

La Ciencia en el siglo XX
Seminario “ Orotava” de Historia de la Ciencia, págs. 115-146.
Consejería de Educación del Gobierno de Canarias. Enero 1999.

LOS MODELOS MATEMATICOS DE LA MECANICA CUÁNTICA

Fernando Bombal
Departamento de Análisis Matemático
Universidad Complutense de Madrid

1.- Introducción.

Las Teorías Físicas tienen su origen en la observación experimental y persiguen establecer un marco que permita dar una explicación razonable y lo más exacta posible de los hechos observados. Habitualmente, a partir de Galileo y Newton, una teoría física se plasma en un *modelo matemático*, es decir, en palabras de Pierre Duhem, “un sistema de proposiciones matemáticas cuyo objetivo es representar tan simple, completa y exactamente como sea posible un conjunto de leyes experimentales.”

Sin embargo, para muchos filósofos de la ciencia, el valor de una teoría científica no se mide tanto por la fidelidad con que representa una clase dada de leyes empíricas, sino por su *poder predictivo* de descubrir hechos aún desconocidos (que, a su vez, deben ser refrendados por la observación.)

A finales del siglo XIX, la Mecánica clásica, creada por Newton en el siglo XVII, complementada por la Electrodinámica clásica, finalizada por Maxwell en la segunda mitad del siglo XIX, proporcionaba un marco totalmente satisfactorio para la comprensión del mundo macrocósmico.

A comienzos del siglo XX, con el aumento de precisión en los instrumentos de medida y la posibilidad de realizar experimentos más y más complejos, los físicos empezaron a examinar los fenómenos que tenían lugar en condiciones poco usuales: a velocidades muy altas o a escala microscópica. Y entonces comenzaron a surgir discrepancias con las

predicciones proporcionadas por la Física clásica, que motivaron una profunda revisión de sus fundamentos, dando origen a las dos grandes teorías físicas de este siglo: la Teoría de la Relatividad y la Mecánica Cuántica. Pero así como la primera es, fundamentalmente, el descubrimiento de un sólo hombre, Albert Einstein, quien formuló no sólo los principios fundamentales de la misma, sino el modelo matemático básico para su desarrollo, el desarrollo de la Mecánica Cuántica se debe el esfuerzo y colaboración de una serie de investigadores, cada uno de los cuales ha contribuido en una parte esencial y ha utilizado para ello el trabajo de los demás. Las razones son varias, y a exponer alguna de ellas estará dedicada el resto de esta sección.

Como hemos dicho, la Mecánica cuántica trata de describir con precisión los acontecimientos en la escala atómica y su desarrollo ha dependido en gran medida de la exactitud de los resultados numéricos obtenidos en las observaciones de los fenómenos del microcosmos. Las discrepancias con la Física clásica que se fueron poniendo de manifiesto eran esencialmente de dos tipos. Por un lado, se descubrió que ciertas variables Físicas sólo tomaban valores *discretos* o *cuantizados*, en contraste con la variación continua de valores que se desprendía de la interpretación clásica. Así, por ejemplo, Max Planck, para explicar el espectro observado de intensidades de la radiación electromagnética procedente del interior de una cavidad a temperatura constante (*radiación del cuerpo negro*) se vio precisado en 1900 a admitir que cada oscilador atómico de las paredes de la cavidad radiaba energía solamente en cantidades discretas, iguales a $h\nu$, $2h\nu$, $3h\nu$, ..., donde h es una constante universal (*constante de Planck*) y ν es la frecuencia intrínseca del oscilador radiante. Del mismo modo, Niels Bohr, en 1913, tuvo que postular que el momento cinético de los electrones orbitales del átomo de hidrógeno excitado sólo podía tomar los valores discretos $h/2\pi$, $2h/2\pi$, Otros ejemplos de estos *efectos cuánticos* se fueron descubriendo a lo largo del primer cuarto de este siglo. Su justificación mediante la cuantización de la variable física pertinente, suponía una hipótesis sin precedentes en el marco de la Física clásica.

La cuantización de las variables físicas conlleva aceptar que, a nivel microcósmico, los fenómenos tienen lugar de manera esencialmente discontinua e imprevisible. Las implicaciones de esta hecho iban a hacer tambalear las ideas previas sobre la realidad física. Así H. Poincaré, a su regreso del Congreso Solvay de 1911 en Bruselas, escribió: "... Parece innecesario señalar cómo estas ideas (se refiere a la hipótesis de Planck) difieren de las concepciones tradicionales; los fenómenos físicos dejarían de obedecer a leyes expresables por ecuaciones diferenciales y esto, indudablemente, sería la mayor y más radical revolución en la filosofía natural desde los tiempos de Newton." De modo análogo, en sus *Dernières Pensées*, seis meses antes de su muerte, Poincaré declaraba: "Nos preguntamos ahora no sólo si las ecuaciones diferenciales de la dinámica deben modificarse, sino incluso si las leyes del movimiento pueden aún expresarse por medio de ecuaciones diferenciales... Se está cuestionando si no sería necesario introducir discontinuidades en las leyes naturales, no sólo aparentes, sino esenciales." Parece claro que la pregunta de Poincaré sobre si las

ecuaciones diferenciales son o no el instrumento adecuado para la formulación matemática de las leyes físicas no es más que el modo en que un matemático expresa sus dudas sobre la validez del principio de causalidad.

El otro tipo de dificultades que apareció al estudiar el mundo microscópico se refería a la distinción entre *ondas* y *partículas*. Así, al principio se pensó que la luz se comportaba como una lluvia de corpúsculos, como gotas de agua. Al continuar las observaciones, quedó claro que la luz se comportaba en realidad como una onda, similar a las ondas del agua, por ejemplo. Sin embargo, en 1905 Albert Einstein presentó su teoría del *efecto fotoeléctrico*, que propugnaba que un rayo de luz de frecuencia ν se comporta como si fuese una colección de partículas (*fotones*), cada una de las cuales tuviese una energía $e = h\nu$. La hipótesis de Einstein fue confirmada enseguida por estudios experimentales precisos, y respaldada espectacularmente en 1923 al demostrar A. H. Compton que los fotones podían hacer saltar electrones, de acuerdo con las reglas usuales de la Mecánica clásica. Por otro lado, cuando se descubrieron los electrones, se comportaban simplemente como partículas, minúsculas balas tremendamente veloces. Sin embargo, en 1927 C. Davisson y L. Germer mostraron que los electrones se difractaban a través de una red cristalina, comportándose como una onda, con longitud de onda $\lambda = h/p$, siendo p la cantidad de movimiento del electrón. De esta manera se confirmaron experimentalmente las ideas de L. de Broglie y E. Schrödinger de asignar *paquetes de ondas* a partículas materiales. Así pues, una vez más la física se enfrentaba al dilema de elegir entre dos concepciones contradictorias, cada una de las cuales parecía ser igualmente demostrable. Un tipo de experimentos requerían la interpretación ondulatoria, y otros la interpretación corpuscular.

Para intentar resolver esta serie de hechos confusos y a veces contradictorios, entre 1925 y 1930 se establecieron los cimientos teóricos de lo que hoy conocemos como Mecánica cuántica. Hay que decir que, a diferencia de otras grandes teorías físicas, los modelos matemáticos propuestos y su posterior interpretación, fueron muy diversos. En muchos casos, como veremos, las matemáticas empleadas eran claramente insatisfactorias y en absoluto rigurosas, lo que motivó en parte el desarrollo de algunas de las ramas más activas e interesantes de las Matemáticas de este siglo.

Como consecuencia de todo ello, la imagen de la realidad microfísica cambió radicalmente. El comportamiento de las cosas a escala microcósmica es, simplemente, distinto al que estamos habituado. Un átomo no se comporta como un muelle oscilando, ni como un sistema solar en miniatura, ni como algún tipo de nube rodeando el núcleo. Sin embargo, al menos podemos decir que, en este aspecto, *todas* las partículas subatómicas se comportan igual. Citando a Feynman, “todas están chifladas, pero exactamente de la misma manera” ([Fe1]).

2.- Las leyes de la causalidad y el principio de complementariedad. El principio de incertidumbre.

En la Mecánica clásica, el estado instantáneo de un sistema mecánico queda determinado por los valores de ciertas *variables observables* (por ejemplo, la posición y la cantidad de movimiento en el caso de una partícula moviéndose a lo largo de una recta). La *medida* de un observable \mathcal{A} es una operación física bien definida, el *valor de \mathcal{A}* , que proporciona un número real. La evolución temporal del sistema está regida por la *función de Hamilton* del mismo, que es una función conocida de los observables y por tanto se puede, al menos teóricamente, predecir con exactitud esa evolución temporal. La definición clásica del estado de un sistema mecánico, presupone tácitamente que:

- 1.- Las variables observables tienen valores precisos, bien definidos en cada instante.
- 2.- Siempre es posible, al menos en principio, medir dichos valores sin perturbar apreciablemente el sistema.

Obviamente, las limitaciones de los instrumentos de medición y de los propios experimentadores hacen que (1) no se cumpla en la práctica, pero se admite que los valores de las variables observables se pueden conocer con tanta precisión como se quiera. Por otro lado, en cuanto a (2), la interpretación clásica admite que la interacción entre el fenómeno observado y los aparatos de medida se puede distinguir claramente mediante un análisis conceptual adecuado, de modo que se pueda *deducir* la perturbación realizada al medir, lo que proporciona una (teóricamente) *completa y exacta descripción* del fenómeno observado.

Como consecuencia de este análisis, el *principio de causalidad* debe entenderse en el sentido de que *se puede predecir el estado futuro de un sistema físico con una probabilidad p tan próxima a 1 como se quiera, mediante un análisis suficientemente elaborado del fenómeno observado*.

Pues bien, la Mecánica cuántica, en su formulación más ampliamente aceptada, *niega* la validez general de las hipótesis (1) y (2) y, en consecuencia, el principio de causalidad.

En el Congreso Internacional de Física celebrado en Como (Italia), en 1927, Niels Bohr dio una conferencia titulada “El Postulado Cuántico y del desarrollo reciente de la Teoría Atómica.” Su punto de partida era que “la esencia de la teoría cuántica puede expresarse por el llamado postulado cuántico, que atribuye a cualquier proceso atómico una discontinuidad esencial... Según este postulado, los intercambios de energía tienen lugar sólo en pasos discretos de tamaño finito...” (indivisibilidad del cuanto de acción). Como consecuencia, se produce una interacción incontrolable entre el objeto y los instrumentos de medida que obligan a abandonar la descripción causal de la física clásica. En palabras del propio Bohr: “Por un lado, la definición del estado de un sistema físico, tal que como se entiende ordinariamente, presupone la eliminación de todas las perturbaciones externas. Pero en tal caso, según el postulado cuántico, ninguna observación sería posible y los conceptos de espacio y tiempo pierden su sentido inmediato. Por otro lado, si para hacer posibles las observaciones permitimos ciertas interacciones con mecanismos de medida adecuados, no pertenecientes al sistema, ya no es posible una definición sin ambigüedad

del estado del sistema y no puede hablarse de causalidad en el sentido ordinario de la palabra.”

Esta cita de Bohr contiene la esencia del llamado *principio de complementariedad*: la imposibilidad de llevar a cabo una descripción causal de los fenómenos atómicos que sea, al mismo tiempo, una descripción espacio temporal. Las descripciones usuales espacio-temporales y causales de la física clásica son posibles debido al valor extremadamente pequeño del cuanto de acción, comparado con las acciones que se dan en la macrofísica.

Algunos años antes de la conferencia de Bohr, en un artículo aparecido en *Nature* en 1923, C. G. Darwin había propuesto una solución para reconciliar los fenómenos de dispersión óptica con la teoría de los cuantos, basada en la extensión del aparato conceptual de la física teórica: “Debe aceptarse como absolutamente cierto que tanto la teoría electromagnética como la teoría cuántica son válidas en sus respectivos campos, e igualmente cierto que las dos descripciones son incompatibles. Sólo cabe concluir que ambos son partes de un sistema más general, que debería proporcionar fórmulas matemáticas idénticas a las de la teoría actual.” No está claro si Darwin propugnaba una síntesis de las dos concepciones antagónicas, onda y partícula, a un nivel superior, o si se refería simplemente al establecimiento de un formalismo matemático abstracto que englobara a la mecánica cuántica y la teoría ondulatoria. En todo caso, la propuesta de Darwin hubo de esperar hasta que investigaciones posteriores, tanto teóricas como experimentales, abrieran el camino al concepto de una entidad que se manifiesta como onda o como partícula, *dependiendo de las condiciones experimentales bajo las que se observa*. El desarrollo de esta concepción de la realidad física es el contenido esencial del *Principio de Complementariedad* de Niels Bohr. Como ya dijimos, el principio afirma que no pueden utilizarse simultáneamente descripciones en términos de coordenadas espacio-temporales y descripciones en términos de transferencia de energía o momento, ya que ambas requieren disposiciones experimentales mutuamente excluyentes. Ambas descripciones (llamadas por Bohr *complementarias*), aunque mutuamente excluyentes, son sin embargo necesarias para una descripción completa de la situación física. La posibilidad de emplear nociones mutuamente contradictorias para describir una misma situación física, proviene según Bohr de la imposibilidad de separar en el mundo atómico (debida a las interacciones regidas por el postulado cuántico, que no pueden aquí despreciarse, como ocurre en la física clásica) el sistema de los efectos de los instrumentos de medida, cuyo comportamiento debe expresarse en términos clásicos. Al expresar los resultados de tales mediciones en diferentes experimentos, se puede describir un sistema atómico en términos clásicos *complementarios*.

Un poco antes, en febrero de 1927, se había producido un hito fundamental en el desarrollo de la Mecánica cuántica: la formulación por Heisenberg del llamado *Principio de Incertidumbre*. Los dos años anteriores habían sido cruciales para la formalización del aparato matemático de la Mecánica cuántica: En 1925, Heisenberg había desarrollado su “Mecánica de Matrices” y en 1926 Schrödinger había establecido el formalismo de la “Mecánica Ondulatoria” (Cfr. Sección siguiente). El problema pendiente era la clari-

ficación de una *interpretación* adecuada de ambos formalismos en función de los datos experimentales. La interpretación de Schrödinger de los fenómenos atómicos a través de “paquetes de onda”, permitía concebir los fenómenos observados (cuantización, existencia de niveles discretos de energía) en términos de *frecuencias* y *fenómenos de interferencia*, sin postular los “saltos cuánticos”, volviendo así a las concepciones más clásicas de una realidad continua.

Por el contrario, la *interpretación* del formalismo dada por Heisenberg y Bohr, exigía un cambio radical en las concepciones habitualmente aceptadas de la realidad física. El formalismo de la “Mecánica de matrices” de Heisenberg no admitía, según él, las descripciones usuales espacio-temporales y las conexiones causales de los fenómenos físicos. Y, sin embargo -señalaba Heisenberg- las descripciones y nociones intuitivas de la Física clásica se habían aplicado indiscriminadamente a la Mecánica cuántica. Esta disparidad entre el formalismo y las concepciones intuitivas tenían forzosamente que originar serias dificultades. Como quiera que todas nuestras conceptualizaciones están inseparablemente ligadas a las descripciones espacio-temporales, Heisenberg no vio otra alternativa para salvar estas dificultades que mantener las nociones clásicas intuitivas, pero restringiendo su aplicabilidad. Tras una profunda reflexión sobre estos problemas, presentó a finales de marzo de 1927 al editor del *Zeitschrift für Physik* su trabajo sobre los contenidos intuitivos de la cinemática y mecánica cuántica, en el que presentaba su famoso *Principio de Incertidumbre*. Según Heisenberg, “todos los conceptos que se usan en la teoría clásica para describir un sistema mecánico, pueden también definirse exactamente en los procesos atómicos”. Pero definir un concepto significa prescribir un proceso de medida de la cantidad referida por el concepto y “todos los experimentos que conducen a tales definiciones, necesariamente conllevan una *incertidumbre* cuando tratan de determinar *simultáneamente* dos variables canónicamente conjugadas.” Como ejemplo de tales pares conjugados, Heisenberg considera la posición q y el momento p de una partícula, estableciendo la famosa fórmula

$$\delta q \delta p = h/2\pi$$

según la cual el producto de las imprecisiones en la medición simultánea de q y p es una constante, de modo que “cuando más precisa sea la determinación de la posición, menor será la precisión con que se conozca el momento, y recíprocamente.” Análoga relación se tiene para el tiempo t y la energía E . Es precisamente esta incertidumbre, según señala Heisenberg, la que hace posible el uso de las nociones clásicas (que corresponderían a $h = 0$) en el mundo microscópico.

Por otro lado, estos resultados conducen a Heisenberg a rechazar la forma fuerte del principio de causalidad, resumida en la afirmación de que el conocimiento exacto del presente, permite predecir el futuro. Según señala Heisenberg, “no es la conclusión, sino la hipótesis la que es falsa.” Y concluye: “... podríamos preguntarnos si tras el universo estadístico de las percepciones no se oculta un mundo ‘real’ regido por la ley de la causalidad. Tales especulaciones nos parecen inútiles y carentes de sentido, pues la física tiene que limitarse a la descripción de las relaciones entre percepciones.”

Notemos que tanto Heisenberg como Bohr coincidían en que cualquier interpretación del formalismo de la Mecánica cuántica, debería hacer uso de la terminología de la física clásica. Pero mientras que Heisenberg admitía que tanto el lenguaje corpuscular como el ondulatorio (y cualquiera de ellos, independientemente del otro), podían emplearse para proporcionar una descripción óptima del fenómeno (dentro de las limitaciones, formuladas matemáticamente por el principio de incertidumbre), Bohr insistía en la necesidad de usar *ambos* lenguajes para obtener una descripción completa.

Los Principios de incertidumbre y de complementariedad tienen profundas consecuencias sobre los aspectos ontológicos de la realidad física. Por ejemplo, la alteración producida en un electrón al iluminarlo por un microscopio de rayos X para determinar su posición, no tendría mayores consecuencias si se pudiera *inferir* la posición y el momento del electrón a partir de los datos observables, por una teoría que tuviera en cuenta todos los factores relevantes, como la presión de la luz, etc. El significado del principio de indeterminación es, precisamente, *la afirmación de que una tal teoría correctiva de los efectos de la medición en microfísica es imposible*. El fenómeno físico, junto con el observador y los mecanismos de observación, forman un sistema único e indivisible, que no es susceptible de un análisis ulterior a nivel cuántico. El estado de un sistema S depende no sólo de S , sino de la disposición experimental concreta en que nos encontremos.

Algunas interpretaciones son aún más extremas. Así, Pascual Jordan declaró que las observaciones no sólo alteraban lo que iba a ser medido, sino que lo *originaban*. En la medición de la posición de un electrón, realizada por ejemplo con el microscopio de rayos X , “el electrón es forzado a *asumir una posición definida*; previamente no estaba, en general, allí o aquí ... Si mediante otro experimento se mide la velocidad del electrón, se le *obliga a decidirse* por un valor exacto, que es el que observamos. En tal decisión, la tomada anteriormente acerca de la posición, es completamente eliminada.” Y afirma “Nosotros mismos producimos los resultados de las mediciones.” (*Die Quantenmechanik und die Grundprobleme der Biologie und Psychologie*, Die Naturwissenschaften **20** (1932), 815-821).

3.- El formalismo matemático de la Mecánica Cuántica.

A pesar de su nombre altisonante y sus grandes éxitos, la teoría cuántica antes de 1925 era, desde el punto de vista metodológico, un confuso batiburrillo de hipótesis, principios, teoremas y recetas de cálculo. Cada problema debía primero resolverse en términos de la física clásica para después traducir la solución clásica al lenguaje cuántico por medio de las misteriosas reglas de las condiciones de cuantización o cualquier otra “receta”, entre las que destaca el llamado *principio de correspondencia* de Bohr. La idea general del mismo es que la Mecánica Cuántica debe contener a la Clásica como caso límite (en analogía a lo que sucede en la Teoría de la Relatividad.) Esta idea ya la había expuesto Planck en 1906, al afirmar que las conclusiones de la Mecánica Cuántica convergen a los resultados previstos por la teoría clásica, al hacer h tender a 0. La observación de Bohr es que *lo*

mismo sucede si h se mantiene constante, pero la frecuencia ν tiende a 0. Demandando que esta correspondencia entre el formalismo clásico y el cuántico se cumpla aproximadamente en todos los casos, se obtiene una regla que indica el camino a tomar para, partiendo de la formulación clásica, llegar a los resultados de la Mecánica Cuántica. En todo caso, encontrar la “traducción correcta” era un asunto de habilidad e intuición, en lugar de un razonamiento deductivo y sistemático. Es decir, la teoría adolecía de la falta de un modelo matemático adecuado.

En esta línea, analizando los fenómenos de interacción entre electrones, Born planteó en su trabajo *On quantum mechanics*, en Junio de 1924, la necesidad de desarrollar un programa que permitiera la transición del tratamiento dado por la mecánica clásica a lo que él llamó “Mecánica Cuántica”, y sugirió que esta transición podía obtenerse, aplicando el principio de correspondencia de Bohr, reemplazando una cierta diferencial por una diferencia.

En la física clásica, cualquier cantidad dependiente del tiempo $f_n = f_n(t)$ se (admite que se) puede representar por un desarrollo de Fourier

$$f_n(t) = \sum_k f(n, k) = \sum_k x(n, k) \exp\{2\pi i \nu(n, k)t\} \quad (\#)$$

donde el k -ésimo componente $f(n, k)$ tiene la amplitud $x(n, k)$ y la frecuencia $\nu(n, k) = k\nu(n, 1) = k\nu$, siendo ν la frecuencia fundamental (igual a la derivada del hamiltoniano H del sistema con respecto a la variable de acción $J = nh$). Según el principio de correspondencia de Bohr, la frecuencia cuántica $\nu_{n, n-k}$ correspondiente a la transición de un estado estacionario caracterizado por el número cuántico n al estado estacionario caracterizado por el número cuántico $n' = n - k$ coincide, para n grande y k pequeño, con la frecuencia clásica $\nu(n, k)$. Pero según el postulado cuántico, esta frecuencia cuántica debe ser igual a la diferencia de energías en ambos estados:

$$\nu_{n, n-k} = \frac{H(nh) - H[(n-k)h]}{h} \simeq k \frac{dH}{dJ} = \frac{k}{h} \frac{\partial H}{\partial n} = k\nu.$$

Generalizando esta relación, Born postuló que para cualquier función arbitraria $\Phi(n)$, definida para estados estacionarios, la diferencial $k[\partial\Phi(n)/\partial n]$ debería sustituirse por la diferencia $\Phi(n) - \Phi(n-k)$ o, en símbolos

$$k \frac{\partial\Phi(n)}{\partial n} \leftrightarrow \Phi(n) - \Phi(n-k)$$

Esta receta para transformar fórmulas clásicas en sus análogos cuánticos, jugaría un papel fundamental en el descubrimiento de la Mecánica de matrices.

La Mecánica de Matrices.

Influenciado por sus maestros Sommerfeld (de mentalidad teórico-analítica) y Bohr (más sintético y menos formalista), Werner Heisenberg consideró la posibilidad de desarrollar el esquema matemático de una nueva teoría de la mecánica, que eliminara la apelación sistemática a la intuición y al uso de técnicas coyunturales para cada tipo de problema. El invierno de 1923/24 lo pasó Heisenberg en Göttingen, conociendo de primera mano el trabajo de Born, que le influyó decisivamente. En Mayo de 1925, mientras se reponía de un fuerte ataque de fiebre del heno en la isla de Heligoland, escribió su famoso trabajo “Sobre una interpretación teórico-cuántica de las relaciones cinemáticas y mecánicas” (*Über quantentheoretische Umdeutung kinematischer und mechanischer Beziehungen*, Zeitschrift für Physik 33 (1925), 879-893; Cfr. [VW]). A su regreso a Göttingen, tras consultar con Pauli, a mediados de julio presentó su trabajo a Born, quien inmediatamente reconoció su importancia y lo envió al editor del Zeitschrift für Physik.

Partiendo de la idea de Born, de asociar en la ecuación (#) a la frecuencia clásica $\nu(n, k)$ la frecuencia cuántica $\nu_{n, n-k}$, Heisenberg postuló que también a la amplitud clásica $x(n, k)$ correspondí a una cantidad teórico-cuántica $x_{n, n-k}$, y propuso que el conjunto $\{x_{n, n-k} \exp(2\pi i \nu_{n, n-k} t)\}$ se tomara como el equivalente teórico cuántico de la cantidad clásica $f_n(t)$. Así, las variables cuánticas quedan representados por los conjuntos discretos de números complejos ($x_{n, n-k}$) y ($\nu_{n, n-k}$), correspondientes a los posibles estados cuánticos. Del comportamiento de los coeficientes de Fourier en (#), junto con la regla de combinación de frecuencias, deduce una serie de propiedades de las cantidades cuánticas introducidas (p.ej., $x_{n, n-k} = x_{n-k, n}^*$, $\nu_{n-k, n} = -\nu_{n, n-k}$, etc.) y las reglas algebraicas de manipulación. Por ejemplo, obtiene inmediatamente que si $f_n^2 \leftrightarrow \{x_{n, n-k}^{(2)} \exp(2\pi i \nu_{n, n-k} t)\}$, entonces

$$x_{n, n-k}^{(2)} = \sum_j x_{n, n-j} x_{n-j, n-k}$$

Generaliza inmediatamente la fórmula anterior para el caso de f_n^3 y para el producto de dos cantidades $f_n g_n$, siendo $g_n \leftrightarrow \{y_{n, n-k} \exp(2\pi i \nu_{n, n-k} t)\}$, obteniendo la regla de multiplicación

$$z_{n, n-k} = \sum_j x_{n, n-j} y_{n-j, n-k}$$

En particular, el nuevo producto es *no conmutativo* en general. Una vez desarrollado este formalismo, lo aplica a la discusión de algunos problemas “mecánicos”, transformando las ecuaciones clásicas de movimiento en condiciones que deben satisfacer las nuevas “amplitudes de transición” $x_{n, n-k}$.

El trabajo de Heisenberg tuvo, al comienzo, una fría acogida. La mayor parte de los físicos no se encontraban a gusto no sólo con las nuevas matemáticas que aparecí an, sino con las implicaciones físicas, e incluso filosóficas de las ideas allí contenidas. Sin embargo, hubo excepciones. Así Bohr, en el VI Congreso Escandinavo de Matemáticas, celebrado

en Copenhague en Agosto de 1925, calificó el trabajo de Heisenberg como sobresaliente, y expresó su convencimiento de que “una nueva era de mutua estimulación entre la mecánica y las matemáticas ha comenzado.”

El mismo Born, según reconoció en su discurso de aceptación del Premio Nobel en 1954, quedó sorprendido e impresionado por la representación de Heisenberg de cantidades físicas por “conjuntos” de números complejos dependientes del tiempo, con la peculiar regla de multiplicación. Tras una semana de intensa concentración, Born reconoció que la multiplicación definida por Heisenberg, ¡no era otra cosa que la regla para obtener el producto de dos matrices!. En la época a que nos referimos, los físicos apenas manejaban las matrices (ni siquiera las finitas), por lo que no es extraño que nadie hubiera caído en esa interpretación. El siguiente comentario de Heisenberg, contenido en una carta a Jordan, ilustra bien esta situación. Dice Heisenberg: “Ahora los ilustrados matemáticos de Göttingen hablan mucho de matrices Hermitianas, pero yo ni siquiera sé lo que es una matriz.” También es interesante el testimonio, recogido por E.U. Condon, que visitó Munich y Göttingen en 1926: “Hilbert se rio mucho de Born y Heisenberg porque, cuando descubrieron la mecánica de matrices, se encontraron con el mismo tipo de dificultades que, por supuesto, todo el mundo encuentra al manipular y tratar de resolver problemas con matrices [infinitas]. Cuando fueron a pedir ayuda a Hilbert, éste les dijo que las únicas veces que había tenido que ver con matrices fue cuando estas aparecían como subproducto del estudio de autovalores de una ecuación diferencial con condiciones de contorno. Les sugirió que si encontraban la ecuación diferencial que originaba esas matrices, probablemente obtendrían más información. Heisenberg y Born pensaron que era un comentario para salir del paso, y que Hilbert no sabía realmente de lo que estaba hablando. Así que más tarde Hilbert se divirtió mucho, indicándoles que podían haber descubierto la mecánica ondulatoria de Schrödinger seis meses antes que éste, si le hubieran hecho caso.”

Siguiendo con la historia, cuando Born descubrió que las “amplitudes de transición” de Heisenberg se comportaban como matrices infinitas, trató de buscar alguien cualificado para que le ayudara, sin demasiado éxito. Pero un día, viajando en tren a Hanover, comentó con un colega las grandes dificultades que encontraba con el cálculo de matrices. Por una afortunada coincidencia, se encontraba en el mismo compartimento Pascual Jordan, colaborador de Courant en su monumental obra *Métodos de la Física Matemática* y experto en teoría de matrices. En la estación de Hanover, Jordan se presentó a Born y le ofreció su colaboración. Este fue el comienzo de una fructífera colaboración que condujo a la publicación del trabajo fundamental “Sobre la Mecánica cuántica” (*Zur Quantenmechanik*, *Zeits. für Physik* 34 (1925), 858-888; Cfr. [VW]), la primera formulación rigurosa de la mecánica matricial.

El trabajo de Born y Jordan está dividido en 4 capítulos. El primero contiene los teoremas necesarios de la teoría de matrices, mientras que el segundo contiene los fundamentos de la dinámica cuántica para sistemas con un grado de libertad. En él aparece por primera vez lo que posteriormente se conocerá por la *relación de conmutación* en mecánica

cuántica. Veamos el argumento: En primer lugar, representan la coordenada clásica q (que antes hemos designado por x) por una matriz $\mathbf{q} = \{q_{mn} \exp(2\pi i \nu_{mn} t)\}$ y el momento p también por una matriz $\mathbf{p} = \{p_{mn} \exp(2\pi i \nu_{mn} t)\}$, sujetas a las reglas de las cantidades cuánticas de Heisenberg ($\nu_{mn} = -\nu_{nm}$, $q_{n+k,n}^* = q_{n,n+k}$, etc.). En particular, resulta que tanto \mathbf{p} como \mathbf{q} son *matrices hermitianas*. Partiendo entonces de la condición cuántica

$$nh = J = \oint pdq = \int_0^{1/\nu} pq' dt$$

y desarrollando p y q en serie de Fourier,

$$p = \sum_k p(n, k) \exp(2\pi i \nu(n, k)t); q = \sum_k q(n, k) \exp(2\pi i \nu(n, k)t),$$

se obtiene, por simple integración (formal):

$$nh = -2\pi i \sum_k kp(n, k)q^*(n, k)$$

(donde se ha usado que $q(n, -k) = q^*(n, k)$). Derivando (formalmente) respecto de n , se obtiene

$$\frac{h}{2\pi i} = - \sum_k k \frac{\partial}{\partial n} [p(n, k)q^*(n, k)].$$

Si ahora utilizamos la “regla de correspondencia de Born”

$$k \frac{\partial \Phi(n)}{\partial n} \leftrightarrow \Phi(n) - \Phi(n - k)$$

obtenemos (aplicando que, para las cantidades cuánticas, la regla es $q_{n+k,n}^* = q_{n,n+k}$):

$$\frac{h}{2\pi i} = \sum_k \{p_{n,n-k}q_{n-k,n} - q_{n,n+k}p_{n+k,n}\}.$$

De esta manera, se prueba que la igualdad matricial

$$\mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \frac{h}{2\pi i} \mathbf{I} \tag{*}$$

se cumple para los elementos de la diagonal principal. Born conjeturó que también se cumplía la igualdad para los elementos no diagonales, lo que fue demostrado por Jordan, probando a partir de las ecuaciones canónicas del movimiento, que la matriz $\mathbf{d} = \mathbf{pq} - \mathbf{qp} = \{d_{mn} \exp(2\pi i \nu_{mn} t)\}$ cumplía $\mathbf{d}' = \mathbf{0} = \{2\pi i \nu_{mn} d_{mn} \exp(2\pi i \nu_{mn} t)\}$, y que ello implicaba, puesto que $\nu_{mn} \neq 0$ para $m \neq n$, que \mathbf{d} era una matriz diagonal. Como hemos visto, que los elementos de la diagonal son iguales a $h/2\pi i$ lo obtuvo Born como

consecuencia del principio de correspondencia. (*) es la única ecuación fundamental en que aparece h , y según hemos visto ello es consecuencia del principio de correspondencia. Es pues la forma en que el postulado cuántico se introduce en el formalismo. En el trabajo, Born y Jordan llaman a esta ecuación la “condición cuántica exacta” y ya reconocieron su status axiomático dentro de la teoría.

Al regreso de sus vacaciones de verano, Born continuó su trabajo con Jordan y, por correspondencia, también con Heisenberg, y a mediados de Noviembre el famoso trabajo de Born-Heisenberg-Jordan “Sobre Mecánica cuántica II” (*Zur Quantenmechanik II*, Zeits. für Physik 35 (1926), 557-616; Cfr. [VW]) estaba terminado. Además de extender las aplicaciones físicas a sistemas con un número finito de grados de libertad, tratamiento de momentos angulares, intensidades, etc., sobre todo el trabajo establece un método general, lógicamente consistente, para resolver los problemas de la mecánica cuántica, reduciendo en muchos casos la dificultad a problemas matemáticos concretos de la teoría de matrices hermíticas infinitas.

Restringiéndonos, por simplicidad, a la discusión de un sistema dinámico con un sólo grado de libertad, Born, Heisenberg y Jordan (BHJ) *postulan* la validez de la “relación de conmutación”

$$\mathbf{p}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{p} = \frac{h}{2\pi i}\mathbf{I}$$

y a partir de aquí *deducen* todos los resultados. Primero “prueban” que si \mathbf{f} es una función que puede expresarse formalmente como serie de potencias de \mathbf{p} y \mathbf{q} , se cumplen las relaciones

$$\mathbf{f}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{f} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{p}} \quad ; \quad \mathbf{p}\mathbf{f} - \mathbf{f}\mathbf{p} = \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial \mathbf{f}}{\partial \mathbf{q}}, \quad (+)$$

ya que se cumplen para \mathbf{p} , \mathbf{q} , y las relaciones son estables por sumas y productos. Después introducen, como en el caso clásico, una función de energía o Hamiltoniano $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$, que se supone verifica las correspondientes ecuaciones del movimiento: $\mathbf{q}' = \partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{p}$ y $\mathbf{p}' = -\partial \mathbf{H} / \partial \mathbf{q}$. Aplicando las ecuaciones (+) para $\mathbf{f} = \mathbf{H}$ y las ecuaciones del movimiento, resulta que también se cumple $\mathbf{f}' = -(2\pi i/h)(\mathbf{f}\mathbf{H} - \mathbf{H}\mathbf{f})$ para toda \mathbf{f} . Haciendo $\mathbf{f} = \mathbf{H}$, obtenemos $\mathbf{H}' = \mathbf{0}$, es decir *la ley de la conservación de la energía*. Esto prueba también, como ya vimos, que \mathbf{H} es una *matriz diagonal*, donde los elementos diagonales (independientes del tiempo) W_n se interpretan como la energías del sistema en el n -ésimo estado estacionario. La condición de frecuencia de Bohr $\nu_{nm} = (W_n - W_m)/h$ resulta inmediatamente de la última ecuación, tomando $\mathbf{f} = \mathbf{q}$. Además, continúan (BHJ), si, recíprocamente, se parte de una \mathbf{H} tal que $\mathbf{H}' = 0$ y *podemos encontrar dos matrices escalares* \mathbf{p}^o y \mathbf{q}^o verificando la relación de conmutación, entonces $\mathbf{p} = \{p_{nm}^o \exp(2\pi i \nu_{nm} t)\}$ y $\mathbf{q} = \{q_{nm}^o \exp(2\pi i \nu_{nm} t)\}$, siendo $\nu_{nm} = (H_{nn} - H_{mm})/h$, satisfacen las ecuaciones canónicas del movimiento. En consecuencia, el proceso para resolver las ecuaciones canónicas del movimiento se reduce a *encontrar dos matrices hermitianas escalares* \mathbf{p}^o y \mathbf{q}^o , *que satisfagan la relación de conmutación, en términos de las cuales el Hamiltoniano del sistema sea una matriz diagonal.*

Para llevar a cabo este programa, (BHJ) introducen lo que llaman *transformaciones canónicas*: Dadas \mathbf{p} y \mathbf{q} satisfaciendo la relación de conmutación, una matriz \mathbf{U} es una transformación canónica si las matrices $\mathbf{P} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{p}\mathbf{U}$, $\mathbf{Q} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{q}\mathbf{U}$ también satisfacen esta relación. Es inmediato que las ecuaciones canónicas del movimiento son invariantes por transformaciones canónicas y que para cualquier función \mathbf{f} , en particular para $\mathbf{f} = \mathbf{H}$ se tiene $\mathbf{H}(\mathbf{P}, \mathbf{Q}) = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})\mathbf{U}$. Por tanto, *el problema se resuelve si se encuentra una transformación canónica que transforme \mathbf{H} en una matriz diagonal \mathbf{W}* . Para matrices finitas, es bien conocido (como señalan (BHJ)) que siempre se puede encontrar una transformación ortogonal que diagonaliza una matriz hermitiana. Más aún, los elementos de la diagonal (lo que hoy conocemos como los *autovalores* de la matriz) se pueden calcular en términos de la matriz original, sin calcular explícitamente la transformación ortogonal. De la misma forma, (BHJ) *afirman* que los elementos diagonales de la matriz \mathbf{W} (los valores de la energía en los distintos estados del sistema) se pueden calcular en términos de los elementos de la matriz (en general, no diagonal) $\mathbf{H}(\mathbf{p}, \mathbf{q})$.

Los resultados matemáticos más relevantes sobre este tipo de problemas, eran los trabajos que Hilbert había dedicado entre 1904 y 1910 al estudio de las ecuaciones integrales. Especialmente importante es el cuarto trabajo (1906), en el que Hilbert reduce el problema al estudio de las formas cuadráticas del tipo $\sum_{i,j=1}^{\infty} a_{ij}x_ix_j$, definidas en el espacio de las sucesiones numéricas (x_i) tales que $\sum |x_i|^2 < \infty$ (esto se debe a que la transformación de un problema en otro se obtiene tomando como x_i los coeficientes de Fourier de la función incógnita en la ecuación integral). Para formas acotadas (es decir, que su valor esté uniformemente acotado cuando las (x_i) verifican $\sum |x_i|^2 \leq 1$ o, lo que es lo mismo, en lenguaje actual, acotadas sobre la *bola unidad del espacio ℓ_2*), Hilbert había demostrado que existía una transformación ortogonal que reducía la forma a una suma de cuadrados *más ciertas integrales extendidas a subconjuntos de \mathbf{R}* ; esto es, además de un conjunto discreto, o *espectro puntual*, análogo al caso de dimensión finita, aparecía el fenómeno del *espectro continuo*. Hellinger, que desarrolló independientemente de Hilbert una teoría análoga, probó que la forma $\sum_{i,j=1}^{\infty} a_{ij}x_ix_j$ podía transformarse en la expresión

$$\sum W_n |y_n|^2 + \int W(s) |y(s)|^2 ds$$

donde (W_n) es el espectro puntual y $(W(s))$ el espectro continuo. Es este resultado el que admitieron (BHJ) que era válido para formas cuadráticas no necesariamente acotadas (como las que, desgraciadamente, aparecen habitualmente en Mecánica cuántica).

La Mecánica Ondulatoria

Al mismo tiempo que la mecánica de matrices, que trata de establecer un modelo matemático de la mecánica cuántica a partir de la mecánica clásica de partículas, surge otro formalismo matemático, cuyo punto de partida es considerar el átomo como un *sistema de vibraciones*, en lugar de un sistema mecánico.

Como eminente precursor de esta postura, podemos citar a Sir William Rowan Hamilton, quien ya en 1833 propuso la determinación de una única “ley de la naturaleza” (o modelo matemático) que gobernara tanto la propagación de la luz como el movimiento de las partículas. El descubrimiento posterior de los rayos X , los fenómenos de difracción de electrones, el efecto fotoeléctrico, etc. contribuyeron a realzar cada vez más el problema de la dualidad onda-partícula en los fenómenos subatómicos.

El iniciador de la teoría de la mecánica ondulatoria, fue Louis de Broglie, quien siempre había estado preocupado por estos fenómenos. Desde sus primeros trabajos sobre la teoría de los cuantos de luz, había sugerido la idea de asociar a los cuantos (partículas) un cierto elemento de periodicidad. Es en su trabajo *Ondes et quanta*, publicado en las Comptes Rendus en 1923, donde presenta su idea de onda de fase asociada a una partícula, completando así la dualidad onda-corpúsculo. Al describir el movimiento de una partícula sometida a un fenómeno periódico interno, con respecto a un observador en reposo, de Broglie introdujo “una onda ficticia asociada al movimiento del móvil”, y probó que si al comienzo del movimiento el fenómeno interno de la partícula está en fase con la onda, esta armonía de fase debe persistir siempre para que el movimiento sea estable. De este hecho dedujo que, por ejemplo, en el caso de un electrón moviéndose en una órbita alrededor del núcleo, debe haber un número exacto de longitudes de onda que cubran la órbita, de lo que resulta la condición de cuantización de Sommerfeld. Dedujo también que la partícula sigue en cada punto de su trayectoria el rayo de su onda de fase. Así, si la partícula tiene que atravesar una abertura de dimensiones comparables a la longitud de onda de la onda de fase, *su trayectoria deberá curvarse* de acuerdo con la difracción de la onda de fase. De esta manera, de Broglie reconcilió los fenómenos de difracción e interferencia con la hipótesis de la naturaleza corpuscular de la luz. Siguiendo este razonamiento, “un chorro de electrones que pase a través de un agujero suficientemente pequeño, debería exhibir también fenómenos de difracción.”, lo que fue confirmado experimentalmente poco después.

La hipótesis de de Broglie que cada partícula tiene una onda asociada fue el punto de partida para la elaboración de una nueva teoría de la mecánica. Si hay ondas, se decía, debe haber una ecuación de ondas. Lo que faltaba era descubrir esa ecuación. Y ese fue el gran logro de Erwin Schrödinger, a la sazón profesor en la Universidad de Zurich, interesado en lo que llamaba “la teoría ondulatoria de Einstein-de Broglie, según la cual un corpúsculo móvil no es más que la espuma de una radiación ondulatoria...” Profundo conocedor de los métodos de autovalores en ecuaciones con condiciones de contorno, por sus trabajos sobre la física de medios continuos, aplica su experiencia al problema y llega a la conclusión de que los niveles de energía posibles de una partícula tienen la apariencia de los autovalores de un cierto operador. En su monumental trabajo *Quantisierung als Eigenwertproblem*, publicado en cuatro comunicaciones en Annalen der Physik, a lo largo de 1926, Schrödinger introdujo su famosa “ecuación de ondas”, desarrollando un formalismo matemático clásico (en términos de ecuaciones diferenciales) que permitía interpretar los fenómenos cuánticos

sin apelar a extraños fenómenos discontinuos o “saltos cuánticos”.

En la primera comunicación, introduce la ecuación de ondas independiente del tiempo: Reemplazando en la ecuación de Hamilton del sistema $E = H(q, \partial S/\partial q)$ la función S , que se supone de variables separadas, por $K \log \psi$, se obtiene

$$H\left(q, \frac{K}{\psi} \frac{\partial \psi}{\partial q}\right) = E,$$

donde ψ es ahora un producto de funciones, cada una dependiendo de una sola de las coordenadas q . En los casos más simples, la ecuación anterior se puede expresar como una forma cuadrática en ψ y sus derivadas primeras, igualada a 0. Schrödinger reemplazó entonces las condiciones cuánticas por el siguiente postulado: *ψ tiene que ser una función real, univalente, de clase dos, para la cual la integral de la forma cuadrática mencionada en todo el espacio de configuración, tiene un extremo.* La ecuación de Euler correspondiente a este problema variacional, es precisamente la ecuación de ondas.

Por ejemplo, para el movimiento del electrón en el átomo de hidrógeno, con energía potencial $-e^2/r$ ($r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$), la función de Hamilton clásica es

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) - \frac{e^2}{r} = E,$$

luego la expresión asociada por el proceso de Schrödinger es

$$(\nabla \psi)^2 - \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi^2 = 0.$$

(nótese que la coordenada i -ésima del momento se sustituye por $(K/\psi)\partial\psi/\partial x_i$). La ecuación de Euler correspondiente al problema variacional asociado es, precisamente,

$$\Delta \psi + \frac{2m}{K^2} \left(E + \frac{e^2}{r} \right) \psi = 0,$$

con una condición de anulación de una cierta integral en el contorno. Esta es precisamente la “ecuación de ondas de Schrödinger independiente del tiempo”. Para resolverla, Schrödinger usa el método de separación de variables y prueba que para todo valor positivo de E , la ecuación tiene soluciones que tienden a 0 en el infinito con $1/r$. Para valores negativos de E , sin embargo, las soluciones sólo existen si $me^2/[K(-2mE)^{1/2}]$ es un entero n . Así, el espectro discreto resulta ser $E = -me^4/2K^2n^2$, que para $K = h/2\pi$ es precisamente el espectro de energía de Bohr para el átomo de hidrógeno. Sobre el significado de ψ , Schrödinger dice: “Se podría caer en la tentación de asociar la función ψ con un *proceso vibratorio* en el átomo, *probablemente más real que las órbitas electrónicas*, cuya realidad se cuestiona cada vez más...” y continúa: “He preferido presentarla [la nueva formulación] en términos puramente matemáticos, que permite destacar lo que, en mi opinión, es el punto

esencial: el hecho de que la misteriosa “exigencia de valores enteros” ya no requiere ninguna regla de cuantización, sino que resulta de las condiciones de finitud y univalencia de una cierta función... Parece innecesario señalar cuánto más gratificante resulta concebir una transición cuántica como un cambio energético de un estado vibratorio a otro, que considerarla como un “salto” de electrones... ”

Schrödinger aplica después su teoría a varias situaciones (oscilador lineal armónico, rotator rígido y vibratorio (molécula diatómica), etc., obteniendo resultados totalmente análogos a los que resultan de la mecánica de matrices. Estos éxitos llevan a Schrödinger a proponer una *interpretación* física de su formalismo, afirmando que “el proceso mecánico real sólo puede representarse apropiadamente como un *proceso ondulatorio* y no por el movimiento de puntos materiales en el espacio... ” En el caso de fenómenos macroscópicos, los *paquetes de onda* asociados pueden considerarse como masas puntuales, comparados con la estructura geométrica del camino. Pero esa identificación ya no es posible cuando las dimensiones del camino son del mismo orden de magnitud que la longitud de onda. “Por tanto, debemos partir de la *ecuación de ondas*, y no de las ecuaciones fundamentales de la mecánica, para incluir en nuestro estudio todos los posibles procesos mecánicos.”

La formulación de Schrödinger se aplicó inmediatamente con éxito a gran número de problemas de distribución discreta de energía. Supuso un método matemáticamente más asequible que la mecánica de matrices, e igualmente útil para resolver gran cantidad de problemas. Pero su interpretación física pronto se mostró inconsistente con la experiencia: Los “paquetes de onda” manifestaban tener propiedades contradictorias con los hechos observados. En particular, todos los experimentos de colisión de partículas elementales apuntaban con insistencia hacia la naturaleza corpuscular del electrón. En un trabajo de 1926 sobre el proceso de colisión entre una *partícula* libre y un átomo, Born, aunque rechazaba la interpretación ondulatoria de Schrödinger, adoptó el *formalismo* de la mecánica ondulatoria, afirmando que “entre las distintas formas de la teoría, sólo el formalismo de Schrödinger parece apropiado para este propósito, por lo que me inclino a considerarlo como la formulación más profunda de las leyes cuánticas.” Born interpreta la función de onda ψ , o mejor $|\psi|^2$, como una *densidad de probabilidad* de localizar al electrón (concebido en el sentido clásico, como una masa puntual con posición y momento bien definidos en cada instante), después de la colisión, en una determinada región.

La interpretación probabilística de Born fue aplicada con gran éxito a los problemas de dispersión de partículas. Sin embargo, se mostró inconsistente con los experimento de difracción de electrones a través de una pantalla con dos rendijas (recomendamos encarecidamente la lectura del Capítulo 1 del tercer tomo de la obra *Física* de Feynman, o su conferencia *Probabilidad e incertidumbre: la visión de la naturaleza a través de la Mecánica cuántica*). En este experimento, los fenómenos matemáticos de *interferencia* se manifiestan en la distribución *física* de las partículas en la pantalla. Por tanto, la función de onda asociada a la partícula debe tener una *realidad física* y no ser una mera *ficción matemática* que representa nuestro conocimiento del fenómeno. Heisenberg, que también rechazaba

la interpretación ondulatoria de Schrödinger y aceptaba las ideas de Born, asignó a estas funciones de onda ψ (que evolucionaban en el tiempo y en el espacio de acuerdo con la ecuación de Schrödinger) una cierta realidad física y las llamó *ondas de probabilidad* asociadas a una partícula, concibiéndolas como “una formulación cuantitativa del concepto de *potentia* en la filosofía aristotélica, según el cual los acontecimientos no están determinados de una manera perentoria, y la posibilidad o *tendencia* a que sucedan tiene una cierta clase de realidad... En la moderna teoría cuántica este concepto se formula cuantitativamente como *probabilidad* y está sujeto a leyes naturales expresables matemáticamente.”

La interpretación probabilística de Born tuvo también importantes consecuencias en la determinación de los requisitos que debía satisfacer la función ψ . Puesto que $|\psi|^2$ debía ser una densidad de probabilidad, el requisito a imponer era la integrabilidad de esa función. Los requisitos previos de regularidad se mostraron innecesarios. Otro problema no menos importante era demostrar que las autofunciones de la ecuación de Schrödinger constituían un sistema ortonormal completo del espacio de soluciones, lo que sólo se pudo probar en algunos casos.

Comparación de ambos formalismos.

Tanto la Mecánica de Matrices como la Mecánica Ondulatoria intentan explicar el mismo tipo de fenómenos y obtienen resultados análogos. Sin embargo, ambas son radicalmente diferentes, tanto en su formalismo matemático como en su interpretación física, según hemos visto. Heisenberg utilizó un enfoque *algebraico*, postulando la existencia de operaciones no conmutativas y reglas de cálculo muy distintas de las habituales. Físicamente, su concepción básica es el *corpúsculo* y enfatiza el elemento de *discontinuidad* en el microcosmos. Por el contrario, Schrödinger utilizó un enfoque *analítico*, basado en las técnicas usuales de ecuaciones diferenciales de la mecánica clásica de fluidos. Físicamente, su concepción básica es la *onda* y la *continuidad* en el mundo subatómico. Heisenberg se encontraba “disgustado y molesto” por la interpretación física de Schrödinger, mientras que éste encontraba “repelente” el formalismo algebraico de Heisenberg y faltó de cualquier interpretación física.

Ambos formalismos se desarrollaron partiendo de los de la física clásica (bien de la dinámica newtoniana o de la mecánica de fluidos), realizando en algún momento del cálculo una hipótesis innovadora. Y probablemente, como lúcidamente lo destacó Heisenberg, esta es la raíz del conflicto: el querer expresar conceptos clásicos como “posición”, “trayectoria” “velocidad” o “paquete de ondas” en términos del nuevo formalismo. Heisenberg, convencido de la potencia del aparato matemático, pensaba, como Einstein que “la teoría es la que decide lo que podemos observar”. Si la teoría rechaza la observabilidad de la trayectoria de una partícula, y ésta aparece en la cámara de Wilson como una sucesión discreta de puntos borrosos, la conclusión, según Heisenberg, es que “carece de sentido hablar de la posición de una partícula con una velocidad definida” Como vimos, esta línea de pensamiento, junto a su convencimiento de que el formalismo matemático es lo que permite establecer y predecir nuevos resultados, es lo que llevó a Heisenberg a enunciar

su *principio de incertidumbre*. El uso de palabras como “ondas” o “partículas” para la descripción de lo que realmente sucede, es irrelevante. Bohr aceptó las conclusiones de Heisenberg, pero no su interpretación, señalando que la causa última del principio de incertidumbre residía en la dualidad onda-partícula y en la imposibilidad de usar ambas descripciones simultáneamente, a pesar de que *las dos* son necesarias para obtener una descripción completa del fenómeno físico.

A pesar de su rechazo del formalismo de la mecánica de matrices, Schrödinger también estaba convencido de que ambos modelos se complementaban mutuamente. Y así, en la primavera de 1926, descubrió lo que llamó “una identidad matemática formal” entre la mecánica ondulatoria y la mecánica de matrices. Para ello, Schrödinger asoció con cada función física $F = F(p, q)$ de las variables p y q , el operador diferencial $F(\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial q}, q)$, que denotó por $[F, \cdot]$. Si (u_k) es un sistema ortonormal completo de funciones, cada función de onda ψ y su transformada $\psi' = [F, \psi]$ se podrá expresar (formalmente) como

$$\psi = \sum a_k u_k ; \psi' = \sum a_j u_j = \sum a_k [F, u_k]$$

(Obsérvese la admisión implícita de la conmutatividad de $[F, \cdot]$ con \sum , es decir, la *continuidad* de $[F, \cdot]$ respecto de la convergencia considerada). Si ahora expresamos $[F, u_k]$ en términos del sistema ortonormal: $[F, u_k] = \sum_j F_{jk} u_j$ e identificamos, tenemos:

$$a'_j = \sum_k F_{jk} a_k, \text{ con } F_{jk} = \int [F, u_k] u_j^*.$$

Así se asocia (dado el sistema (u_k)) a cada función $F(p, q)$ una matriz (F_{jk}) y esta asociación preserva las operaciones suma y producto. Toda ecuación de la mecánica ondulatoria puede así ser trasladada a una ecuación matricial. Posteriormente, Schrödinger tomó como base (u_k) *los autovalores de la ecuación de ondas* que ahora puede escribirse como $[H, \psi] = E\psi$, siendo $H = H(p, q)$ el Hamiltoniano del sistema. Los autovalores del operador son los posibles valores E_k de la energía, y verifican $[H, \psi_k] = E_k \psi_k$. En términos de este sistema (supuesto completo), la matriz \mathbf{H} asociada, es diagonal. Es decir, el problema básico de la mecánica de matrices (diagonalizar la matriz \mathbf{H}) es equivalente a resolver el problema de valores propios $[H, \psi] = E\psi$.

También indicó Schrödinger cómo, recíprocamente, conocidos los valores de la matriz (q_{ij}) , se podían recuperar las autofunciones (u_j) : Si $q_{ij} = \int u_j u_k$, entonces (supuso Schrödinger) los valores de las integrales $\int q^m u_j(q) u_k(q) dq$ pueden calcularse por multiplicación matricial (sería el elemento (ij) de la matriz \mathbf{q}^m). Se conocerían así todos los “momentos” de la función $u_j u_k$ (j y k fijos) que, bajo condiciones muy generales, se sabía que determinan unívocamente la función. Por tanto, concluía Schrödinger, se pueden conocer todas las funciones $u_j u_k$, en particular las u_j^2 , y finalmente las u_j .

Desde un punto de vista estrictamente formal, Schrödinger probó pues que su mecánica ondulatoria implicaba los aspectos básicos de la mecánica de matrices (aunque

no recíprocamente) en los casos simples de espectro discreto. Sin embargo, sus ideas fueron marcando el camino hacia la teoría de transformaciones de Dirac y Jordan primero, y la ulterior unificación de Von Neumann. Al mismo tiempo, sirvieron para decantar el desarrollo conceptual moderno de la Mecánica cuántica.

La Teoría de Transformaciones

El problema básico en la mecánica de matrices, como vimos, era la solución de la ecuación matricial $S^{-1}HS = W$ o

$$SW = HS, \tag{*}$$

siendo $H = (h_{mn})$ la matriz asociada al hamiltoniano del sistema, $S = (s_{mn})$ una matriz unitaria y $W = (w_m \delta_{mn})$ una matriz diagonal, cuyos términos diagonales son los posibles valores de la energía del sistema en consideración. Por tanto, (*) puede escribirse así:

$$\sum_n h_{mn} s_{nk} = w_k s_{mk} (k = 1, 2, \dots).$$

Así pues, cada una de las columnas $s^{(k)} = (s_{mk})$ de la matriz S y los correspondientes elementos diagonales w_k de W son soluciones del problema de valores propios

$$\sum_n h_{mn} x_n = \lambda x_m (m = 1, 2, \dots) \tag{\S}$$

Por otro lado, el problema básico en la mecánica ondulatoria era resolver el problema de valores propios

$$H\psi(q) = \lambda\psi(q) \tag{\S\S}$$

siendo H el operador diferencial asociado al hamiltoniano del sistema. La semejanza de los problemas (§) y (§§) es evidente, considerando (x_m) como función de la “variable discreta” m y ψ función de la “variable continua” q . Siguiendo la analogía, (h_{mn}) debería corresponder a una función de dos variables $h(q, q')$ y la suma \sum a una integral \int . En otras palabras, la ecuación (§§) debería poder escribirse como

$$\int h(q, q')\psi(q') dq' = \lambda\psi(q).$$

Comparando esta expresión con (§§), resulta

$$H\psi(q) = \int h(q, q')\psi(q') dq',$$

es decir, $h(q, q')$ es un núcleo integral para el operador diferencial H . Así, las mecánicas matricial y ondulatoria podrían unificarse si todo operador posible H se pudiera representar

como un operador integral. ¡Pero esto no es posible ni siquiera para un operador tan sencillo como la identidad y funciones de una variable real! En efecto de $H\psi = \psi$ resulta que

$$\psi(q) = \int h(q, q')\psi(q') dq', \text{ para toda función } \psi.$$

En particular, haciendo $q = 0$ resulta que

$$\psi(0) = \int h(0, q')\psi(q') dq' = \int K(q')\psi(q') dq'.$$

Con elecciones adecuadas de ψ se obtienen las condiciones contradictorias $\int K = 0$ y $\int K = 1$ (Cfr., por ejemplo. [VN, pág. 17]).

Sin embargo, el físico británico P. A. M. Dirac, buen conocedor del cálculo simbólico de Heaviside en la teoría electromagnética, resuelve esta dificultad (en su trabajo *The physical interpretation of the quantum dynamics*, Proc. Royal Soc. of London (1926), 621-641) con la ayuda de la más famosa de las “funciones singulares”: la función δ , que a partir de entonces llevaría también su apellido. Este ubicuo ente (la “función” δ) aparece en matemáticas implícitamente ya en los trabajos de Fourier y explícitamente en un trabajo de G. Kirchoff sobre el principio de Huygens para la ecuación de ondas, en donde introduce una función auxiliar F tal que

$$\int_I F(s)ds = 1$$

“para todo intervalo con extremos de distinto signo” Kirchoff pone como ejemplo la función

$$F(s) = \frac{r}{\sqrt{\pi}} \exp(-r^2 t^2)$$

para r constante positiva “muy grande”. Obviamente, esta función no cumple los requisitos señalados, aunque puede tomarse por una “aproximación” de la función deseada. En cualquier caso, la δ aparece, más o menos maquillada, en la mayor parte de los trabajos relacionados con las funciones de Green, y la determinación de las “soluciones fundamentales” de un operador diferencial en un punto. Pero es en Física donde aparece casi constantemente, disfrazada con distintos ropajes. Así, el ingeniero eléctrico O. Heaviside desarrolló a finales del siglo XIX un cálculo operacional, de difícil justificación matemática, pero ampliamente utilizado por sus colegas en el primer tercio de este siglo, basado en la introducción de la función δ como “función impulso”, derivada de la función $H(t)$ que vale 0 si $t < 0$ y 1 si $t > 0$. Resulta por tanto que $\delta(x) = 0$ para todo $x \neq 0$ y, por integración formal, $\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)dx = 1$. Esta es la definición que adoptó Dirac en su famoso libro *The Principles of Quantum Mechanics* (1a. Ed. en 1930), aunque en la 3a. edición menciona la definición original de Heaviside. Suponiendo la validez de las reglas formales del cálculo para la δ , Dirac prueba a continuación “algunas propiedades de la función δ que se deducen de la definición, o al menos no son inconsistentes”. Entre ellas,

$$\delta(-x) = \delta(x); x\delta(x) = 0; x\delta'(x) = -\delta(x)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta(x-a)dx = f(a); \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\delta^{(n)}(a-x)dx = f^{(n)}(a)$$

Dirac es consciente de que “estrictamente hablando, dese luego $\delta(x)$ no es una función propia de x , pero puede considerarse como límite de cierta sucesión de funciones. Para todos los propósitos prácticos de la Mecánica Cuántica, se puede usar $\delta(x)$ como si fuera una función propia, sin obtener resultados incorrectos. También se pueden usar las derivadas sucesivas de $\delta(x)$, que son aún más discontinuas y menos ‘propias’ que la propia $\delta(x)$.” Estas palabras de Dirac muestran claramente el triste sino de la δ : para los físicos se trata de una idealización y formalismo útil, que los matemáticos se encargarán de rigorizar; para los matemáticos, es una noción intuitiva, sin realidad matemática, cuyo uso se justifica por las aplicaciones físicas. En todo caso, en las sucesivas ediciones de su obra, Dirac fue incluyendo nuevas propiedades de la δ (todas ellas correctas desde el punto de vista de la Teoría de Distribuciones), que muestran que realmente era un hábil manipulador con esta función singular. Con la introducción de la δ , ya es posible representar cualquier operador diferencial como un operador integral. Por ejemplo:

$$\frac{d^n}{dq^n}\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta^{(n)}(q-q')\psi(q')dq'; \quad q^n\psi(q) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(q-q')q^n\psi(q')dq',$$

etc. y lo mismo para el caso de varias variables. Hacemos notar que esta idea de representar cualquier operador como un operador integral en un espacio adecuado (de funciones generalizadas), tuvo su formulación precisa y rigurosa en el llamado “teorema de los núcleos” de L. Schwartz.

Con esta línea argumental, Dirac establece una teoría de transformaciones canónicas por matrices discretas o continuas, que permite unificar los formalismos de la mecánica de matrices y la mecánica ondulatoria, como hemos dicho. Pero aún más, en el libro de Dirac aparecen ya claramente los elementos conceptuales propios de la Mecánica Cuántica en sentido moderno: Por ejemplo, toda la información sobre el *estado* del sistema se encuentra en la *función de estado* ψ , con independencia de cualquier observable o magnitud física (a diferencia de lo que sucede con la Mecánica clásica, en la que el estado del sistema queda definido en cada instante por ciertas variables observables, como posición y momento, por ejemplo). Los *observables*, es decir, las variables dinámicas que podemos medir (la energía por ejemplo) aparecen ya como *operadores*. La medida de un observable es una operación física bien definida, que proporciona un número real, la *medida del observable*, que necesariamente ha *de ser un valor propio del operador*. Esta y otras razones técnicas (posibilidad de diagonalización, etc.) hacen que los operadores que representan los observables sean siempre *hermitianos*, etc. Todos estos hechos, de los que, conceptualmente, el más importante es la separación entre *estado* y *observable*, se encuentran ya en la obra de Dirac y desde entonces se han incorporado a cualquier formulación aceptada de la Mecánica Cuántica.

Por la época en la que apareció el primer artículo de Dirac, un grupo de matemáticos, encabezados por Hilbert, Nordheim y von Neumann, estaban explorando ideas similares,

esto es, representar los observables físicos como operadores integrales, encontrándose de manos a boca, como hemos visto, con la función δ y, por tanto, a “dificultades matemáticas insolubles”, según Von Neumann. En consecuencia, partiendo de los resultados de Hilbert sobre ecuaciones integrales de la primera década del siglo, Von Neumann desarrolló entre 1927 y 1929 un nuevo marco matemático de la teoría, que es el que esencialmente se utiliza en la actualidad.

La formulación de Von Neumann

El método de Dirac se basaba, en el fondo, en la búsqueda de una analogía formal entre el espacio “discreto” Z de los valores de los índices de las matrices en (§), y el espacio Ω de la variable “continua” q en (§§). Como señala Von Neumann, “... no es de extrañar que esto no se pueda lograr sin cierta violencia sobre el formalismo y la matemática: los espacios Z y Ω son verdaderamente muy distintos, y toda tentativa de ponerlos en relación debe chocar con grandes dificultades.” ([VN, pág. 20]). El descubrimiento innovador de Von Neumann fue percatarse que, si bien Z y Ω son muy distintos, *los espacios de funciones reales sobre ellos que intervienen en la Mecánica Cuántica son esencialmente los mismos*. En efecto, a las sucesiones que aparecían en la Mecánica de matrices normalmente se les imponía la condición de normalización $\sum |x_n|^2 = 1$, mientras que ya hemos dicho que las funciones ψ de la Mecánica ondulatoria debían cumplir $\int |\psi|^2 = 1$, tras su interpretación como densidades de probabilidad. Esto sugirió a Von Neumann limitar el ámbito de las sucesiones o funciones aceptables en ambas teorías a lo que hoy conocemos como los espacios

$$\ell_2 = \{\mathbf{x} = (x_n) : x_n \in \mathbf{C} \text{ y } \|\mathbf{x}\| = (\sum |x_n|^2)^{1/2} < \infty\}$$

y

$$L_2(\Omega) = \{\psi : \Omega \rightarrow \mathbf{C} : \psi \text{ es medible Lebesgue y } \|\psi\| = (\int |\psi|^2)^{1/2} < \infty\}$$

(Von Neumann los designó por F_Z y F_Ω , respectivamente). Ambos espacios eran bien conocidos en Matemáticas. El espacio ℓ_2 lo introdujo Hilbert en sus trabajos sobre ecuaciones integrales y su estructura era bien conocida, tras la tesis de Schmidt (1908). El espacio $L_2(\Omega)$ aparece implícitamente en los trabajos de Lebesgue sobre la teoría de la integral (para Ω un intervalo de la recta real) y más o menos explícitamente en los trabajos de Schmidt y otros discípulos de Hilbert. De una manera clara, aparece en sendos trabajos independientes de F. Riesz y E. Fisher de 1907, en los que prueban que *ambos espacios son isomorfos e isométricos*, es decir, se puede establecer una correspondencia biyectiva entre ellos, que preserve la suma y el producto por escalares y tal que si $\mathbf{x} \leftrightarrow \psi$, entonces $\|\mathbf{x}\| = \|\psi\|$. Ambos constituían los dos modelos conocidos de “espacios de Hilbert”. Como quiera -razonó Von Neumann- que F_Z y F_Ω (y no Z y Ω !) forman el “substrato analítico real” de las mecánicas matricial y ondulatoria, respectivamente, y ambos espacios son isomorfos, esta isomorfía significa que ambas teorías deben dar los mismos resultados. En particular, por ejemplo, en el caso de un grado de libertad, los operadores $P = \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{d}{dq}$ y

$Q =$ producto por q , verifican sobre su dominio común en L_2 la relación $P \cdot Q - Q \cdot P = \frac{h}{2\pi i} I$, luego la misma relación verificarán en ℓ_2 los operadores (matrices) correspondientes en el isomorfismo.

De esta manera, la equivalencia de la mecánica de matrices y la mecánica ondulatoria resulta una consecuencia lógica del hecho de que ambas son sólo diferentes representaciones matemáticas de las mismas relaciones abstractas. “Es de esperar -añade Von Neumann- que una formulación de la mecánica cuántica basada exclusivamente en las propiedades intrínsecas básicas comunes a F_Z y F_Ω , permitirá obtener una estructura unitaria, presentando las relaciones absolutamente esenciales, y eliminando lo accidental que resulta del marco formal en cada caso elegido... ” [VN, pág. 23]. A tal fin, Von Neumann desarrolla una teoría axiomática del espacio de Hilbert (separable) abstracto, en el sentido actual, ¡más de 20 años después de que se hubiera introducido los modelos concretos ℓ_2 y L_2 , y 7 años más tarde de la Tesis de Banach, en la que se introduce la noción de espacio normado completo abstracto!. Después de estudiar las propiedades geométricas usuales (proyección ortogonal, existencia de bases ortonormales, etc.) y de probar que tanto ℓ_2 como L_2 son realizaciones especiales del espacio de Hilbert abstracto, Von Neumann aborda el estudio de los operadores lineales. Von Neumann reconoce inmediatamente que muchos operadores de la mecánica cuántica no están definidos en todo el espacio L_2 (recordemos, por ejemplo, los que hemos llamado P , esencialmente el operador derivación, o Q , el operador multiplicación por la función identidad), pero su dominio es denso (habitualmente estarán definidos sobre las funciones infinitamente diferenciables con soporte compacto, al menos), por lo que desarrolla una teoría sobre esta clase de operadores lineales, separándose así de los estudios realizados anteriormente. Define la noción de *adjunto* de un operador densamente definido, y de la manera habitual, la de operador *hermitiano* (en el sentido que T^* es una extensión de T) y *unitario*, y a continuación pasa a tratar el problema de valores propios. Prueba sin dificultad que los autovalores de un operador hermitiano son todos reales, y que los autovectores asociados a autovalores distintos son ortogonales, pero lo que en general no sucede es que los autovectores asociados a un operador hermitiano *formen un sistema completo*. Más aún, en alguno de los casos más interesantes, ¡no aparecen autofunciones pertenecientes al espacio! Por ejemplo, para el operador $P\psi(q) = (h/2\pi i)\psi'(q)$, la ecuación $P\psi = \lambda\psi$ se cumple para $\psi(q) = \exp(2\pi i\lambda q/h)$, y cualquier λ . ¡Pero las funciones $\exp(2\pi i\lambda q/h)$ no pertenecen a L_2 ! Peor aún es el caso del operador $Q\psi(q) = q\psi(q)$, cuyo autovector asociado al posible autovalor λ debe verificar $(q - \lambda)\psi(q) = 0$ para todo q , y por tanto $\psi(q) = 0$ para $q \neq \lambda$. El requerimiento de integrabilidad nos tienta a tomar como ψ la $\delta(q - \lambda)$, algo matemáticamente inadmisibles para Von Neumann.

Este tipo de dificultades obliga a Von Neumann a reformular la teoría de autovalores, usando un método desarrollado por Hilbert en 1906 en su estudio de las ecuaciones integrales. Para ello, reformulemos adecuadamente el problema de diagonalización de una matriz hermitiana H en el espacio de N dimensiones: Si $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_r$ son los $r(\leq N)$ autovalores distintos de H y P_j es la proyección ortogonal sobre el subespacio de

vectores propios asociados a λ_j , resulta que

$$I = \sum_{j=1}^r P_j, H(x) = \sum_{j=1}^r H P_j(x) = \sum_{j=1}^r \lambda_j P_j(x).$$

Si para cada $\lambda \in \mathbf{R}$ ponemos $E(\lambda) = 0$, si $\lambda < \lambda_1$, $\sum_{\lambda_j \leq \lambda} P_j$, resulta que tenemos definida una familia $\{E(\lambda)\}$ de proyecciones, constante en cada uno de los intervalos $-\infty < \lambda < \lambda_1$; $\lambda_1 \leq \lambda < \lambda_2$; \dots $\lambda_{r-1} \leq \lambda < \lambda_r$; $\lambda_r \leq \lambda < +\infty$ y, por tanto, si $\Lambda_o < \Lambda_1 < \dots < \Lambda_s$ son una cantidad finita de números, con tal de que entre ellos figuren los $\lambda_1, \dots, \lambda_r$, podemos escribir

$$\begin{aligned} (H(x) | y) &= \sum_{j=1}^r \lambda_j ([E(\lambda_j)(x) - E(\lambda_{j-1})(x)] | y) = \\ &= \sum_{k=1}^s \Lambda_k ([E(\Lambda_k)(x) - E(\Lambda_{k-1})(x)] | y), \forall x, y. \end{aligned}$$

Recordando la noción de integral de Stieltjes, podemos escribir lo anterior en la forma

$$(H(x) | y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d(E(\lambda)(x) | y),$$

o, simbólicamente,

$$H = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda dE(\lambda).$$

Esta formulación del teorema espectral es la que Von Neumann generalizó de forma rigurosa en el espacio de Hilbert infinito dimensional. En efecto, en el caso de operadores acotados, Hilbert había probado que, dado un operador hermitiano H en $E = L_2$, existe una *única* familia $\{E(\lambda) : \lambda \in \mathbf{R}\}$ de proyecciones que cumple las siguientes propiedades:

a) Para cualquier $x \in E$, $E(\lambda)x \rightarrow 0$ para $\lambda \rightarrow -\infty$, $E(\lambda)x \rightarrow x$ para $\lambda \rightarrow +\infty$ y $E(\lambda)x \rightarrow E(\lambda_o)x$ para $\lambda \rightarrow \lambda_o$ por la derecha.

b) Si $\lambda \leq \lambda'$, se sigue que $E(\lambda) \leq E(\lambda')$ (en la relación de orden definida para los operadores hermíticos).

c) x pertenece al dominio de definición de H si y sólo si la integral $\int_{-\infty}^{+\infty} \lambda^2 d(\|E(\lambda)x\|^2)$ es convergente, en cuyo caso, para todo $y \in E$ se tiene

$$(Hx | y) = \int_{-\infty}^{+\infty} \lambda d((E(\lambda)x | y)).$$

Una familia con las propiedades anteriores, se llama una *resolución de la identidad* para H . Para el caso de operadores no acotados, Von Neumann extendió el teorema en 1929, probando que todo operador hermitiano puede extenderse a uno *maximal* (es decir, sin

extensiones propias), y que todo operador hermitiano maximal posee o bien una única resolución de la identidad o ninguna. Este último caso es, en cierto modo, excepcional. En todo caso, los operadores *autoadjuntos* (es decir, tales que $T = T^*$) (¡no todo operador hermitiano es autoadjunto!) son maximales, cerrados y poseen siempre resolución de la identidad (Von Neumann los llama *hipermáximos*), y son los únicamente relevantes para la Mecánica cuántica ([VN, pg. 175]. A partir de una resolución de la identidad, se pueden recuperar los valores propios, pues es fácil probar que λ_o es un autovalor de H si y sólo si es un punto de discontinuidad de $E(\lambda)$ ([VN, p. 87 y sgs.]. Estos valores constituyen el *espectro discreto* de H , que forma un conjunto a lo más numerable (pues todo sistema ortonormal en E es a lo más numerable). Los puntos en los que $E(\lambda)$ es continua y no constante en un entorno, constituyen el *espectro continuo* de H . Como ejemplo, Von Neumann muestra que los operadores P , de derivación, y Q , producto por la identidad, tienen espectro continuo toda la recta real y da un método formal para obtener la resolución de la identidad en estos casos.

Von Neumann continúa el desarrollo de la teoría, reformulando en su lenguaje los interpretaciones de carácter estadístico de Born y obteniendo una formulación rigurosa de la teoría de transformaciones, que comprende todos los formalismos previos de la Mecánica cuántica. En particular, el principio de incertidumbre aparece como un *teorema* de la teoría: si P y Q son operadores hermitianos tales que $PQ - QP = cI$ (c constante), el producto de sus varianzas en el estado ψ es $\geq |c|/2$ ([VN, pg. 166 y sgs.]).

El trabajo de Von Neumann es realmente impresionante. No sólo desde el punto de vista de la fundamentación de la mecánica cuántica, que es la que más o menos se sigue actualmente, sino desde el punto de vista matemático, elaborando la mayor parte de la moderna teoría espectral en espacios de Hilbert e iniciando su monumental trabajo sobre las subálgebras involutivas débilmente cerradas (por cierto, a Von Neumann se debe también la definición general de *topología débil* y las distintas topologías no normadas usuales en espacios de operadores) de los endomorfismos continuos de un espacio de Hilbert, lo que hoy se conoce como *álgebras de Von Neumann*. Para algunos, como J. Dieudonné (Cfr. [DD, pg. 183]), estos son los trabajos más difíciles y profundos de Von Neumann, obteniendo resultados absolutamente nuevos, y estableciendo conexiones con muchas otras teorías. Hay que decir que estos trabajos también tuvieron su origen, al menos en parte, en la Mecánica cuántica. En efecto, von Neumann escribió un artículo en colaboración con Jordan y Wigner sobre la clasificación de las álgebras reales, finito dimensionales y no asociativas (*álgebras de Jordan*), propuestas por Jordán como un modelo más simple para expresar la teoría de la medición en mecánica cuántica y la extensión de sus métodos a los fenómenos relativistas. Sus resultados probaron que tales álgebras no verifican, en general, las relaciones de conmutación de Heisenberg, lo que llevó a Von Neumann a modificar sus postulados, reemplazando la restricción de dimensionalidad finita por condiciones topológicas más débiles. El resultado fue la definición de álgebra de von Neumann.

En su libro *Fundamentos Matemáticos de la Mecánica Cuántica*, cuya lectura es ab-

solutamente recomendable, se encuentra recogida gran parte de la obra sobre Mecánica Cuántica, incluyendo una presentación axiomática que, con alguna pequeña variación, presentamos a continuación. Partiendo de las nociones primitivas de *sistema*, *observable* y *estado*, tenemos:

- AXIOMA I. A todo sistema corresponde un espacio de Hilbert \mathcal{H} cuyos vectores (vectores de estado, funciones de onda) describen completamente los estados posibles del sistema.
- AXIOMA II. A cada observable \mathcal{A} corresponde un único operador autoadjunto (o hipermáximo) A sobre \mathcal{H} .
- AXIOMA III. Para un sistema en el estado ψ , la probabilidad de que el resultado de una medida del observable A , representado por A , esté entre λ_1 y λ_2 viene dada por $\| (E(\lambda_2) - E(\lambda_1))\psi \|^2$, siendo $E(\lambda)$ la resolución de la identidad asociada a A .
- AXIOMA IV. La evolución temporal de un vector de estado ψ viene determinada por la ecuación $H\psi = i\hbar\partial\psi/\partial t$ (ecuación de Schrödinger), donde el Hamiltoniano H es el operador de evolución y \hbar es la constante de Planck dividida por 2π .
- AXIOMA V. Si una medida del observable \mathcal{A} , representado por A , da un resultado entre λ_1 y λ_2 , entonces el estado del sistema inmediatamente después de la medición es una autofunción de $E(\lambda_2) - E(\lambda_1)$

Von Neumann supuso también que cada operador hermitiano representaba un observable, y que cada elemento de \mathcal{H} era un posible estado del sistema, pero la existencia de reglas de superselección, descubiertas en 1952 por Wick y Wigner, han obligado a modificar este punto de vista. Del Axioma III resulta inmediatamente que el resultado de medir un observable, representado por A , es necesariamente un elemento del espectro de A . Este axioma contiene también como caso particular la conocida interpretación probabilística de Born de la función de onda.

Existen varias otras axiomatizaciones de la Mecánica cuántica, que toman como punto de partida los trabajos de von Neumann. Podemos citar entre ellas las de Segal (1947), que permite asociar a cada sistema adecuado de observables un espacio de funciones reales continuas sobre un espacio compacto Hausdorff adecuado; Mackey (1960), que asocia a cada sistema físico un conjunto parcialmente ordenado y ortocomplementado \mathcal{L} , de modo que los observables se pueden identificar con medidas borelianas sobre la recta, valoradas en \mathcal{L} , y los estados con medidas de probabilidad sobre \mathcal{L} ; los modelos basados en el uso de lógicas tri- o polivaluadas, como el desarrollado en la III parte de la obra de Reichenbach [RE], etc.

Conclusión

La creación de la Mecánica Cuántica representó una de las mayores revoluciones de la Física, con profundas implicaciones, no sólo para la física, sino también para la filosofía, y supone un cambio radical sobre nuestra concepción de la realidad. A lo largo de las páginas anteriores hemos intentado dar una breve idea de su desarrollo conceptual. Pero, sobre todo, hemos querido destacar el complejo proceso del establecimiento de su aparato matemático, que hoy por hoy, parece firmemente establecido sobre el modelo de Von Neumann. Sin embargo, la *interpretación* de ese formalismo está muy lejos de ser unánime y continúa siendo fuente de controversias entre las distintas escuelas.

Volviendo al formalismo matemático, hemos podido también apreciar la profunda influencia de la Mecánica Cuántica en el desarrollo de distintas áreas de las Matemáticas, desde la teoría de álgebras no conmutativas e incluso no asociativas (*álgebras de Jordan*) a los espacios de Hilbert abstractos, la teoría espectral para operadores no acotados y las álgebras de operadores, pasando por los problemas de autovalores de ecuaciones diferenciales e integrales y la teoría de “funciones singulares”, siendo una de las más claras motivaciones para el desarrollo de la teoría de distribuciones.

Por otro lado, pronto se dieron cuenta los físicos que el uso de matemáticas rigurosas simplifica cualquier análisis lógico, pues permite establecer claramente la distinción entre los problemas sintácticos y semánticos de cualquier posible interpretación. Ello ha motivado una intensa actividad y colaboración entre matemáticos, físicos y lógicos que, desde el punto de vista de las Matemáticas, ha supuesto importantes contribuciones en campos como el álgebra abstracta, la teoría de conjuntos, la topología, la teoría de la medida, el análisis funcional, etc., mostrando una vez más la profunda interrelación entre Física y Matemáticas.

BIBLIOGRAFIA

- [DD] J. DIEUDONNE, History of Functional Analysis. *North Holland Math. Studies* **49**. North-Holland Pub., 1981.
- [Di] P. A. M. DIRAC, The Principles of Quantum Mechanics, (4a. Edición) *Oxford University Press*, 1958.
- [FLS] R.P. FEYNMAN, R.B. LEIGHTON, M. SANDS, *Física Vol. III.- Mecánica Cuántica*. Addison Wesley Iberoamericana, 1971.
- [Gi] D. T. GILLESPIE, Introducción a la Mecánica Cuántica. *Ed. Reverté*, 1976.
- [J1] M. JAMMER, The Philosophy of Quantum Mechanics, *Wiley Interscience*. 1974.
- [J2] M. JAMMER, The conceptual development of Quantum Mechanics. *The History of Modern Physics, 1800-1950. Vol. 12*. Amer. Inst. of Physics, 1989.

- [Re] H. REICHENBACH, Philosophic foundations of Quantum Mechanics. *University of California Press*. 1944.
- [VN] J. VON NEUMANN, Fundamentos matemáticos de la Mecánica Cuántica. *Publicaciones del instituto de Matemáticas "Jorge Juan"*. Madrid, 1949.
- [VW] B. L. VAN DER WAERDEN, Sources of Quantum Mechanics. *Dover Pub.*, 1968.