \hat{A}_2 = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE^2(\lambda),$$

entonces decimos que \hat{A}_1 y \hat{A}_2 **conmutan** si lo hacen sus medidas espectrales, es decir, si

$$[E^1(B_1), E^2(B_2)] = 0 \quad \forall B_1, B_2 \in \mathcal{B}_{\mathbb{R}} .$$

Nota 5.1.5. *En el caso en que \hat{A}_1 y \hat{A}_2 sean acotados, lo anterior es equivalente a que conmuten \hat{A}_1 y \hat{A}_2 , pero en general no. De hecho, E. Nelson demostró en 1959 que existen operadores esencialmente autoadjuntos incluso definidos sobre un mismo dominio para los que $[\hat{A}_1, \hat{A}_2] = 0$ pero cuyas medidas espectrales no conmutan.*

Tras haber definido el concepto de que dos operadores conmuten, podemos continuar estableciendo los postulados como sigue:

Postulado 5. *Si los operadores asociados a dos observables cualesquiera conmutan, entonces existe una base ortonormal de \mathcal{H} formada por autoestados comunes a ambos operadores.*

Definición 5.1.6 (Conjunto completo de observables). *Dado un conjunto de observables $\{\hat{K}_1, \dots, \hat{K}_n\}$, decimos que el conjunto es un **conjunto completo de observables (CC-DO)** si todos conmutan entre sí y además todo vector de la base de \mathcal{H} formada por autoestados comunes a todos ellos se encuentra unívocamente determinado por el resultado de medir simultáneamente las magnitudes físicas asociadas a cada uno de dichos observables.*

Nota 5.1.7. *Matemáticamente, el postulado anterior equivale, en virtud de los postulados anteriores, a que todo autoestado quede unívocamente determinado por los autovalores que tiene asociados para ese conjunto de operadores.*

Decimos que el espectro de un operador \hat{T} es no degenerado si

$$\dim \ker(\hat{T} - \lambda \hat{I}) = 1, \quad \forall \lambda \in \sigma(\hat{T}).$$

Así, si el espectro de un operador es no degenerado, el conjunto formado por dicho operador ya es un conjunto completo de observables, y también lo será cualquier conjunto formado por dicho operador y operadores que conmuten con él.

5.1.5. Postulado 6: Interpretación probabilística

Si tenemos un (CCDO) $\{\hat{K}_1, \dots, \hat{K}_N\}$, denotamos por $\{\kappa_m\}_m$ al conjunto formado por autoestados comunes, de tal manera que $\hat{K}_n |\kappa_m\rangle = \lambda_{n,m} \kappa_m, \forall n \in \{1, \dots, N\}, m \in \mathbb{N}$.

Con esta notación, establecemos que:

Postulado 6. *Dado un estado ψ de un sistema físico, la probabilidad de que al medir en dicho estado las magnitudes físicas asociadas a los operadores \hat{K}_n se obtenga como resultado los valores $\{\lambda_{n,m}\}_n$ viene dada por $|(\kappa_m, \psi)|^2$.*

El postulado anterior en realidad es un postulado estrictamente físico, en el sentido de que lo único que hace es dotar de significado físico a una probabilidad matemática que existe más allá del mismo. Si un conjunto de observables conmuta en el sentido que definimos anteriormente (i.e. si conmutan sus medidas espectrales), entonces se puede demostrar que para cada estado ψ , la función

$$P_\psi(B_1 \times \dots \times B_n) = (E^1(B_1) \cdots E^n(B_n)\psi, \psi)_\mathcal{H},$$

es una medida de probabilidad sobre \mathbb{R}^n .

De manera más general, si \hat{A} es un operador asociado a un observable, la probabilidad de que al medir el observable correspondiente se obtenga el valor λ se obtiene sumando en los κ_m asociados a ese mismo autovalor.

Definición 5.1.8 (Valor esperado de un observable en un estado). *El valor esperado de un observable A en el estado ψ , que notamos por $\langle \hat{A} \rangle_\psi$, viene dada por la proyección de $\hat{A}\psi$ sobre el propio estado ψ , es decir $(\hat{A}\psi, \psi)$.*

Si recurrimos a la representación espectral, obtenemos que

$$\langle \hat{A} \rangle_\psi = \int_{\mathbb{R}} \lambda dE_{\psi, \psi}(\lambda),$$

y estará bien definido siempre que $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})$.

Definición 5.1.9 (Dispersión de un observable en un estado). *Se define la dispersión de \hat{A} en el estado $\psi \in \mathcal{D}(\hat{A})$ como la desviación estándar $\Delta_\psi \hat{A} = \sqrt{\text{var}_\psi(\hat{A})}$, donde*

$$\text{var}_\psi(\hat{A}) = \int_{\mathbb{R}} (\lambda - \langle \hat{A} \rangle_\psi)^2 dE_{\psi, \psi}(\lambda) = ((\hat{A} - \langle \hat{A} \rangle_\psi I)^2 \psi, \psi)_\mathcal{H} = \|\hat{A}\psi - \langle \hat{A} \rangle_\psi \psi\|_\mathcal{H}^2.$$

Proposición 5.1.10. *Si ψ es un autoestado de \hat{A} , entonces su dispersión es 0. Recíprocamente, si $\text{var}_\psi(\hat{A}) = 0$, entonces ψ es un autoestado de \hat{A} con autovalor $\langle \hat{A} \rangle_\psi$.*

A modo de conclusión de los resultados relacionados con el Postulado 6, vamos a enunciar y demostrar el denominado *Principio de Indeterminación de Heisenberg*, que en su forma general se puede enunciar como sigue:

Teorema 5.1.11 (Principio de Indeterminación). *Sean dos operadores autoadjuntos \hat{S}, \hat{T} y sea \hat{C} su conmutador, $\hat{C} = [\hat{S}, \hat{T}] = \hat{S}\hat{T} - \hat{T}\hat{S}$, se cumple que, $\forall \psi \in \mathcal{D}(\hat{C})$,*

$$(\Delta_\psi \hat{S})(\Delta_\psi \hat{T}) \geq \frac{1}{2} |\langle \hat{C} \rangle_\psi| \quad (5.2)$$

Demostración. Obsérvese que $\hat{A} := \hat{S} - \langle \hat{S} \rangle_\psi I$ y $\hat{B} := \hat{T} - \langle \hat{T} \rangle_\psi I$ son autoadjuntos, ya que $\langle \hat{S} \rangle_\psi, \langle \hat{T} \rangle_\psi \in \mathbb{R}$ por serlo \hat{S} y \hat{T} . Además, $[\hat{A}, \hat{B}] = \hat{C}$. Por tanto, por la definición de valor esperado,

$$|\langle \hat{C} \rangle_\psi| = |\langle \psi | \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A} | \psi \rangle| \leq |(\hat{B}\psi, \hat{A}\psi)_\mathcal{H}| + |(\hat{A}\psi, \hat{B}\psi)_\mathcal{H}| \leq 2\|\hat{A}\psi\|_\mathcal{H}\|\hat{B}\psi\|_\mathcal{H}.$$

Como \hat{A} es autoadjunto, $\|\hat{A}\psi\|_\mathcal{H}^2 = (\hat{A}^2\psi, \psi)_\mathcal{H}$. Recordando la definición de \hat{A} , deducimos que $\|\hat{A}\psi\|_\mathcal{H}^2 = \text{var}_\psi(\hat{S})$. Análogamente para \hat{B} , $\|\hat{B}\psi\|_\mathcal{H}^2 = \text{var}_\psi(\hat{T})$, obteniendo así al tomar raíces cuadradas la expresión del enunciado. \square

5.1.6. Postulado 7: Caracterización de los estados a partir de las amplitudes de probabilidad

Postulado 7. *La máxima información que podemos extraer de un sistema físico en un estado ψ es el conjunto de amplitudes de probabilidad asociado a las magnitudes físicas correspondientes con un conjunto completo de observables, entendidas como las amplitudes de probabilidad de que al medir en ese estado un cierto observable se obtenga un cierto autovalor de dicho observable.*

Como consecuencia del postulado anterior, todo estado cuántico ψ queda unívocamente determinado por las amplitudes de probabilidad que se obtienen para ese estado respecto de cualquier conjunto completo de observables, sea cual sea este conjunto. De este modo, los conjuntos completos de observables no sólo son equivalentes en el sentido matemático, ya que postulamos que todos generan bases ortonormales del espacio vectorial, sino también en el sentido físico, ya que todos determinan de la misma manera todos los posibles estados del sistema físico en cuestión.

Lo anterior introduce el concepto de *representaciones* de un estado respecto distintas bases. Las más conocidas en lo que se conoce como Formalismo de Primera Cuantización son la representación de coordenadas (en la que el conjunto completo de observables es el formado por el operador de posición) y la representación de cantidades de movimiento (en la que el conjunto completo de observables está formado por el operador cantidad de movimiento). Posteriormente veremos el caso de la representación de coordenadas de manera más desarrollada.

5.1.7. Postulado 8: Principio de correspondencia

Postulado 8. *Si una magnitud física se puede expresar clásicamente como función de otras magnitudes, su correspondiente operador cuántico puede obtenerse sustituyendo las magnitudes de las que depende funcionalmente por sus correspondientes operadores cuánticos.*

Nota 5.1.12. *Este postulado justifica que hayamos trabajado en el concepto de cálculo funcional para obtener el Teorema Espectral. Veremos que, cuando fijemos una base de autoestados asociados a una cierta magnitud física concreta, si clásicamente otra magnitud física depende funcionalmente de la magnitud que genera la base, el observable asociado a esta magnitud se obtiene aplicando un cálculo funcional a la expresión clásica. Por otra parte, en la propia definición de CCDO está implícito en realidad que cualquier magnitud física se debe poder expresar en función de las magnitudes asociadas a los observables de CCDO.*

Veamos un ejemplo para esclarecer el significado de este postulado.

Ejemplo 5.1.13. Para esclarecer el significado de este postulado vamos a considerar el caso de la energía cinética no relativista. Clásicamente, la energía cinética de una partícula puede expresarse en función de su momento lineal como

$$K = \frac{p^2}{2m}.$$

Si trabajamos en la representación de coordenadas, el operador \hat{p} se puede demostrar que puede expresarse como $\hat{p} = -i\hbar\nabla$, de manera que por el postulado, el operador asociado a la energía cinética \hat{K} será simplemente

$$\hat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2.$$

5.1.8. Postulado 9: El Hamiltoniano y la Ecuación de Schrödinger

Postulado 9. Dado cualquier instante de tiempo t , existe un operador lineal $\hat{T}(t)$ que proyecta dicho estado un tiempo t hacia el futuro, de tal manera que si en el instante inicial los estados del sistema están descritos en términos del CCDO $\{\hat{K}_m\}$ y tras un tiempo t están descritos respecto del CCDO $\{\hat{L}_n\}$, entonces, si en el instante inicial el sistema se encuentra en el estado $\psi(0)$ y tras un tiempo t en el estado $\psi(t)$, la probabilidad de que en t obtengamos al medir las magnitudes físicas asociadas a $\{\hat{L}_n\}$ un cierto conjunto de valores asociados al autoestado l_n viene dada por

$$(l_n, \psi(t)) = \sum_m (l_n, \hat{T}(t)\kappa_m)(\kappa_m, \psi(0)). \quad (5.3)$$

donde además $(l_n, \hat{T}(t)\kappa_m)$ tiene el significado físico de la probabilidad de que si el sistema inicialmente se encuentra en el estado κ_m , posteriormente se encuentre en el estado l_n .

Definición 5.1.14 (Operador de evolución). Al operador $\hat{T}(t)$ se le denomina **operador de evolución**, debido a que, a partir de su linealidad, es posible deducir que $\psi(t) = \hat{T}(t)\psi(0)$.

Para continuar con el desarrollo, vamos a introducir de manera breve la teoría de semigrupos de operadores uniparamétricos fuertemente continuos.

Definición 5.1.15 (Semigrupo uniparamétrico). Sea X es un espacio de Banach, un **semigrupo uniparamétrico** de operadores sobre X es una familia de operadores indexados sobre los números reales no negativos $\{T(t)\}_{t \in [0, \infty)}$ tal que

1. $T(0) = I$.
2. $T(s+t) = T(s) \circ T(t)$, $\forall t, s \geq 0$.

Definición 5.1.16 (Semigrupos uniparamétricos fuertemente continuos). Un semigrupo uniparamétrico de operadores sobre X se dice **fuertemente continuo** si y sólo si la aplicación $t \mapsto T(t)x$ es continua $\forall x \in X$, donde $[0, \infty)$ tiene la topología euclídea y X la topología heredada de la norma.

Definición 5.1.17 (Generador infinitesimal de un semigrupo uniparamétrico). *Se define el generador infinitesimal del semigrupo de operadores uniparamétricos T como el operador A definido sobre un subespacio propio de X como:*

1. $\mathcal{D}(A) = \{x \in X : \exists \lim_{h \rightarrow 0^+} h^{-1}(T(h)x - x)\}$.

2. $Ax = \lim_{h \rightarrow 0^+} h^{-1}(T(h)x - x)$, es decir, A es la derivada en 0 de la función $t \mapsto T(t)x$.

El siguiente resultado forma parte del denominado Teorema de Hille-Yosida, cuya versión general podemos encontrar por ejemplo en [6]. La demostración de la parte que recogemos nosotros la podemos encontrar en [9].

Teorema 5.1.18. *El generador infinitesimal de un semigrupo-uniparamétrico de operadores fuertemente continuo es un operador cerrado y su dominio es un subespacio denso en X .*

Lo primero que podemos observar es que la familia de operadores de evolución dada por $\{\widehat{T}(t)\}_{t \geq 0}$ tiene estructura de semigrupo-uniparamétrico, ya que por el significado físico de \widehat{T} es claro que

1. $\widehat{T}(0) = I$.

2. $\widehat{T}(s+t) = \widehat{T}(s)\widehat{T}(t)$.

Por otra parte, por razonamientos físicos también podemos deducir que de hecho \widehat{T} debe generar un semigrupo-uniparamétrico fuertemente continuo. Por lo tanto, llamando \widehat{H} al generador infinitesimal del semigrupo, tendremos que

$$\widehat{T}(t) = e^{\frac{it}{\hbar}\widehat{H}},$$

es decir, $i\hbar \frac{d\widehat{T}(t)}{dt} = \widehat{H}(t)\widehat{T}(t)$. Al aplicar el operador $\widehat{T}(t)$ a un estado $\psi(0)$ obtenemos la denominada **Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo**:

$$i\hbar \frac{\partial \psi(t)}{\partial t} = \widehat{H}(t)\psi(t). \tag{5.4}$$

Nota 5.1.19. *En virtud del Postulado 9, la Ecuación de Schrödinger será la ecuación que determine la evolución temporal de los estados de nuestro sistema físico. Matemáticamente, es una ecuación diferencial que en general será una ecuación en derivadas parciales cuando pasemos a una representación concreta, como veremos más adelante. En cualquier caso, es una ecuación lineal de primer orden en el tiempo, lo cual es consecuente con el Principio de superposición, ya que cualquier combinación lineal de soluciones de la ecuación de Schrödinger también será solución de la misma.*

Además, el hecho de que sea de primer orden en el tiempo tiene consecuencias físicas profundas. Las ecuaciones que juegan el mismo papel en Física Clásica que la ecuación de Schrödinger en Física Cuántica son las ecuaciones que se derivan de la Segunda Ley de Newton, que son de segundo orden en el tiempo. En Física Clásica, esto tiene como consecuencia que para conocer la evolución de, pongamos por ejemplo, una partícula sometida a un sistema de fuerzas, es necesario conocer tanto su posición como su velocidad en un instante de tiempo dado. Sin embargo, para conocer el estado de un sistema cuántico en cualquier instante de tiempo, sólo es necesario conocer su estado en un instante de tiempo dado.

Definición 5.1.20 (Hamiltoniano cuántico). *El operador \hat{H} que aparece en la Ecuación de Schrödinger se denomina **hamiltoniano cuántico**, y representa el operador del que depende la evolución temporal del sistema físico en cuestión.*

Obsérvese que en el desarrollo anterior en ningún momento hemos pedido que \hat{H} sea hermítico, y en general no tiene por qué serlo. De hecho (para más información se puede consultar [16]) dentro del marco de la Teoría Cuántica de Campos se puede demostrar que la hermiticidad del operador hamiltoniano es equivalente a que se conserven una serie de simetrías que se resumen en las siglas CPT (asociadas a la carga, paridad e inversión temporal). Por tanto, la no hermiticidad del hamiltoniano es de hecho una condición necesaria para trabajar con sistemas físicos en los que se viola la simetría CPT, lo cual constituye un marco de investigación vigente en física teórica.

Se puede demostrar, sin embargo, que en el caso en que \hat{H} sea hermítico, entonces el operador de evolución es unitario $\forall t$, por lo que $\hat{T}(t)$ conserva los productos escalares y, por los postulados, también la probabilidad de que el sistema se encuentre en un cierto estado.

En el caso en que el sistema admita un hamiltoniano clásico, el hamiltoniano cuántico sí coincide con el operador obtenido al aplicar el Principio de correspondencia a dicho hamiltoniano, y en consecuencia en esos casos el operador obtenido siempre es autoadjunto. Esos son los casos que van a ocuparnos en los ejemplos que vamos a ver a continuación.

Nota 5.1.21. *En [3] el operador de evolución y el operador hamiltoniano cuántico se obtienen utilizando el Teorema de Stone y suponiendo que el operador T es unitario, en cuyo caso \hat{H} es directamente hermítico.*

5.2. Representaciones. La función de onda

En la sección anterior, al desarrollar los Postulados hemos trabajado siempre con un espacio de Hilbert abstracto \mathcal{H} al que en virtud del Postulado 1 pertenecen los estados cuánticos del sistema físico en cuestión. Este espacio constituye en última instancia una herramienta teórica, ya que en virtud del Postulado 7, la máxima información que podemos obtener de un sistema físico no es el estado en sí mismo, sino la probabilidad de que si el sistema se encuentra en dicho estado obtengamos ciertos valores al medir un conjunto de magnitudes cuyos operadores formen un conjunto completo de observables. Así, para estudiar un sistema cuántico en primer lugar hay que establecer qué observables constituyen nuestro conjunto completo. Fijado este conjunto, los estados físicos podrán desarrollarse en la base de \mathcal{H} dada por este CCDO, y quedará completamente determinado a partir de los correspondientes coeficientes.

La primera elección que puede hacerse para este CCDO es, en el caso de sistemas físicos formados por una única partícula, el conjunto formado por el operador de posición \hat{x} . Conforme se va profundizando en el estudio de la Mecánica Cuántica, es fácil encontrar situaciones físicas en las que este operador no constituya un conjunto completo por sí mismo. En particular, el Experimento de Stern-Gerlach [2] puso de manifiesto la necesidad de considerar una nueva magnitud física sin análogo clásico (el espín) para obtener un CCDO en determinadas situaciones. Sin embargo, el conjunto formado por el operador de posición constituye frecuentemente el punto de partida para empezar el estudio de los sistemas cuánticos.

Comúnmente, cuando un operador tiene un espectro discreto $\{\lambda_n\}_n$ y existe $\{u_n\}_n$ una base de \mathcal{H} formada por autoestados de este operador, podemos desarrollar cualquier estado $\varphi \in \mathcal{H}$ como $\varphi = \sum_{n=1}^{\infty} (u_n, \varphi) u_n$. Sin embargo, en multitud de ocasiones en Física, y en particular en el caso del operador de posición, los operadores tienen espectros continuos. En estos casos, por los Postulados, siempre que el operador considerado forme un (CCDO), aún sigue siendo posible desarrollar cualquier estado como combinación lineal de autoestados del operador, pero a través de una integral respecto de una cierta medida.

Dado $\varphi \in \mathcal{H}$, consideramos el operador de proyección sobre φ , $\hat{P}_\varphi(u) = (u, \varphi)u$. Las proyecciones son operadores autoadjuntos, por lo que por el Teorema Espectral 2.3.12, debe existir una medida espectral E sobre \mathbb{R} tal que

$$\hat{P}_\varphi = \int_{\mathbb{R}} t dE(t)$$

en el sentido de que $(\hat{P}_\varphi(u), v)_{\mathcal{H}} = \int_{-\infty}^{\infty} t dE_{u,v}(t)$. Por tanto,

$$\varphi = \int_{\mathbb{R}} (u_x, \varphi) u_x dx.$$

Cuando el espectro de un operador \hat{K} que constituye por sí mismo un CCDO es discreto, la expresión de un estado ψ en términos de los autoestados φ_n (de tal manera que $\hat{K}\varphi_n = \kappa_n\varphi_n$) será $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi(n)\varphi_n$, donde estamos notando a los coeficientes $\psi(n)$ para reflejar su dependencia con ψ . Recordemos que, en virtud del Postulado 6, $|\psi(n)|^2$ será la

probabilidad de que al medir en el estado ψ la magnitud asociada al operador \widehat{K} se obtenga el valor κ_n .

Realmente, la expresión $\psi = \sum_{n=1}^{\infty} \psi(n)\varphi_n$ debemos entenderla como que, $\forall \phi \in \mathcal{H}$,
 $(\psi, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi(n)(\varphi_n, \phi)$. En el caso en que el espectro de \widehat{K} sea degenerado, podemos escribir que $(\psi, \phi) = \sum_{n=1}^{\infty} \psi(n)P_n(\phi)$, donde $P_n(\phi)$ es la proyección del estado ϕ sobre el espacio de autovectores asociados al autovalor κ_n .

Visto de este modo, la generalización al caso en que el espectro de \widehat{K} sea continuo se puede expresar en términos de medidas espectrales del siguiente modo. Dado un estado ψ , existirá una medida espectral E_ψ de tal manera que para cualquier $\phi \in \mathcal{H}$,

$$(\psi, \phi)_{\mathcal{H}} = \int_{\sigma(\widehat{K})} \psi(\kappa) d(E_\psi(\kappa)\psi, \phi)_{\mathcal{H}}.$$

Existen motivos físicos para que el operador de posición \widehat{x} tenga en la mayor parte de los casos un espectro continuo. En consecuencia, en virtud de los postulados, cualquier estado ψ deberá poder desarrollarse según la expresión anterior. En este caso, los coeficientes $\psi(x)$ tendrán como significado que $|\psi(x)|^2$ será la densidad de probabilidad de presencia de la partícula, lo que comúnmente se denomina *función de onda*.

Definición 5.2.1 (Función de onda). *Dado un estado $\psi \in \mathcal{H}$, se define su **función de onda** como la aplicación $\psi : x \in \mathbb{R} \mapsto \psi(x) \in \mathbb{R}$ que a cada x real le asocia el coeficiente $\psi(x)$ del desarrollo de ψ a partir del operador de posición \widehat{x} .*

Así, la resolución de un sistema físico se reduce a determinar esta función de onda, y es lo que haremos en dos problemas físicos conocidos posteriormente, a la vez que daremos la representación espectral de los operadores hamiltonianos correspondientes.

Nota 5.2.2. *Por el significado físico de la función de onda, ésta debe pertenecer, como función de x , a $L^2(\mathbb{R})$.*

Nota 5.2.3. *Al reducir el estudio del sistema físico a la determinación de la función de onda, decimos que estamos trabajando en la representación de coordenadas. Existen multitud de representaciones posibles y utilizadas, pero podemos destacar especialmente la representación de cantidades de movimiento, en la que el CCDO es el formado por el operador cantidad de movimiento.*

5.2.1. Estudio del operador de posición en la representación de coordenadas

Al fijar la representación, aplicando el Principio de Correspondencia (Postulado 8) los observables se expresarán en términos de los operadores del CCDO dado como un cálculo funcional de dichos operadores a partir de la dependencia funcional que tengan unos de otros

clásicamente. En el caso de la representación de coordenadas, es claro que el operador de posición se definirá como operador de $L^2(\mathbb{R})$ como sigue

$$\hat{x} : f(x) \mapsto xf(x),$$

y tendrá como dominio

$$\mathcal{D}(\hat{x}) = \{f \in L^2(\mathbb{R}) : [xf(x)] \in L^2(\mathbb{R})\}.$$

Obsérvese que es no acotado, ya que $\forall n \in \mathbb{N}$, tenemos que $\|\chi_{(n,n+1)}\|_2 = 1$ y $\|\hat{x}\chi_{(n,n+1)}\|_2 \geq n$.

Proposición 5.2.4. *El operador de posición \hat{x} es autoadjunto y $\sigma(\hat{x}) = \mathbb{R}$ pero no tiene autovalores.*

Demostración. Es claro que \hat{x} es simétrico, ya que si $f, g, [xf(x)], [xg(x)] \in L^2(\mathbb{R})$ entonces

$$(\hat{x}f, g)_2 = \int_{\mathbb{R}} xf(x)\overline{g(x)}dx = \int_{\mathbb{R}} f(x)xg\overline{(x)}dx = (f, \hat{x}g)_2.$$

Tenemos que probar que $\mathcal{D}(\hat{x}^*) \subset \mathcal{D}(\hat{x})$. Dado $g \in \mathcal{D}(\hat{x}^*)$ entonces $\exists g^* \in L^2(\mathbb{R})$ tal que $(\hat{x}f, g)_2 = (f, g^*)_2, \forall f \in \mathcal{D}(\hat{x})$. Por tanto, $\forall \varphi \in \mathcal{D}(\hat{x})$,

$$\int_{\mathbb{R}} \varphi(x)\overline{xg(x)}dx = \int_{\mathbb{R}} \varphi(x)\overline{g^*x(x)}dx,$$

de donde se deduce que $g^*(x) = xg(x)$ e.c.t \mathbb{R} . En particular, deducimos que $xg(x) \in L^2(\mathbb{R})$ y por tanto $g \in \mathcal{D}(\hat{x})$, de manera que $\mathcal{D}(\hat{x}^*) \subset \mathcal{D}(\hat{x})$ y \hat{x} es autoadjunto.

Por último, si $\lambda \notin \sigma(\hat{x})$, entonces $\hat{T} := (\hat{x} - \lambda\hat{I})^{-1} \in \mathcal{L}(L^2(\mathbb{R}))$, y dado $g \in L^2(\mathbb{R})$, si $(\hat{x} - \lambda\hat{I})\hat{T}g = g$ entonces $(\hat{T}g)(x) = \frac{g(x)}{x - \lambda} \in L^2(\mathbb{R})$. Por tanto, $\lambda \notin \mathbb{R}$, ya que en tal caso, tomando $g = \chi_{(\lambda,b)}, \frac{g(x)}{x - \lambda} \notin L^2(\mathbb{R})$. Concluimos así que $\sigma(\hat{x}) \subset \mathbb{R}$. \square

A modo de conclusión, veamos como ejemplo el caso del operador cantidad de movimiento.

Ejemplo 5.2.5 (El operador cantidad de movimiento en la representación de coordenadas). *Clásicamente, el operador cantidad de movimiento se define como $p = mv$, donde v es la velocidad, pero cuánticamente se expresa en términos de x como $\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}$. Este operador, que es proporcional al operador derivada distribucional, ya vimos que tiene por dominio el espacio de Sobolev $H^1(\mathbb{R})$. Por las propiedades de la transformada de Fourier, $f \in L^2(\mathbb{R})$ si y sólo si $\hat{f} \in L^2(\mathbb{R})$, y tanto f como $x\hat{f}(x)$ están en $L^2(\mathbb{R})$ si y sólo si $f, f' \in L^2(\mathbb{R})$; por tanto, si \mathcal{F} es la transformada de Plancherel, deducimos que, $\mathcal{F}(\mathcal{D}(\hat{x})) = H^1(\mathbb{R}) = \mathcal{D}(\hat{p})$.*

Nota 5.2.6. *En las condiciones anteriores, \hat{p} se denomina el operador conjugado de \hat{x} , y de hecho, se puede demostrar que es el único operador que cumple que $[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar$.*

5.3. Resolución de problemas físicos concretos

Para concluir el trabajo, vamos a aplicar el Teorema Espectral (Teorema 2.3.12) para obtener la resolución espectral de dos operadores hamiltonianos de sistemas cuánticos fundamentales en el desarrollo histórico de la Mecánica Cuántica. Para ello, a parte de algunas herramientas de Análisis Funcional y Variable Compleja, necesitaremos también dar por conocidas las soluciones de ciertas ecuaciones diferenciales que nos irán apareciendo al intentar resolver las correspondientes Ecuaciones de Schrödinger. Para más información sobre la resolución detallada de estas ecuaciones, se puede consultar por ejemplo [1, 11].

5.3.1. El oscilador armónico

En Física, se denomina oscilador armónico a cualquier sistema de partículas que producen oscilaciones respecto de ciertas posiciones de equilibrio sometidas a fuerzas de la forma $F = kx$, donde k es una constante que recibe el nombre de constante elástica. Si las partículas tienen masa m , estas oscilaciones se producen con una frecuencia característica $\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}$.

El oscilador armónico monodimensional se corresponde con la versión de oscilador armónico más sencilla: la de una única partícula que realiza oscilaciones en una única dirección. A pesar de su simplicidad, el oscilador armónico monodimensional representa una de las situaciones físicas más empleadas para modelar fenómenos mucho más complejos tanto en Física Clásica como en Física Cuántica (ver por ejemplo las aplicaciones en el estudio de la dinámica reticular de cristales en [13]), y por tanto es de interés estudiar tanto su versión clásica como su versión cuántica. Clásicamente, la resolución del oscilador armónico involucra la resolución de las correspondientes ecuaciones de Newton, pero ese problema nosotros no lo vamos a abordar. Nuestro interés es el de aplicar la teoría que hemos desarrollado hasta el momento a la versión cuántica de una partícula que se encuentra sometida a este tipo de interacciones. En virtud de los postulados, sabemos que el problema se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger para el correspondiente hamiltoniano cuántico, y en virtud del Principio de correspondencia, el hamiltoniano cuántico se obtendrá a partir del hamiltoniano clásico sustituyendo los correspondientes operadores asociados a las distintas magnitudes físicas que aparezcan en él.

El hamiltoniano clásico del oscilador armónico viene dado por:

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

por lo que por el Principio de correspondencia, el hamiltoniano cuántico vendrá dado por:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \hat{x}^2$$

Si trabajamos en la representación de coordenadas, ya sabemos que $\hat{p} \mapsto -i\hbar \frac{d}{dx}$, por lo que la ecuación de Schrödinger quedaría:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(x, t) = \left(-\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \Phi(x, t).$$

Como el hamiltoniano no depende del tiempo, por separación de variables podemos buscar soluciones de la forma $\Phi(x, t) = \psi(x)T(t)$ donde T será de la forma $T(t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t}$ y ψ será solución de la Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

$$\left(-\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x).$$

Es decir, el problema se reduce a conocer los autovalores y autovectores del operador hamiltoniano.

Obsérvese que $\mathcal{D}(H)$ contiene a

$$\mathcal{S}(\mathbb{R}) = \left\{ \phi \in \varepsilon(\mathbb{R}) : \sup_{x \in \mathbb{R}: |\alpha| \leq N} (1 + |x|^2)^N |D^\alpha \phi(x)| < \infty, \forall N \in \{0, 1, \dots\} \right\},$$

que es denso en $L^2(\mathbb{R})$, y sobre este espacio claramente se verifica que

$$(H\phi, \psi)_2 = (\phi, H\psi)_2$$

por lo que H es simétrico. Vamos a ver que es esencialmente autoadjunto.

Considerando el cambio de variable $y = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}x$, podemos escribir el hamiltoniano como $\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(y^2 - \frac{d^2}{dy^2} \right)$.

Definimos ahora

$$\mathcal{F} := \left\{ P(x)e^{-\frac{x^2}{2}}; P \text{ polinomio} \right\}.$$

Este espacio es un subespacio de $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ que está generado por las funciones de la forma $x^n e^{-\frac{x^2}{2}}$. Vamos a utilizar este espacio para probar que \hat{H} es esencialmente autoadjunto y para caracterizar sus autovalores y autofunciones.

Teorema 5.3.1. *El subespacio $\mathcal{F} \subset \mathcal{S}(\mathbb{R})$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$ y el proceso de Gram-Schmidt aplicado a $\left\{ x^n e^{-\frac{x^2}{2}} \right\}_n$ genera una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R})$, que llamaremos $\{\tilde{\psi}_n\}_n$. Las funciones $\tilde{\psi}_n$ están en $\mathcal{S}(\mathbb{R})$ y por tanto en $\mathcal{D}(H)$, y son autofunciones con autovalores $\lambda_n = n + \frac{1}{2}$.*

Demostración. Definimos los operadores de aniquilación y destrucción como:

$$\begin{cases} \hat{A} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x + \frac{d}{dx} \right) \\ \hat{B} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \end{cases}$$

El dominio de estos operadores también contiene a \mathcal{F} , por lo que sobre \mathcal{F} obsérvese que H puede expresarse como

$$\hat{H} = \hat{B}\hat{A} + \frac{1}{2}I = \hat{A}\hat{B} - \frac{1}{2}I$$

En particular, tenemos que $[\hat{H}, \hat{B}] = \hat{H}\hat{B} - \hat{B}\hat{H} = \hat{B}\hat{A}\hat{B} + \frac{1}{2}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\hat{B} + \frac{1}{2}\hat{B} = \hat{B}$. Por tanto, dada $\psi \in \mathcal{F}$ autofunción de \hat{H} con autovalor λ ($H\psi = \lambda\psi$), si $\hat{B}\psi \neq 0$, tendremos

que $\widehat{H}(\widehat{B}\psi) = \widehat{B}(\widehat{H}\psi) + \widehat{B}\psi = \lambda\widehat{B}\psi + B\psi = (\lambda + 1)\widehat{B}\psi$, de manera que $\forall\lambda$ autovalor de \widehat{H} , $\lambda + 1$ también es autovalor de \widehat{H} .

Sea ahora $\psi_0(x) := e^{-\frac{x^2}{2}}$, tendremos que

$$\begin{aligned}\widehat{H}\psi_0(x) &= \frac{1}{2} \left(x^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right) e^{-\frac{x^2}{2}} = \frac{1}{2} \left(x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} + \frac{d}{dx} (x e^{-\frac{x^2}{2}}) \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left(x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} - x^2 e^{-\frac{x^2}{2}} + e^{-\frac{x^2}{2}} \right) = \frac{1}{2} e^{-\frac{x^2}{2}} = \frac{1}{2} \psi_0(x),\end{aligned}$$

es decir, $\psi_0(x)$ es autofunción de \widehat{H} con autovalor $\frac{1}{2}$.

Obsérvese ahora que

$$\widehat{B}\psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x - \frac{d}{dx} \right) \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(x e^{-\frac{x^2}{2}} + x e^{-\frac{x^2}{2}} \right) = \sqrt{2} x e^{-\frac{x^2}{2}},$$

que es proporcional a $x e^{-\frac{x^2}{2}}$. Definimos por tanto $\psi_n := (\sqrt{2}\widehat{B})^n \psi_0$, y por lo anterior sabemos que $\forall n \in \mathbb{N}$, ψ_n es autofunción de \widehat{H} con autovalor $n + \frac{1}{2}$, y además $\psi_n(x) = H_n(x) e^{-\frac{x^2}{2}}$ donde H_n es un polinomio en x de grado n , denominado el *n-ésimo polinomio de Hermite*. Además, como son autofunciones de \widehat{H} asociadas a autovalores diferentes, sabemos que son ortogonales, y constituyen trivialmente un sistema generador de \mathcal{F} .

Vamos a ver ahora que \mathcal{F} es denso en $L^2(\mathbb{R})$. Sea $f \in L^2(\mathbb{R})$ ortogonal a las funciones $x^n e^{-\frac{x^2}{2}}$ (es decir, $(x^n e^{-\frac{x^2}{2}}, f(x))_2 = 0$, $\forall n \in \mathbb{N}$), vamos a ver que $f \equiv 0$. Para ello, definimos la función compleja: $F(z) := \int_{\mathbb{R}} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-2\pi i x z} dx$. Es claro que F es continua, y por el Teorema de Morera deducimos también que es holomorfa, ya que la función $G(z) = \int_{\mathbb{R}} \frac{i}{2\pi} f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-2\pi i x z} dx$ es una primitiva de F en \mathbb{C} . Por tanto, F es entera, y de hecho $F^{(n)}(z) = (-2\pi i)^n \int_{\mathbb{R}} x^n f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} e^{-2\pi i x z} dx$. Por tanto, $F^{(n)}(0) = (x^n e^{-\frac{x^2}{2}}, f(x))_2 = 0$, $\forall n \in \mathbb{N}$, por lo que $F \equiv 0$. Aplicando el Teorema de Inversión de Fourier, obtenemos que $f(x) e^{-\frac{x^2}{2}} = 0$, $\forall x \in \mathbb{R}$ y por tanto $f \equiv 0$. \square

Corolario 5.3.2. *El hamiltoniano cuántico del oscilador armónico es un operador esencialmente autoadjunto.*

Demostración. Es consecuencia directa del Teorema 3.3.10. \square

Así, si llamamos igualmente \widehat{H} a la extensión autoadjunta del hamiltoniano del oscilador armónico, por el Teorema Espectral \widehat{H} admitirá la representación espectral

$$\widehat{H} = \int_{\sigma(H)} \lambda dE(\lambda) = \hbar\omega \sum_{n=0}^{\infty} \left(n + \frac{1}{2} \right) E(\lambda_n), \quad (5.5)$$

y dado $\psi \in \mathcal{H}$, $(E(\lambda_n)\psi, \psi)_{\mathcal{H}}$ es la amplitud de probabilidad de medir el valor de energía $\hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right)$ para una partícula que se encuentra en el estado ψ .

5.3.2. El átomo de hidrógeno

Para concluir este trabajo, vamos a resolver por último el hamiltoniano asociado al sistema físico paradigmático de los orígenes de la Mecánica Cuántica: el átomo de hidrógeno.

El átomo de hidrógeno es el caso más sencillo de los denominados átomos hidrogenoides, los átomos que sólo tienen un electrón. Su relevancia, más allá de su repercusión en la historia de la Física, pasa porque es el único sistema atómico cuya ecuación de Schrödinger puede resolverse de manera analítica. De hecho, las soluciones de átomos con más electrones se obtienen en general mediante métodos iterativos trabajando con las soluciones obtenidas para el correspondiente átomo hidrogenoide e introduciendo principios físicos como el Principio de Exclusión de Pauli (ver [12]).

Por tanto, el sistema que buscamos resolver consiste en un átomo constituido por un núcleo formado por un único protón y un electrón orbitándolo debido a la interacción coulombiana. Para encontrar la energía asociada a esta interacción, vamos a considerar la aproximación no relativista, dentro de la cual esta viene dada simplemente a partir de la Ley de Coulomb como

$$V(x) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x|},$$

siendo x la distancia entre el protón y el electrón. El hamiltoniano obtenido a partir de esta interacción se reduce a:

$$H = \frac{p_e^2}{2m_e} + \frac{p_p^2}{2m_p} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x|}.$$

Y trabajando en la representación de coordenadas, llamando x_e al vector de posición del electrón y x_p al vector de posición del protón, obtenemos, aplicando el Principio de correspondencia ($p_e \mapsto i\hbar\nabla_e$, $p_p \mapsto i\hbar\nabla_p$)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla_e^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_p^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x_e - x_p|}.$$

Realizando los cambios de variables

$$\begin{cases} x = x_e - x_p & , & X = \frac{m_e x_e + m_p x_p}{m_e + m_p} \\ M = m_e + m_p & , & \mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \end{cases},$$

obtenemos:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_X^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x|},$$

y por tanto la ecuación de Schrödinger que hay que resolver es:

$$i\hbar \frac{\partial \Phi(x, X, t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_X^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x|} \right) \Phi(x, X, t).$$

Si buscamos soluciones de variables separables $\Phi(x, X, t) = \phi(x)\chi(X)T(t)$, el problema se reduce a resolver la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_X^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{|x|} \right) \phi(x)\chi(X) = E\phi(x)\chi(X).$$

que a su vez se reduce a resolver por separado las ecuaciones:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m_p} \nabla_X^2 \chi(X) = E_X \chi(X) \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_x^2 \right) \phi(x) = E_x \phi(x) \end{cases} .$$

La resolución de la primera de las dos ecuaciones es inmediata, pero la segunda no, y de hecho es complicada de abordar sin realizar un cambio de coordenadas a coordenadas esféricas:

$$x = (x_1, x_2, x_3) \mapsto (r, \theta, \varphi) \text{ tal que } \begin{cases} x_1 = r \sin \theta \cos \varphi \\ x_2 = r \sin \theta \sin \varphi \\ x_3 = r \cos \theta \end{cases} .$$

Con este cambio de coordenadas, el hamiltoniano electrónico H pasa a expresarse como:

$$\hat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} .$$

Antes de probar, como hicimos con el oscilador armónico, el carácter esencialmente autoadjunto del hamiltoniano del átomo de hidrógeno, es necesario enunciar los siguientes resultados, cuyas demostraciones omitiremos por la extensión del trabajo y porque los recursos que se utilizan para las mismas no guardan demasiada relación con la teoría que hemos ido desarrollando.

Lema 5.3.3. *Sea el espacio $\mathcal{X} = L(-\pi, \pi) \times L(0, 2\pi)$, se define el operador momento angular orbital como:*

$$\hat{L}^2 - \hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] .$$

Entonces \hat{L}^2 tiene por autovectores los denominados **armónicos esféricos**, que vienen dados por $Y_{lm}(\theta, \phi) = \mathcal{N}_{l,m} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ ($l = 0, 1, \dots$, $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$), siendo $\{P_l^m(z)\}_{m \in \mathbb{Z}}$ las denominadas funciones asociadas de Legendre, que se obtienen a partir de los polinomios de Legendre $\{P_l(z)\}_{l \in \mathbb{N}}$ aplicando

$$P_l^m(z) = (1-z^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|} P_l(z)}{dz^{|m|}} ,$$

$$\text{con } P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{dz^l} (z^2 - 1)^l .$$

Teorema 5.3.4. *El hamiltoniano del átomo de hidrógeno es un operador esencialmente autoadjunto de $L^2(\mathbb{R}^3)$.*

Demostración. Como punto de partida, observemos que podemos relacionar este operador con el operador \widehat{L}^2 del momento angular orbital, que por el Lema 5.3.3 genera una base ortonormal de \mathcal{X} formada por los denominados armónicos esféricos:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \mathcal{N}_{l,m} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi} \quad l \in \mathbb{N} \cup \{0\}, m \in \{-l, -l+1, \dots, l-1, l\} .$$

Así, expresamos el hamiltoniano en términos de L^2 como:

$$\widehat{H}_e = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} .$$

Como los armónicos esféricos son una base ortonormal de $L(-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}) \times L(0, 2\pi)$, podemos desarrollar la parte angular en términos de estos armónicos esféricos, y teniendo en cuenta que para cada (l, m) , $L^2 Y_l^m(\theta, \varphi) = \hbar^2 l(l+1) Y_l^m(\theta, \varphi)$, el problema se reduce a determinar los autovalores del operador

$$\widehat{\mathcal{R}} = -\hbar^2 \left[r \frac{\partial}{\partial r} + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \right] - 2\mu r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} + l(l+1)\hbar^2,$$

es decir, buscamos las soluciones de

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[r \frac{\partial}{\partial r} + \left(r \frac{\partial}{\partial r} \right)^2 \right] - r \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2\mu} \right\} R(r) = ER(r).$$

Realizando los cambios de variables

$$\begin{cases} u(r) = rR(r) \\ x = 2qr \quad q = \frac{\sqrt{2\mu|E|}}{\hbar} \\ \omega(x) = u\left(\frac{x}{2q}\right) \\ A = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{qe^2}{2|E|} \end{cases} ,$$

obtenemos, para los estados denominados ligados (aquellos con $E < 0$) la ecuación:

$$\frac{d^2\omega(x)}{dx^2} + \left[-\frac{1}{4} + \frac{A}{x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right] \omega = 0.$$

A partir del estudio del comportamiento asintótico de las soluciones de esta ecuación, se puede demostrar que la solución ω debe ser de la forma

$$\omega(x) = x^{l+1} e^{-\frac{x}{2}} f_l(x),$$

donde f_l es una función que debe verificar la ecuación

$$\left[x \frac{d^2}{dx^2} + (2l+2-x) \frac{d}{dx} - (l+1-A) \right] f_l(x) = 0,$$

y además cumplir una cierta relación de recurrencia que obliga a que $A \in \mathbb{N}$ y f_l sea en realidad un polinomio. Si n es el orden de f_l escribiremos $f_{n,l}$ para denotar este orden, y a partir de que $A \in \mathbb{N}$ deducimos que E es de la forma $E = E_n = -\frac{1}{16\pi^2\varepsilon^2} \frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2}$.

Por tanto, realizando los cambios $k = 2l+1$, $j = k+n-l-1$, $L_j^k(x) = f_{j-k+l+1, \frac{k-1}{2}}(x)$, obtenemos la ecuación diferencial asociada de Laguerre

$$x \frac{d^2 L_j^k}{dx^2} + (k+1-x) \frac{dL_j^k}{dx} + (j-k)L_j^k = 0,$$

que tiene por solución los denominados *polinomios asociados de Laguerre*, que se obtienen a partir de los *polinomios de Laguerre* $L_j(x)$ como

$$L_{j-k}^k(x) = \frac{d^k L_j(x)}{dx^k},$$

donde $L_j(x) = e^x \frac{d^j (x^j e^{-x})}{dx^j}$. De este modo, obtenemos que

$$\omega_{nl}(x) = \tilde{C}_{nl} x^{l+1} e^{-\frac{x}{2}} L_{n-l-1}^{2l+1}(x).$$

Y si volvemos a la coordenada r y la función $R(r)$, obtenemos que $R(r)$ es de la forma

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \frac{2}{na_0} \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l e^{-\frac{r}{na_0}} L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right),$$

donde a_0 es el denominado *radio de Böhrr*, dado por $a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$. Realizando el cambio de variables $y = \frac{r}{na_0}$, $Q_{nl}(y) = R_{nl}(na_0 y)$, obtenemos un conjunto de funciones en \mathcal{G} del que podemos extraer una conjunto formado por funciones ortonormales; por ejemplo $\mathcal{B} := \{Q_{n0}(y)\}_{n \in \mathbb{N}}$. Se puede demostrar, a partir de la ortogonalidad de los polinomios de Laguerre y siguiendo un procedimiento similar al que desarrollamos en la sección anterior con los polinomios de Hermite, que tras normalizarlos, los polinomios de Laguerre consituyen una base ortonormal de $L^2([0, \infty), x^2)$.

De hecho, la familia $\{R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)\}$ con $n = 1, 2, \dots$, $l = 0, \dots, n-1$, $m = -l, \dots, l$, es una base ortonormal de $L^2(\mathbb{R}^3)$ formada por autovectores de H , siendo sus autovalores $\{E_n\}_n = \left\{ -\frac{1}{16\pi^2\varepsilon^2} \frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2} \right\}_{n \in \mathbb{N}}$. Concluimos así que H es esencialmente autoadjunto como consecuencia del Teorema 3.3.10. \square

Si de nuevo notamos por \hat{H} a la extensión autoadjunta del hamiltoniano anterior y aplicamos el Teorema Espectral, podremos expresar \hat{H} como

$$\hat{H} = \int_{\sigma(H)} \lambda d(E(\lambda)) = \sum_{n=1}^{\infty} -\frac{1}{16\pi^2\varepsilon^2} \frac{\mu e^4}{2n^2\hbar^2} E(E_n). \quad (5.6)$$

donde, dado $\psi \in \mathcal{H}$, $(E(\lambda_n)\psi, \psi)_{\mathcal{H}}$ es la amplitud de probabilidad de que si el electrón se encuentra en un estado el estado ψ , al medir su energía obtengamos el valor E_n .

Bibliografía

- [1] G. Arfken, *Mathematical Methods for Physicists*, Academic-Press, (1985).
- [2] J. Bernstein, “*The Stern Gerlach Experiment*”, Stevens Institute of Technology, (2010).
- [3] J. Cerdà, *Linear Functional Analysis*, Graduate studies in Mathematics, vol 116, RSME, (2010).
- [4] J. B. Conway, *A course in Functional Analysis*, Graduate texts in Mathematics, vol 96, Springer-Verlag, (1985) (p. 100-106).
- [5] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford University Press, (1958).
- [6] K. Engel; R. Nagel, *One-Parameter Semigroups for Linear Evolution Equations*, Graduate Texts in Mathematics, vol 194, Springer, (1991).
- [7] P. R. Halmos, *Introduction to Hilbert space and the theory of Spectral Multiplicity*, Chelsea Publishing Company, (1951) (p. 56-66).
- [8] P. R. Halmos, *Measure Theory*, Graduate Texts in Mathematics, vol 18, Springer-Verlag, (1974).
- [9] E. Hille; R. Phillips, *Functional Analysis and Semi-Groups*, American Mathematical Society, (1957).
- [10] J. L. Kelley, *General topology*, Graduate Texts in mathematics, vol 27, Springer-Verlag, (1975) (p. 135-146).
- [11] J. R. Kirkwood, *Mathematical Physics with Partial Differential Equations*, Academic-Press, (2012).
- [12] Y-K. Lim, *Problemas and Solutions on Atomic, Nuclear and Particle Physics*, World Scientific, (2000).
- [13] G. D. Mahan, *Many Particle Physics*, Plenum Press, (1990).
- [14] V. Moretti, *Spectral Theory and Quantum Mechanics with an Introduction to the Algebraic Formulation*, Springer, (2013).
- [15] J. von Neumann, *Mathematical Foundations of Quantum Mechanics*, Princeton University Press, (1955).
- [16] W. Pauli, *Niels Bohr and the Development of Physics*, Pergamon Press, (1955).
- [17] W. Rudin, . *Functional Analysis*, McGraw-Hill, (1991).

Agradecimientos

A mis padres, los grandes responsables de todo lo que haya conseguido, y a mi hermana, mis abuelos, mis tíos y, en general, mi familia. A mis amigos, por la paciencia que hayan tenido conmigo y por mantenerme en la realidad más allá de los libros; y a mis compañeros de clase, sin vosotros esta experiencia seguramente no hubiese merecido la pena.

A Tomás Domínguez Benavides, profesor del Departamento de Análisis Matemático de la Facultad de Matemáticas y director de este trabajo, por su esfuerzo y su paciencia a lo largo de este año. A Manuel Jesús Gago Vargas y a Juan Núñez Valdés, profesores de los Departamentos de Álgebra y de Geometría y Topología de la Facultad de Matemáticas, por su ayuda durante mis primeros años de carrera y por mostrarme el camino de la investigación en Matemáticas; y a Rafael Rodríguez Boix, profesor del Departamento de Electrónica y Electromagnetismo de la Facultad de Física, no sólo por sus enseñanzas en su disciplina sino por transmitirme el significado de ser físico.

Y a Silvia, por la felicidad que me ha regalado estos últimos años de carrera, y porque juntos hemos sacado la mejor versión de nosotros mismos.