



Universidad Autónoma de Madrid
FACULTAD DE CIENCIAS
DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICAS

INTRODUCCIÓN AL GRUPO DE HEISENBERG Y A LOS OPERADORES PSEUDO-DIFERENCIALES

PROYECTO FINAL DE ASIGNATURA
FUNDAMENTOS DE ANÁLISIS MATEMÁTICO
Máster en Matemáticas y Aplicaciones

Autor:
Alejandro Pérez González

Profesor:
Fernando Soria de Diego

Enero 2021

Resumen

El grupo de Heisenberg aparece en la matemática de la mecánica cuántica al considerar el álgebra de operadores generado por $(Qf)(x) = xf(x)$, $(Pf)(x) = -if'(x)$. Estos operadores cumplen la relación de Born:

$$[Q, P]f = if$$

El grupo de Heisenberg es un grupo de Lie cuya álgebra de Lie es la generada por Q , P , i y el corchete. Por sus aplicaciones no es conveniente tomar el grupo simplemente conexo sino un cierto cociente, el grupo generado por los operadores:

$$(\tau_p f)(x) = f(x + p), \quad (m_q f)(x) = e^{iqx} f(x)$$

Si interpretamos a P como el momento p de una partícula y a Q como la posición q , dada una función $a(q, p)$ ¿qué operador en \mathcal{S} o L^2 debemos asociarle? Este procedimiento es conocido como cuantización, es vital para entender otras magnitudes físicas como la energía $H(q, p) = \frac{p^2}{2m} + V(q)$, y es necesario entender el grupo de Heisenberg para estudiarlo.

Esto también tiene interés desde un punto de vista matemático. Imaginemos que tenemos un operador de la forma:

$$\begin{aligned} L &= \sum_{k=0}^n a_k(x) \frac{d^k}{dx^k} \\ (Lf)(x) &= \sum_{k=0}^n a_k(x) f^{(k)}(x) = \sum_{k=0}^n a_k(x) \int_{\mathbb{R}} \widehat{f^{(k)}}(\xi) e^{i2\pi\xi x} d\xi \\ &= \int_{\mathbb{R}} \left(\sum_{k=0}^n a_k(x) (-i2\pi\xi)^k \right) \widehat{f}(\xi) e^{i2\pi\xi x} d\xi \end{aligned}$$

Esto sugiere estudiar operadores T de la forma:

$$(Tf)(x) = \int_{\mathbb{R}} a(x, \xi) \widehat{f}(\xi) e^{i2\pi\xi x} d\xi$$

que llamaremos pseudo-diferenciales. Mencionamos la relación entre esta teoría matemática y la cuantización.

Empezamos con un resumen sobre la teoría de representaciones unitarias, particularizando en la representación de Schrödinger del grupo de Heisenberg que encapsula las ideas de la cuantización para acabar dado la prueba del teorema de Stone-Von Neumann sobre la unicidad de las representaciones unitarias del grupo.

Añadimos un breve apéndice sin mucha rigurosidad matemática sobre probabilidad libre y mecánica cuántica, para los interesados en entender qué es físicamente la cuantización y sus reglas probabilistas, así como el principio de incertidumbre.

Índice general

1. Representaciones del grupo de Heisenberg	2
1.1. Integración de funciones vectoriales y operadores	2
1.2. Grupos unitarios uniparamétricos	5
1.3. Representaciones de grupos topológicos	7
1.4. Grupo de Heisenberg	9
1.5. Representación de Schrödinger	11
1.5.1. Representación integral	12
1.6. El teorema de Stone-Von Neumann	14
2. Cuantización de Weyl y operadores pseudo-diferenciales	17
2.1. Cuantización de Weyl	18
2.2. Operadores pseudo-diferenciales	19
A. Introducción a la mecánica cuántica	21
A.1. Planck, Einstein y De Broglie	21
A.2. La ecuación de Schrödinger	22
A.2.1. Ecuación de Klein-Gordon y de Dirac	23
A.3. Probabilidad en mecánica cuántica, la interpretación de Copenhage .	24
A.3.1. Ejemplo «Toy», la partícula en una caja	26
A.4. Cuantización, ¿qué es?	27
A.5. Probabilidad libre y análisis no conmutativo	28
Bibliografía	30

Capítulo 1

Representaciones del grupo de Heisenberg

1.1. Integración de funciones vectoriales y operadores

Necesitamos definir la integral de funciones $f : X \rightarrow B$ donde (X, μ) es un espacio de medida y B es un espacio de Banach que en las aplicaciones será $B = B(H)$, los operadores acotados de un espacio de Hilbert. Hay varias formas de llevar esto a cabo, según si integramos fuerte o débilmente.

Definición 1.1. Sea X un espacio medible y $(B, \|\cdot\|)$ un espacio normado.

Una función $f : X \rightarrow B$ es medible si lo es respecto de la σ -álgebra de Borel de B (generada por la norma). f es Bochner-medible si además $f = g$ c.t.p. y $g(X)$ es separable.

f se dice Pettis-medible si para todo $\phi \in B^*$ (el dual topológico) $\phi \circ f : X \rightarrow \mathbb{C}$ es medible.

Una función simple $s : X \rightarrow B$ es una función medible que toma un número finito de valores:

$$s(x) = \sum_{i=1}^n y_i \chi_{E_i}, \quad y_i \in B, \quad E_i \text{ medibles y disjuntos}$$

Si todos los E_i son de medida finita, definimos su integral respecto de la medida μ como:

$$\int_X s d\mu = \sum_{i=1}^n y_i \mu(E_i)$$

Equivalentemente, una función simple es integrable si lo es su norma.

La separabilidad es necesaria para las aproximaciones por funciones simples [1].

Proposición 1.2. Sea X un espacio medible y $(B, \|\cdot\|)$ un espacio normado. Son equivalentes:

- f se aproxima c.t.p. por funciones simples s_n (en norma). Y además podemos suponer que en c.t.p. x :

$$\|s_n(x)\| \leq \|f(x)\|$$

- f es Bochner-medible

Demostración. Una implicación está clara. Si $f = g$ c.t.p. y g se aproxima por funciones simples entonces g es medible y $g(X)$ es separable.

Sea D un subconjunto numerable denso de $f(X)$. Añadimos múltiplos racionales y el 0 a D , llamamos al conjunto resultante $D^\sim = \{y_j\}_{j=1}^\infty$ y suponemos $y_1 = 0$.

Así, se cumple que para todo $x \in X$ y $\epsilon > 0$, existe y_m :

$$\|y_m\| \leq \|f(x)\|, \quad \|f(x) - y_m\| < \epsilon$$

Para cada n y x , tomamos el menor¹ $j \leq n$ tal que:

$$\|y_j\| \leq \|f(x)\|$$

$$\|f(x) - y_j\| \leq \|f(x) - y_k\|, \quad k = 1, \dots, n$$

Y definimos $f_n(x) = y_j$. Obviamente $f_n(x)$ toma como mucho los valores y_1, \dots, y_n , y además los conjuntos $\{x \in X \mid f_n(x) = y_j\}$ son medibles, pues sólo involucran y_j , $f(x)$, $y_j - f(x)$ y sus normas.

Trivialmente $\|f_n(x)\| \leq \|f(x)\|$ y se da la convergencia. Para cada x y $\epsilon > 0$ hay un y_m con $\|y_m\| \leq \|f(x)\|$ y $\|y_m - f(x)\| < \epsilon$, luego para todo $n \geq m$, $f_n(x) = y_k$ para algún k y:

$$\|f_n(x) - f(x)\| = \|y_k - f(x)\| \leq \|y_m - f(x)\| < \epsilon$$

□

Proposición 1.3. (*Integral de Bochner*)

Sea (X, μ) un espacio de medida, $(B, \|\cdot\|)$ un espacio de Banach y $f : X \rightarrow B$, son equivalentes:

- $\exists (s_n)$ sucesión de funciones simples integrables que cumplen:

$$\int_X \|f - s_n\| d\mu \rightarrow 0$$

- f es Bochner-medible y

$$\int_X \|f\| d\mu < +\infty$$

Si alguna condición ocurre, decimos que f es Bochner-integrable y definimos su integral como el límite:

$$\int_X f d\mu = \lim_n \int_X s_n d\mu$$

que existe y no depende de la sucesión s_n escogida de la primera condición.

Demostración. Para una implicación:

$$\int_X \|f\| \leq \int_X \|f - s_n\| + \int_X \|s_n\| < +\infty$$

Además sabemos que una subsucesión s_{n_k} converge c.t.p. a f .

¹El conjunto no es vacío pues $0 = \|y_1\| \leq \|f(x)\|$

Para la otra, nos tomamos la sucesión (s_n) de la proposición anterior que son integrables, convergen c.t.p. a f y $\|f - s_n\| \leq 2\|f\|$. Por el teorema de convergencia dominada el límite da 0.

El último límite existe porque la sucesión es de Cauchy:

$$\left\| \int s_n - \int s_m \right\| \leq \int \|s_n - s_m\| \leq \int \|s_n - f\| + \int \|f - s_m\| \xrightarrow{n,m \rightarrow \infty} 0$$

Si \tilde{s}_n fuese otra sucesión con la primera propiedad:

$$\left\| \int s_n - \int \tilde{s}_n \right\| \leq \int \|s_n - s_m\| \leq \int \|s_n - f\| + \int \|f - \tilde{s}_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0$$

□

Definición 1.4. (Integral de Pettis)

Sea (X, μ) un espacio de medida, $(B, \|\cdot\|)$ un espacio de Banach y $f : X \rightarrow B$ Pettis-medible.

Decimos que f es Pettis-integrable si $\phi \circ f \in L^1$ para todo $\phi \in B^*$ y además existe un $v \in B$ tal que:

$$\phi(v) = \int \phi \circ f d\mu, \quad \forall \phi \in B^*$$

Este v si existe es único y es llamado la integral de Pettis de f :

$$\int f d\mu$$

Claramente si f es Bochner-integrable también es Pettis-integrable con la misma integral.

Ambas nociones de integrabilidad coinciden en espacios B de dimensión finita. En el caso de que $B = B(H)$, tenemos dos integrales más útiles.

Definición 1.5. Sea (X, μ) un espacio de medida y H un espacio de Hilbert y $B(H)$ el conjunto de operadores acotados. Sea $V : X \rightarrow B(H)$ una función.

Decimos que V es fuertemente/débilmente medible si para cada $u \in H$:

$$V(\cdot)u : X \rightarrow H$$

es Bochner/Pettis medible.

V es fuertemente/débilmente integrable si para cada u , $V(\cdot)u$ es Bochner/Pettis integrable y:

$$u \mapsto \int_X V(x)u d\mu$$

define un operador acotado al que llamamos la integral fuerte/débil de V y denotamos:

$$\int_X V d\mu$$

Por el teorema de representación de Riesz, V es débilmente integrable si y sólo si hay un $A \in B(H)$ tal que:

$$(Au, v) = \int_X (V(x)u, v) d\mu(x), \quad \forall u, v \in H$$

en cuyo caso A es la integral débil de V :

$$A := \int_X V d\mu$$

Claramente si V es fuertemente integrable entonces V es débilmente integrable y definen la misma integral.

Es importante notar que si $V(\cdot)u$ es medible para todo u y H es separable, entonces V es fuertemente medible.

Damos una condición suficiente de integrabilidad que usaremos con frecuencia.

Proposición 1.6. (*Condición suficiente de integrabilidad*)

Sea H un espacio de Hilbert, (X, μ) un espacio de medida y $V : X \rightarrow B(H)$ una función. Supongamos que $\|V(x)\| \leq M(x)$ con $M \in L^1$ y $V(\cdot)u$ es medible Borel. Entonces:

- V es débilmente integrable.
- Si además H es separable, V es fuertemente integrable.

Demostración. Como $V(\cdot)u$ es medible, también es débilmente medible. Si H es separable entonces $V(\cdot)u$ es Bochner-medible.

Para la primera parte, es evidente que la aplicación:

$$g : H \times H \rightarrow \mathbb{C}$$

$$g(u, v) = \int (V(x)u, v) d\mu(x)$$

Está bien definida, es lineal en la primera componente, antilineal en la segunda y es una acotada:

$$|g(u, v)| \leq C \|u\| \|v\|$$

Luego por el teorema de representación de Riesz, $g(u, v) = (Au, v)$ para un único $A \in B(H)$ y V es débilmente integrable.

Para la segunda parte, $V(\cdot)u$ es Bochner-medible y, por la cota, Bochner-integrable. Además el operador:

$$u \mapsto \int_X V(x)u d\mu(x)$$

es claramente acotado, por lo que V es fuertemente integrable. □

1.2. Grupos unitarios uniparamétricos

Damos algunas nociones básicas sobre representaciones unitarias, las no demostradas se pueden encontrar en [9]. También recomendamos el libro [3]. En todo lo que sigue H es un espacio de Hilbert complejo y $B(H)$ son los operadores acotados.

Definición 1.7. (Operador adjunto)

El adjunto del operador $A : D(A) \rightarrow H$ es el (único) operador A^* :

$$(A^*u, v) = (u, Av), \quad \forall u \in D(A^*), \quad \forall v \in D(A)$$

Donde el dominio maximal $D(A^*)$ es:

$$D(A^*) = \{u \in H \mid \exists C_u > 0, |(u, Av)| \leq C_u \|v\|, \forall v \in D(A)\}$$

Un operador se dice autoadjunto si:

$$D(A) = D(A^*), \quad A^* = A$$

Se dice anti-autoadjunto si:

$$D(A) = D(A^*), \quad A^* = -A$$

Notamos que A es autoadjunto si y sólo si iA es anti-autoadjunto.

Definición 1.8. (Grupos unitario uniparamétricos)

Un grupo unitario uniparamétrico es una función $V : \mathbb{R} \longrightarrow B(H)$ con las propiedades:

$$V(t)V(s) = V(t+s)$$

$$V(t)^* = V(t)^{-1} = V(-t)$$

Y V es continuo con la topología fuerte de operador, es decir la aplicación:

$$V(\cdot)u : \mathbb{R} \longrightarrow H$$

es continua para todo $u \in H$. Como consecuencia, $V(t)$ es débilmente integrable sobre intervalos finitos.

El generador infinitesimal es el operador:

$$Au := \lim_{h \rightarrow 0} \frac{V(h)u - u}{h}$$

Siendo $D(A)$ el subespacio de todos los $u \in H$ para los que el límite existe. Vamos a ver que $D(A)$ es denso.

Si A es el generador infinitesimal de V lo denotamos por:

$$V(t) = e^{tA}$$

Si A es un operador acotado podemos definir la exponencial cómo la serie absolutamente convergente:

$$e^A = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}$$

Y $V(t) = e^{tA}$ define un grupo uniparamétrico, generalmente no unitario, y de hecho es suave.

Proposición 1.9. *Sea $V(t)$ un grupo unitario uniparamétrico, entonces su generador infinitesimal es un único operador A anti-autoadjunto y densamente definido. Además:*

$$V(t)D(A) \subset D(A)$$

$$AV(t)u = \frac{d}{dt}(V(t)u)$$

Todo operador A anti-autoadjunto y densamente definido es el generador infinitesimal de un grupo $V(t)$.

Demostración. Demostramos sólo la existencia de A . Por un lado:

$$\frac{V(t+h)u - V(t)u}{h} = V(t) \frac{V(h)u - u}{h}$$

De donde se deducen las propiedades. Además:

$$\left(v, \frac{V(h) - 1}{h}u\right) = \left(\frac{V(-h) - 1}{h}v, u\right)$$

Y tomando $h \rightarrow 0$, se ve que es anti-autoadjunto:

$$(v, Au) = (-Av, u)$$

Para cada u , tomamos:

$$u_\epsilon = \frac{1}{\epsilon} \int_0^\epsilon V(t)u dt$$

Unos cálculos muestran que:

$$\frac{V(h)u_\epsilon - u_\epsilon}{h} \xrightarrow{h \rightarrow 0} \frac{V(\epsilon)u - u}{\epsilon}$$

$u_\epsilon \in D(A)$ para todo $\epsilon > 0$, pero $u_\epsilon \xrightarrow{\epsilon \rightarrow 0} u$, así $D(A)$ es denso. □

1.3. Representaciones de grupos topológicos

Definición 1.10. Sea G un grupo topológico y H un espacio de Hilbert complejo. Denotamos $U(H) \subseteq B(H)$ el grupo de operadores unitarios:

$$U^* = U^{-1}$$

Una representación unitaria es un homomorfismo de grupos $\pi : G \rightarrow U(H)$ continuo con la topología fuerte de operador.

π se dice fiel si $\ker \pi = \{e\}$. π se dice irreducible si los únicos subespacios cerrados $M \subseteq H$ π -invariantes ($\pi(G)M \subseteq M$) son el trivial y el total.

Una equivalencia entre dos representaciones (π_1, H_1) y (π_2, H_2) es un operador acotado $T : H_1 \rightarrow H_2$ que cumpla:

$$T\pi_1(g) = \pi_2(g)T$$

Dos representaciones son equivalentes si existe una equivalencia no nula, y son unitariamente equivalentes si podemos tomarla unitaria. El conjunto de todas las equivalencias $C(\pi_1, \pi_2)$ forma un espacio vectorial.

Notemos que si $\pi : G \rightarrow U(H)$ es una representación unitaria, para todo vector no nulo $v \in H$ el subespacio cerrado generado por $\pi(G)v$ es π -invariante. Luego si π es irreducible, es todo H :

$$\overline{\text{span}(\pi(G)v)} = H, \quad \forall v \neq 0$$

Queremos dar la idea de la demostración del lema de Schur [2], necesario a continuación. Están basados en el teorema espectral:

Teorema 1.11. (*Teorema espectral*) Sea A un operador acotado y autoadjunto en un espacio de Hilbert H complejo, entonces existe un espacio de medida (X, μ) , una función $\phi \in L^\infty(X)$ y un operador unitario $U : H \rightarrow L^2(X)$:

$$UAU^{-1}\psi(x) = \phi(x)\psi(x), \quad \forall \psi \in L^2$$

Gracias al teorema, para cada f medible y acotada podemos definir el operador $f(A)$ por la ecuación:

$$Uf(A)U^{-1}\psi(x) = f \circ \phi(x)\psi(x), \quad \forall \psi \in L^2$$

Proposición 1.12. (*Lema de Schur I*)

Sea $\pi : G \rightarrow U(H)$ una representación unitaria. π es irreducible si y sólo si $C(\pi, \pi) = \mathbb{C}$.

Demostración. Si M es un subespacio cerrado π -invariante distinto del trivial y el total, M^\perp también lo es por ser π unitaria. Luego la proyección ortogonal P_M también es una equivalencia pero no es un múltiplo de la identidad I .

Si existe $T \in C(\pi, \pi)$ distinto de un múltiplo de la identidad, $\frac{1}{2}(T + T^*)$ o $\frac{i}{2}(T - T^*)$ son equivalencias autoadjuntas y alguno no es un múltiplo de la identidad, llamémosle A .

Por el teorema espectral, tomando $P = \chi_E(A)$ con E algún boreliano de medida finita, P es una proyección y $P\pi(g) = \pi(g)P$. En particular la imagen de P es un subespacio invariante que no es trivial ni total. \square

Proposición 1.13. (*Lema de Schur II*)

Sean (π_1, H_1) y (π_2, H_2) dos representaciones unitarias irreducibles, entonces $C(\pi_1, \pi_2)$ tiene dimensión 0 o 1.

En particular, π_1 y π_2 son equivalentes si y sólo si son unitariamente equivalentes.

Demostración. Si son equivalentes, existe $T \in C(\pi_1, \pi_2)$ $T \neq 0$, $T^*T \in C(\pi_1, \pi_1)$, $TT^* \in C(\pi_2, \pi_2)$. Por el primer lema, $T^*T = cI$, $TT^* = \lambda I$ y con $c, \lambda > 0$, luego $U = \sqrt{c}T$ es isométrico y biyectivo luego unitario.

Además, dados $T, U \in C(\pi_1, \pi_2)$ y U unitario, $U^{-1}T \in C(\pi_1, \pi_1)$, luego $U^{-1}T = cI$, de donde $C(\pi_1, \pi_2) = \{cU \mid c \in \mathbb{C}\}$. \square

Si un elemento $g \in G$ cumple que $\pi(g)\pi(h) = \pi(h)\pi(g)$ para todo $h \in G$, entonces $\pi(g) = e^{i\theta}I$ por el primer lema. En particular toda representación unitaria irreducible de un grupo abeliano es una representación del tipo:

$$\pi(x) = e^{i2\pi\lambda(x)}, \quad H = \mathbb{C}$$

para una función continua que cumpla $\lambda(xy) = \lambda(x) + \lambda(y)$ módulo una constante entera.

Definición 1.14. (Representación integral)

Dado un grupo topológico G con medida de Haar μ ($\mu(hA) = \mu(A)$ para todo A medible y para todo $h \in G$) y una representación unitaria $\pi : G \rightarrow U(H)$ definimos la función:

$$\begin{aligned} \pi : L^1(G) &\rightarrow B(H) \\ \pi(f) &= \int_G f(x)\pi(x)d\mu(x) \end{aligned}$$

La integral está bien definida en sentido débil y además:

$$\|\pi(f)\| \leq \|f\|_{L^1}$$

Notemos que si definimos la convolución de dos funciones de $L^1(G)$:

$$f * g(x) := \int_G f(y)g(y^{-1}x)d\mu(y)$$

Entonces, aplicando Fubini y la invarianza de la medida por la izquierda:

$$\begin{aligned} \pi(f)\pi(g) &= \left(\int_G f(y)\pi(y)d\mu(y) \right) \left(\int_G g(x)\pi(x)d\mu(x) \right) \\ &= \int_G \left(\int_G f(y)g(x)\pi(yx)d\mu(x) \right) d\mu(y) = \int_G \left(\int_G f(y)g(y^{-1}x)\pi(x)d\mu(x) \right) d\mu(y) \\ &= \int_G \left(\int_G f(y)g(y^{-1}x)d\mu(y) \right) \pi(x)d\mu(x) = \pi(f * g) \end{aligned}$$

En general, la convolución no es una operación conmutativa.

Nota: Todo grupo topológico localmente compacto Hausdorff G tiene una única medida de Radon invariante a izquierdas [3], llamada medida de Haar.

Si μ es una medida de Haar, también lo es la medida $\nu(A) := \mu(Ag^{-1})$. Luego $\nu = \Delta(g)\mu$ para cierta constante $\Delta(g) \in (0, \infty)$. Los cálculos llevan a que:

$$\Delta(gh)\mu(A) = \mu(A(gh)^{-1}) = \mu(Ah^{-1}g^{-1}) = \Delta(g)\Delta(h)\mu(A)$$

Es decir que la función:

$$\begin{aligned} \Delta : G &\longrightarrow \mathbb{R}^+ \\ \Delta(gh) &= \Delta(g)\Delta(h) \end{aligned}$$

define un homomorfismo de grupos, llamada la función modular. Se cumple que para toda función $f \geq 0$ medible:

$$\int_G f(x^{-1})d\mu(x) = \int_G f(x)\Delta(x)d\mu(x)$$

Un grupo se dice unimodular si su medida de Haar es bi-invariante o equivalentemente $\Delta \equiv 1$.

Aunque no lo vayamos a usar, por completitud, hemos preferido mencionar estos aspectos para el que desconozca el análisis en grupos.

1.4. Grupo de Heisenberg

A partir de aquí la referencia principal es el libro de Folland [2].

En \mathbb{R}^{2n+1} definimos el corchete de Lie:

$$[(p, q, t), (p', q', t)] = (0, 0, p \cdot q' - q \cdot p')$$

Definimos el álgebra de Heisenberg como $\mathfrak{h}_n = (\mathbb{R}^{2n+1}, [\cdot, \cdot])$. La base canónica representada por P_i, Q_i, T cumple las relaciones:

$$[P_i, P_j] = [Q_i, Q_j] = [P_i, T] = [Q_i, T] = 0$$

$$[P_i, Q_j] = T\delta_{ij}$$

El grupo de Heisenberg H_n es el grupo de Lie simplemente conexo cuya álgebra de Lie es \mathfrak{h}_n . Vamos a dar un cálculo explícito como un grupo de matrices.

Notemos que la matriz $(n+2) \times (n+2)$:

$$m(p, q, t) = \begin{pmatrix} 0 & p & t \\ 0 & 0_{n \times n} & q \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Es una representación del álgebra de Heisenberg pues:

$$m(p, q, t)m(p', q', t') = m(0, 0, p \cdot q')$$

$$[m(p, q, t), m(p', q', t')] = m([(p, q, t), (p', q', t')])$$

Además $m(p, q, t)^2 = m(0, 0, p \cdot q)$ y $m(p, q, t)^k = 0$ para $k \geq 0$, así:

$$e^{m(p, q, t)} = I + m(p, q, t) + \frac{1}{2}m(0, 0, p \cdot q) = \begin{pmatrix} 1 & p & t + \frac{p \cdot q}{2} \\ 0 & \mathbb{I}_n & q \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Además:

$$\exp(m(p, q, t)) \exp(m(p', q', t')) = \exp(m(p + p', q + q', t + t' + \frac{1}{2}(p \cdot q' - q \cdot p')))$$

Luego el grupo de Heisenberg es H_n isomorfo a $(\mathbb{R}^{2n+1}, \cdot)$ con el producto:

$$(p, q, t) \cdot (p', q', t') := (p + p', q + q', t + t' + \frac{1}{2}(p \cdot q' - q \cdot p'))$$

$$(p, q, t)^{-1} = (-p, -q - t)$$

Por comodidad, definimos el producto simpléctico en \mathbb{R}^{2n} :

$$[(p, q), (p', q')] = p \cdot q' - q \cdot p'$$

El grupo de Heisenberg reducido es el cociente $H_n^{\text{red}} := H_n/\mathbb{Z}$ por el subgrupo normal $\mathbb{Z} = \{(0, 0, m) \in H_n \mid m \in \mathbb{Z}\} \trianglelefteq H_n$. Los centros de ambos grupos son los elementos de la forma $(0, 0, t)$, $t \in \mathbb{R}$.

La medida de Lebesgue en \mathbb{R}^{2n+1} es bi-invariante con el producto pues:

$$(p, q, t) \mapsto (a, b, c)(p, q, t) = (p + a, q + c, t + c + \frac{1}{2}[(a, b), (p, q)])$$

$$(p, q, t) \mapsto (p, q, t)(a, b, c) = (p + a, q + c, t + c + \frac{1}{2}[(p, q), (a, b)])$$

son cambios de coordenadas cuya jacobiana tiene determinante 1. Así, H_n y H_n^{red} son grupos unimodulares.

1.5. Representación de Schrödinger

En el espacio de Hilbert separable $H = L^2(\mathbb{R}^n)$, tomamos los operadores auto-adjuntos definidos en la clase de Schwarz $\mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$:

$$\begin{aligned} X_j \psi(x) &= x_j \psi(x) \\ D_j \psi(x) &= \frac{1}{2\pi i} \frac{\partial \psi}{\partial x_j}(x) \\ I \psi(x) &= \psi(x) \end{aligned}$$

Cumplen que:

$$\begin{aligned} [X_i, X_j] &= [D_i, D_j] = [D_i, I] = [X_i, I] = 0 \\ [D_i, X_j] &= \frac{\delta_{ij}}{2\pi i} I \end{aligned}$$

Así, para cada $h \in \mathbb{R}$ tenemos el isomorfismo de álgebras de Lie:

$$d\rho_h(p, q, t) = 2\pi i(phD + qX + thI)$$

Nos preguntamos si la exponencial define una representación unitaria:

$$\rho_h(p, q, t) = \exp(2\pi i(phD + qX + thI))$$

Para ello veamos como actúa sobre funciones $f \in L^2$. Definimos:

$$\begin{aligned} \rho(p, q, t) &:= \exp(2\pi i(pD + qX + tI)) \\ \rho_h(p, q, t) &= \rho(hp, q, ht) \end{aligned}$$

Lema 1.15. *Para toda $u \in L^2$,*

$$\rho(p, q, t)u(x) = e^{2\pi i t} e^{2\pi i q \cdot x + \pi i p \cdot q} u(x + p)$$

En particular ρ es una representación unitaria del grupo de Heisenberg pues:

$$\rho(p, q, t)\rho(p', q', t') = \rho(p + p', q + q', t + t' + \frac{1}{2}[(p, q), (p', q')]) = \rho((p, q, t)(p', q', t'))$$

Demostración. Sea $A = 2\pi i(pD + qX + tI)$ y $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$, definimos:

$$g(x, s) = e^{sA}u(x)$$

Queremos evaluar $g(x, 1)$. Derivando respecto a s , obtenemos la ecuación diferencial:

$$\begin{aligned} \frac{\partial g}{\partial s} &= Ag = 2\pi i(q \cdot x + t)g + p \cdot \nabla_x g \\ \frac{\partial g}{\partial s} - p \cdot \nabla_x g &= 2\pi i(q \cdot x + t)g \\ g(x, 0) &= u(x) \end{aligned}$$

Su solución es de la forma:

$$g(x, s) = e^{2\pi i s t} e^{2\pi i s q \cdot x + \pi i s^2 p \cdot q} u(x + ps)$$

Finalmente:

$$\rho(p, q, t)u(x) = g(x, 1) = e^{2\pi i t} e^{2\pi i q \cdot x + \pi i p \cdot q} u(x + p)$$

□

Así $\rho : H_n \longrightarrow U(L^2(\mathbb{R}^n))$ es una representación unitaria, además:

$$\rho(p, q, t) = \rho(p, q)e^{2\pi it}$$

$$\rho(p, q) := \rho(p, q, 0)$$

y $\ker \rho = \mathbb{Z}$. Esta es llamada la representación de Schrödinger, veremos que es irreducible y en cierto modo única.

Notemos que ρ_h y $\rho_{h'}$ no son equivalentes para $h \neq h'$, pues si lo fuesen:

$$e^{2\pi iht} = U^{-1}e^{2\pi i h' t}U = e^{2\pi i h' t}$$

$$h = h'$$

1.5.1. Representación integral

La representación integral en el grupo de Heisenberg reducido H_n^{red} viene dada por la integral (que ahora sí existe en el sentido fuerte):

$$\rho : L^1(H_n^{red}) \longrightarrow B(L^2(\mathbb{R}^n))$$

$$\rho(F) = \int_{\mathbb{R}^{2n} \times [0,1]} F(p, q, t) \rho(p, q, t) dpdqdt$$

Dada $F \in L^1(H_n^{red})$, la podemos desarrollar por una suma Cesàro:

$$F(p, q, t) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} F_n(p, q) e^{2\pi i n t}$$

Se puede justificar que la suma Cesàro saldría de la integral, lo interesante es que suponiendo esto:

$$\rho(F) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \int_{\mathbb{R}^{2n} \times [0,1]} F_n(p, q) \rho(p, q) e^{2\pi i (n+1)t} dpdqdt = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F_{-1}(p, q) \rho(p, q) dpdq$$

Así podemos definir la transformada de Weyl:

$$\rho : L^1(\mathbb{R}^{2n}) \longrightarrow B(L^2(\mathbb{R}))$$

$$\rho(F) := \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q) \rho(p, q) dpdq$$

Actúa sobre funciones $f \in L^2$:

$$\begin{aligned} \rho(F)f(x) &:= \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q) \rho(p, q) f(x) dpdq = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q) e^{2\pi i q \cdot x + \pi i p \cdot q} f(x + p) dpdq \\ &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(y - x, q) e^{\pi i q \cdot (x+y)} f(y) dydq = \int_{\mathbb{R}^n} k_F(x, y) f(y) dy \\ k_F(x, y) &:= \int_{\mathbb{R}^n} F(y - x, q) e^{\pi i q \cdot (x+y)} dq = \mathcal{F}_2^{-1} F \left(y - x, \frac{x + y}{2} \right) \end{aligned}$$

Donde \mathcal{F}_2 indica la transformada de Fourier en la segunda variable.

Un operador acotado $T \in B(H)$ se dice Hilbert-Schmidt si $\sum_{\alpha} \|Tu_{\alpha}\|^2 < +\infty$ para cierta base ortonormal. El espacio de operadores Hilbert-Schmidt $B_{HS}(H)$ es un espacio de Hilbert con el producto escalar $(T, S)_{HS} := \sum_{\alpha} (Su_{\alpha}, Tu_{\alpha})$ (que no depende de la base elegida). Además $\|T\| \leq \|T\|_{HS}$.

En el caso de $H = L^2(\mathbb{R}^n)$, hay una correspondencia biyectiva e isométrica entre operadores integrales y de Hilbert-Schmidt [6].

Estos cálculos muestran lo siguiente:

Proposición 1.16. *La función:*

$$\rho : L^1(\mathbb{R}^n) \longrightarrow B(L^2(\mathbb{R}^n))$$

es inyectiva en L^1 y se puede extender a L^2 :

$$\rho : L^2(\mathbb{R}^n) \longrightarrow B_{HS}(L^2(\mathbb{R}^n))$$

siendo esta función biyectiva, además:

$$\|\rho(F)\| \leq \|F\|_1, \quad \forall F \in L^1$$

$$\|\rho(F)\|_{HS} = \|F\|_2, \quad \forall F \in L^2$$

Demostración. Para L^1 es obvio que:

$$\|\rho(F)u\| = \left\| \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q) \rho(p, q) u dpdq \right\| \leq \int_{\mathbb{R}^{2n}} |F(p, q)| dpdq \|u\|$$

Por otro lado si $\rho(F) = 0$:

$$0 = \langle \rho(a, b) \rho(F) \rho(-a, -b) u, v \rangle = \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{2\pi i[(a, b), (p, q)]} F(p, q) \langle \rho(p, q) u, v \rangle dpdq$$

Y como la transformada de Fourier es inyectiva en L^1 :

$$F(p, q) \langle \rho(p, q) u, v \rangle = 0$$

para todo u, v , luego $F(p, q) = 0$.

Si $F \in L^1 \cap L^2$, notemos que la aplicación de L^2 :

$$F \mapsto k_F$$

Es un cambio de variable isométrico, seguido de una transformada de Fourier en la segunda variable, también biyectivo e isométrico. Pero además:

$$\|\rho(F)\|_{HS} = \|k_F\|_2$$

De donde por aproximación además podemos definir ρ para toda $F \in L^2$, cumpliendo la igualdad requerida. \square

Definición 1.17. Convolución «natural»

Dadas $F, G \in L^1(\mathbb{R}^{2n})$, definimos la operación:

$$F \natural G(p, q) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p', q') G(p - p', q - q') e^{\pi i[(p', q'), (p, q)]} dp' dq'$$

Tomando $F^0(p, q, t) := F(p, q)e^{-2\pi it} \in L^1(H_n^{red})$, se cumple que:

$$\rho(F^0) = \rho(F)$$

Y además:

$$\begin{aligned} F^0 * G^0(p, q, t) &= \int_{\mathbb{R}^{2n} \times [0,1]} F(p', q') e^{-2\pi it'} G(p-p', q-q') e^{-2\pi i(t-t')} e^{\pi i[(p', q'), (p, q)]} dp' dq' dt' \\ &= (F \natural G)^0(p, q, t) \end{aligned}$$

En particular:

$$\rho(F \natural G) = \rho((F \natural G)^0) = \rho(F^0 * G^0) = \rho(F^0)\rho(G^0) = \rho(F)\rho(G)$$

Como con la convolución normal, si $p, q, r \in [1, \infty]$ cumpliendo $\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = \frac{1}{r} + 1$, $F \in L^p$ y $G \in L^q$, la integral está bien definida y:

$$\|F \natural G\|_r \leq \|F\|_p \|G\|_q$$

Además si $F, G \in L^2$ entonces:

$$\|F \natural G\|_2 = \|\rho(F \natural G)\|_{HS} \leq \|\rho(F)\|_{HS} \|\rho(G)\|_{HS} = \|F\|_2 \|G\|_2$$

1.6. El teorema de Stone-Von Neumann

Proposición 1.18. *Para todo $h \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ la representación ρ_h es irreducible.*

Teorema 1.19. *Teorema de Stone-Von Neumann*

Sea π un representación unitaria del grupo de Heisenberg H_n en un espacio de Hilbert H complejo. Supongamos que $\pi(0, 0, t) = e^{2\pi iht}$ para un $h \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, entonces $H = \bigoplus_{\alpha} H_{\alpha}$ donde los H_{α} son ortogonales, $\pi|_{H_{\alpha}}$ son unitariamente equivalentes a ρ_h .

En particular, si π es irreducible, es equivalente a ρ_h .

Teorema 1.20. *Sea π es una representación unitaria e irreducible del grupo de Heisenberg en un espacio de Hilbert complejo H . Entonces, o bien es unitariamente equivalente a algún ρ_h para un único $h \neq 0$, o bien a:*

$$\sigma_{ab}(p, q, t) = e^{2\pi i(ap+bq)}, \quad H = \mathbb{C}$$

Vamos a demostrar estos teoremas. Para ello hemos de introducir la transformada de Fourier-Wigner:

Definición 1.21. La transformada de Fourier-Wigner es el operador bilineal:

$$V(f, g)(p, q) := (\rho(p, q)f, g) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{2\pi iqx + \pi ipq} f(x+p) \overline{g(x)} dx = \int_{\mathbb{R}^n} e^{2\pi ixy} f(y + \frac{1}{2}p) \overline{g(y - \frac{1}{2}p)} dy$$

$$\|V(f, g)\|_{\infty} \leq \|f\|_2 \|g\|_2$$

Por otra parte, como $L^2(\mathbb{R}^n) \otimes L^2(\mathbb{R}^n)$ es naturalmente isométrico a $L^2(\mathbb{R}^{2n})$, definimos la aplicación:

$$\tilde{V}(F) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{2\pi i q y} F(y + \frac{1}{2}p, y - \frac{1}{2}p) dy$$

$$\tilde{V}(f \otimes \bar{g}) = V(f, g)$$

\tilde{V} es un cambio de variable isométrico seguido de una transformada de Fourier parcial, luego es una isometría y:

$$\|V(f, g)\|_2 = \|\tilde{V}(f \otimes \bar{g})\| = \|f \otimes \bar{g}\| = \|f\|_2 \|g\|_2$$

También tiene la utilidad de que:

$$(\rho(F)f, g) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q) (\rho(p, q)f, g) dpdq = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q) V(f, g)(p, q) dpdq$$

Demostración. (Proposición 1.18)

Supongamos que $M \subset L^2(\mathbb{R}^n)$ es un subespacio cerrado ρ_h -invariante no nulo, y sea $f \in M$ una función no nula. Si $g \in M^\perp$ entonces $g \perp \rho_h(p, q)f = \rho(hp, q)f$ y para todo $p, q \in \mathbb{R}^n$. Luego $V(f, g) = 0$ y $\|f\|_2 \|g\|_2 = \|V(f, g)\| = 0$, de donde $g = 0$.

Es decir que $M^\perp = \{0\}$, luego $M = L^2(\mathbb{R}^n)$. \square

Para el teorema nos basamos en unos cálculos no muy complicados que se pueden encontrar en [2].

Lema 1.22. *Sea ϕ la Gaussiana:*

$$\phi(x) := 2^{n/4} e^{-\pi x^2}$$

Entonces:

$$\begin{aligned} \phi^{ab}(x) &:= \rho(a, b)\phi(x) = 2^{n/4} e^{2\pi i b x + \pi i a b} e^{-\pi(x+a)^2} \\ \Phi^{ab}(p, q) &:= (\phi^{pq}, \phi^{ab}) = e^{\pi i (bp - aq)} e^{-\pi/2((p-a)^2 + (q-b)^2)} \\ \Phi \nmid \Phi^{ab} &= e^{-\pi/2(a^2 + b^2)} \Phi \end{aligned}$$

Demostración de teorema de Stone-Von Neumann: Veámoslo para $h = 1$, el resto es análogo.

La idea consiste en tomar las funciones Gaussianas:

$$\phi(x) = 2^{n/4} e^{-\pi x^2}$$

$$\phi^{ab}(x) := \rho(a, b)\phi(x)$$

Como las funciones $\phi^{ab}(x)$ generan todo $L^2(\mathbb{R})$, buscamos funciones $v^{ab} = \pi(a, b)v \in H_\alpha$ que generen todo H_α tal que la aplicación:

$$v^{ab} \mapsto \phi^{ab}$$

sea una isometría, y por lo tanto extienda a una equivalencia unitaria.

Dada una representación π , definimos:

$$\pi(p, q) := \pi(p, q, 0)$$

$$\pi(p, q, t) = \pi(p, q)e^{i2\pi t}$$

definimos su representación integral para funciones $F \in L^1$:

$$\pi(F) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(p, q)\pi(p, q)dpdq$$

Se sigue cumpliendo:

$$\begin{aligned}\pi(F \natural G) &= \pi(F)\pi(G) \\ \pi(F)^* &= \pi(G), \quad G(p, q) = \overline{F(-p, -q)} \\ \pi(F)\pi(a, b) &= \pi(G), \quad G(p, q) = e^{\pi i(aq-bp)}F(p-a, q-b) \\ \pi(a, b)\pi(F) &= \pi(G), \quad G(p, q) = e^{\pi i(bp-aq)}F(p-a, q-b)\end{aligned}$$

Y similarmente a la demostración de la representación integral ρ es inyectiva, π también lo es.

Observamos que:

$$\pi(\Phi)\pi(a, b)\pi(\Phi) = \pi(\Phi \natural \Phi^{ab}) = e^{-\pi/2(a^2+b^2)}\pi(\Phi)$$

En particular $\pi(\Phi)^2 = \pi(\Phi)$, y como $\pi(\Phi)$ es autoadjunto, $\pi(\Phi)$ es una proyección ortogonal no nula. Tomemos la imagen $R = \pi(\Phi)H$. Tenemos que:

$$\begin{aligned}(\pi(p, q)\pi(\Phi)u, \pi(a, b)\pi(\Phi)v) &= e^{\pi i(ps-qr)}(\pi(\Phi)\pi(p-a, q-b)\pi(\Phi)u, v) \\ &= e^{\pi i(ps-qr)}e^{-\pi/2((p-a)^2+(q-b)^2)}(u, v)\end{aligned}$$

Tomemos una base ortonormal v_α de R , y definimos H_α como el subespacio cerrado generado por $\{\pi(p, q)v_\alpha \mid p, q \in \mathbb{R}^n\}$. Entonces los H_α son ortogonales y π -invariantes e irreducibles.

Queremos ver que $N = (\bigoplus_\alpha H_\alpha)^\perp$ es vacío, que por construcción es π -invariante y $\pi(\Phi)|_N = 0$. Pero si fuese distinto del vacío, el mismo razonamiento lleva a que $\pi(\Phi)|_N \neq 0$.

Ahora veamos que cada $\pi|_{H_\alpha}$ equivale a ρ . Tomamos $v^{pq} = \pi(p, q)\pi(\Phi)v_\alpha$, entonces:

$$(v^{pq}, v^{rs}) = e^{\pi i(ps-qr)}e^{-\pi/2((p-a)^2+(q-b)^2)} = (\phi^{pq}, \phi^{rs})$$

Luego la aplicación que manda:

$$v^{pq} \mapsto \phi^{pq}$$

extiende a una equivalencia unitaria entre ρ y $\pi|_{H_\alpha}$. □

Demostración. (Demo 1.20) Por el lema de Schur:

$$\pi(0, 0, t) = e^{i2\pi ht} I$$

Para alguna constante $h \in \mathbb{R}$. Si $h \neq 0$ el teorema de Stone-Von Neumann dice que es equivalente a ρ_h .

Si $h = 0$, notamos que $\pi(p, q, t)\pi(p', q', t') = \pi(p', q', t')\pi(p, q, t)$, y por el lema de Schur, π es equivalente a σ_{ab} . □

Capítulo 2

Cuantización de Weyl y operadores pseudo-diferenciales

Sea O el conjunto de operadores densamente definidos en $L^2(\mathbb{R}^n)$ y A un subanillo de funciones medibles definidas en \mathbb{R}^{2n} . Buscamos una aplicación $Q : A \rightarrow O$ que cumpla:

$$Q(\lambda f + \mu g) = \lambda Q(f) + \mu Q(g)$$
$$Q(1) = I, \quad Q(x_j) := X_j, \quad Q(p_j) = P_j := \frac{h}{2\pi i} \frac{\partial}{\partial x_j}$$

Para toda $\phi : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ medible podemos definir el operador $\phi(A)$ por el teorema espectral. Nos gustaría que:

$$Q(\phi \circ f) = \phi \circ Q(f)$$

Y además:

$$Q(\{f, g\}) = \frac{h}{2\pi i} [Q(f), Q(g)]$$

Donde el corchete de dos funciones se define:

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

Esta aplicación es imposible para un anillo suficientemente grande A . Si se dan las 2 primeras condiciones y $Q(fg) = Q(f)Q(g)$, se puede deducir que:

$$Q(fg) = \frac{Q(f)Q(g) + Q(g)Q(f)}{2}$$

Sustituyendo $f = x_1$, $g = p_1$ nos queda:

$$Q(x_1 p_1) = \frac{X_1 P_1 + P_1 X_1}{2}$$

Elevando al cuadrado:

$$Q(x_1^2 p_1^2) = \frac{(X_1 P_1 + P_1 X_1)^2}{4} = -\frac{h^2}{4\pi^2} (x_1^2 \partial_1^2 - 2x_1 \partial_1 + \frac{1}{4})$$

$$Q(x_1^2 p_1^2) = \frac{(X_1^2 P_1^2 + P_1^2 X_1^2)}{2} = -\frac{h^2}{4\pi^2} (x_1^2 \partial_1^2 - 2x_1 \partial_1 + 1)$$

La cuarta condición también es contradictoria, se puede encontrar en [2].

2.1. Cuantización de Weyl

La idea de Weyl es la siguiente, «toda» función $F(\xi, x)$ se puede representar como una combinación de exponenciales $e^{i2\pi(a\xi+bx)}$, asignamos a cada una de éstas el operador $e^{i2\pi(aD+bX)}$. Así a la función:

$$F(\xi, x) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{F}(p, q) e^{i2\pi(p\xi+qx)} dpdq$$

Le corresponderá el operador:

$$F(D, X) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{F}(p, q) e^{i2\pi(pD+qX)} dpdq = \rho(\hat{F})$$

Que representaremos también por $Q(F)$.

La integral tiene sentido cuando $\hat{F} \in L^1$, pero también está definida para el caso L^2 y tenemos que:

$$Q : L^2(\mathbb{R}^{2n}) \longrightarrow B_{HS}(L^2(\mathbb{R}^n))$$

es un isomorfismo isométrico.

Notemos que:

$$Q(F)Q(G) = \rho(\hat{F})\rho(\hat{G}) = \rho(\hat{F} \natural \hat{G})$$

Así, para $F, G \in L^2$, definimos la convolución sostenida:

$$F \natural G = (\hat{F} \natural \hat{G})^\vee$$

$$\|F \natural G\|_2 \leq \|F\|_2 \|G\|_2$$

$$Q(F \natural G) = Q(F)Q(G)$$

Otra aplicación interesante es la transformada de Wigner:

$$(Q(F)f, g) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{F}(p, q) (\rho(p, q)f, g) dpdq = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(\xi, x) W(f, g)(\xi, x) d\xi dx$$

$$W(f, g)(\xi, x) := (\rho(\cdot, \cdot)f, g)^\vee(\xi, x) = V(f, g)^\vee(\xi, x)$$

Y cumple que:

$$\|W(f, g)\|_2 = \|V(f, g)\|_2 = \|f\|_2 \|g\|_2$$

En vista de los muchos cálculos que se realizan en mecánica cuántica si $\|f\|_2 = 1$, f representa un estado. La esperanza de un operador F vendría dado por:

$$(Q(F)f, f) = \int_{\mathbb{R}^{2n}} F(\xi, x) W(f, f)(\xi, x) d\xi dx$$

En vistas de la integral $Wf := W(f, f)$ es llamada la cuasi-distribución de probabilidad del estado f . Nombramos algunas propiedades sin demostración [2] que justifican esta interpretación:

$$\overline{W(g, f)} = W(f, g), \quad Wf(\xi, x) \in \mathbb{R}$$

$$\int_{\mathbb{R}^n} Wf(\xi, x) d\xi = |f(x)|^2, \quad \int_{\mathbb{R}^n} Wf(\xi, x) dx = |\hat{f}(\xi)|^2$$

$$\|Wf\|_\infty \leq \|f\|_2^2, \quad \left| \int_E Wf \right| \leq \|f\|_2^2 \mu(E)$$

$$\int_{\mathbb{R}^{2n}} W(f, g) = \|f\|_2^2$$

De las últimas dos desigualdades vemos que no se puede concentrar toda la masa de Wf en regiones $\mu(E) < 1$. Esto es otra forma de ver el principio de incertidumbre. Por otro lado, Wf puede tomar valores negativos. Por otro lado $\rho(a, b)$ o más concretamente $\rho'(a, b) := \rho(-b, a)$ corresponde a una traslación:

$$W(\rho'(a, b)f, \rho'(a, b)g)(\xi, x) = W(f, g)(\xi - a, x - b)$$

En [2] se puede ver como extender Q a funciones más generales como polinomios, cumpliendo la segunda condición de cuantización.

2.2. Operadores pseudo-diferenciales

Nombramos la relación de la cuantización con los operadores pseudo-diferenciales, para los interesados recomendamos los libros de [2] y [7]. Consideremos una función de la clase de Schwarz $f \in S(\mathbb{R}^n)$ y un operador de la forma:

$$Lf = \sum_{|\alpha| \leq n} a_\alpha(x) D^\alpha f$$

$$D^\alpha := \frac{1}{(2\pi i)^{|\alpha|}} \frac{\partial}{\partial x^\alpha}$$

Usando la transformada de Fourier, podemos escribir:

$$f(x) = \int_{\mathbb{R}^n} \hat{f}(\xi) e^{2\pi i \xi x} d\xi$$

$$Lf = \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{|\alpha| \leq n} a_\alpha(x) \widehat{(D^\alpha f)}(\xi) e^{2\pi i x \xi} d\xi = \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{|\alpha| \leq n} a_\alpha(x) \xi^\alpha \hat{f}(\xi) e^{2\pi i x \xi} d\xi$$

Así pues, dada una función $a(\xi, x)$ definimos el operador pseudo-diferencial:

$$T_a f = \int_{\mathbb{R}^n} a(\xi, x) \hat{f}(\xi) e^{2\pi i x \xi} d\xi$$

Que podemos escribir formalmente como:

$$T_a f = \int_{\mathbb{R}^{2n}} a(\xi, x) e^{2\pi i \xi(x-y)} f(y) dy d\xi = \int_{\mathbb{R}^n} k(x, y) f(y) dy$$

Cuyo núcleo es:

$$k(x, y) = \int_{\mathbb{R}^n} a(\xi, x) e^{2\pi i \xi(x-y)} d\xi = \mathcal{F}_1 a(y - x, x)$$

Por lo que si $a \in L^2(\mathbb{R}^{2n})$, $T_a \in B_{HS}(L^2(\mathbb{R}^n))$ y esta correspondencia es biyectiva e isométrica:

$$\|T_a\|_{HS} = \|a\|_2$$

Es muy parecido al núcleo integral para la expresión de Q :

$$k_{Q(a)}(x, y) = \mathcal{F}_2^{-1} \hat{a}(y - x, \frac{x + y}{2}) = \mathcal{F}_1 a \left(y - x, \frac{x + y}{2} \right)$$

$$Q(a)f = \int_{\mathbb{R}^{2n}} e^{i2\pi\xi(x-y)} a \left(\xi, \frac{x + y}{2} \right) f(y) d\xi dy$$

De hecho, la diferencia consiste en que T_a «deriva primero y multiplica después»:

$$\begin{aligned} T_a f(x) &= \int_{\mathbb{R}^{2n}} a(\xi, x) e^{-2\pi i \xi p} f(x + p) dp d\xi = \int_{\mathbb{R}^{2n}} \hat{a}(p, q) e^{2\pi i q x} f(x + p) dp dq \\ &= \int_{\mathbb{R}^n} \hat{a}(p, q) (e^{2\pi i q X} e^{2\pi i p D} f)(x) dp dq \end{aligned}$$

Queremos extender este operador a una clase más amplia, como el polinomio L anterior. Terminamos con la proposición:

Proposición 2.1. *Sea $a \in C^\infty(\mathbb{R}^{2n})$. Supongamos que existe $m \in \mathbb{R}$ tal que para todo multiíndice α, β existe $A_{\alpha, \beta} > 0$ tal que:*

$$|\partial_x^\beta \partial_\xi^\alpha a(\xi, x)| \leq A_{\alpha, \beta} (1 + |\xi|)^{m - |\alpha|}$$

Entonces para todo $f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$ la integral:

$$T_a f = \int_{\mathbb{R}^n} a(\xi, x) \hat{f}(\xi) e^{2\pi i x \xi} d\xi$$

converge absolutamente (y existe) y $T_a f \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^n)$

Demostración. Por las hipótesis tenemos la cota:

$$|\partial_\xi^\beta a(\xi, x)| |\partial^\alpha \hat{f}(\xi)| \leq A(1 + |\xi|)^m \hat{f}(\xi) \in L^1$$

en particular la integral converge absolutamente.

Como $(1 - \Delta_\xi) e^{i2\pi\xi x} = (1 + 4\pi^2|x|^2) e^{i2\pi\xi x}$. Llamamos al operador:

$$L_\xi = (1 + 4\pi^2|x|^2)^{-1} (1 - \Delta_\xi)$$

$$L_\xi^N e^{i2\pi\xi x} = e^{i2\pi\xi x}$$

Luego integrando por partes:

$$T_a f = \int_{\mathbb{R}^n} L_\xi^N (a(\xi, x) \hat{f}(\xi)) e^{2\pi i x \xi} d\xi$$

De donde pasando $(1 + 4\pi|x|^2)^N$ al otro miembro y teniendo en cuenta la acotación que ya teníamos, $T_a f$ es de la clase de Schwarz. □

Este es el caso de polinomios:

$$a(\xi, x) = \sum_{|\alpha| \leq n} a_\alpha(x) \xi^\alpha$$

Con $a_\alpha(x) \in C^\infty$ y ellas y todas sus derivadas acotadas.

Apéndice A

Introducción a la mecánica cuántica

Este apéndice pretende ser una breve introducción a la mecánica cuántica, llegando a mostrar la relación existente con el análisis funcional y abstracto. Para el lector interesado sobre más aspectos físicos, recomiendo el libro de Landau [5] y para aspectos más matemáticos el libro de Folland [2].

A.1. Planck, Einstein y De Broglie

A finales de siglo XIX parecía que la física estaba a punto de ser concluida: Newton había formulado sus leyes del movimiento, incluyendo las leyes de la gravedad, en 1687; Maxwell había descrito publicada sus ecuaciones sobre los fenómenos electromagnéticos en 1862; y también parecía estar a punto de comprenderse las leyes de la termodinámica.

Max Planck afrontó un problema que mezclaba el electromagnetismo con la termodinámica. Todo cuerpo caliente emite energía en forma de radiación electromagnética, el problema era dar con la fórmula que modelaba este fenómeno en cuerpos ideales llamados cuerpos negros. Consiguió dar una fórmula que se ajustaba a los datos, introduciendo una misteriosa constante $h \approx 6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}$. Él esperaba que su fórmula se derivase de las leyes de la termodinámica y del electromagnetismo, pero no fue así, sino que contradecía estas leyes: se derivó una fórmula teórica que contradecía los datos.

En 1905, Albert Einstein llevó una de las hipótesis de Planck hasta sus últimas consecuencias. Planck, al derivar su ley, pensaba que la energía lumínica sólo tomaba un número discreto de valores, y fue lo que llevó a Einstein al descubrimiento del fotón y el efecto foto eléctrico. Según Einstein la luz se dividía en partículas llamadas fotones, la energía de un fotón sería $E = h\nu$ donde ν es su frecuencia. Así, si un electrón necesita energía W para ser extraído y se le incide un fotón con suficiente frecuencia ν , la energía cinética del electrón después de la absorción del fotón será $E_c = h\nu - W \geq 0$.

Pero espera, ¿la luz es una onda, una partícula o ambas a la vez? Para añadir más leña al fuego, el físico Louis de Broglie pensó, ¿y por qué los electrones no pueden ser también ondas? 6 años después se observó la primera difracción de electrones.

En relatividad es conocida la ecuación¹ $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$, que para una partícula sin masa sería $E = pc$, siendo c la velocidad de la luz. Así para un fotón $p = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\lambda}$

¹Aquí m y todas las masas que sigan serán masas «en reposo». Una interpretación de la relatividad es que la masa aumenta con la velocidad, pero no parece ser estándar en la física actual.

donde $\lambda = \nu/c$, es la longitud de onda. De Broglie propuso que para un electrón se seguía cumpliendo que $p = \frac{h}{\lambda}$ y $E = h\nu$.

A.2. La ecuación de Schrödinger

Si los electrones son ondas, ¿qué ecuación siguen? Parece que esta misma pregunta fue formulada en una conferencia de Schrödinger sobre la hipótesis de De Broglie. Así, en 1925, dio con la ecuación que revolucionó la física hasta el momento:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t)$$

Vamos a «deducirla» a partir del principio de De Broglie. Como sabemos, la luz son ondas, combinaciones lineales de funciones del tipo:

$$\Psi(x,t) = \exp(i2\pi(\frac{x \cdot \hat{n}}{\lambda} - \nu t)) = \exp(i(k \cdot x - \omega t))$$

Donde $k = \frac{2\pi}{\lambda}\hat{n}$, $\omega = 2\pi\nu$ y \hat{n} algún vector unitario que representa la dirección de la onda. Si llamamos $\hbar := \frac{h}{2\pi}$, sustituyendo $E = \hbar\omega$ y $p = \hbar k$ tenemos que:

$$\Psi(x,t) = \exp(\frac{i}{\hbar}(p \cdot x - Et))$$

Y derivando:

$$\begin{aligned} -\hbar^2\Delta_x\Psi(x,t) &= p^2\Psi(x,t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) &= E\Psi(x,t) \end{aligned}$$

Tomando la expresión de la energía en mecánica clásica $E = \frac{p^2}{2m} + V$ donde V es la energía potencial (que suponemos constante), obtenemos:

$$\begin{aligned} E\Psi(x,t) &= \frac{p^2}{2m}\Psi(x,t) + V\Psi(x,t) \\ i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\Psi(x,t) + V\Psi(x,t) \end{aligned}$$

Así, como la ecuación es lineal como queríamos, podemos dar el siguiente salto: si $\Psi(x,t)$ es la función de onda asociada a un electrón, entonces sigue la ecuación anterior (y ahora $V = V(x)$ podemos suponer que vale variable).

Si buscamos electrones con energía dada, nuestros cálculos para la exponencial:

$$E\Psi(x,t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_x\Psi(x,t) + V(x)\Psi(x,t)$$

Sugieren considerar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi(x) + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x)$$

No siempre se puede solucionar, buscamos valores E para los cuáles la solución sea buena (por ejemplo que esté en \mathcal{S} o L^2). A tales valores se les llama espectro de la energía.

La ecuación de Schrödinger ha dado soluciones satisfactorias para la descripción del espectro energético del átomo de hidrógeno² lo cuál es todo un hito.

A.2.1. Ecuación de Klein-Gordon y de Dirac

Como hemos mencionado, la energía relativista para una partícula libre es calculada por la fórmula $E^2 = m^2c^4 + p^2c^2$. Si en la deducción de la ecuación de Schrödinger hubiésemos utilizado esta ecuación, tendríamos la ecuación de Klein-Gordon:

$$\left\{ \Delta_x - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right\} \Psi(x, t) = \frac{m^2c^2}{\hbar^2} \Psi(x, t)$$

Sin embargo, desde un punto de vista físico las soluciones no son correctas. Por ejemplo, hay soluciones con «energía negativa»³:

$$\Psi(x, t) = \exp(i(k \cdot x \mp \omega t))$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t) = \pm \hbar \omega$$

Dirac argumentó que el problema estaba en que la ecuación era de segundo orden respecto al tiempo. Para reducirla de orden, cogió cuatro matrices 4×4 , $\{\gamma_i\}_{i=0}^3$ con la propiedad:

$$\begin{aligned} \gamma_i \gamma_j + \gamma_j \gamma_i &= 2\eta_{ij} \mathbb{I}_4 \\ \eta_{00} &= -1, \quad \eta_{ii} = 1, \quad i = 1, 2, 3 \\ \eta_{ij} &\neq 0, \quad i \neq j \end{aligned}$$

Así, sobre un cierto espacio de funciones vectoriales tenemos la igualdad de operadores:

$$\Delta_x - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} = \left\{ \gamma_0 \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} + \sum_{i=1}^3 \gamma_i \frac{\partial}{\partial x^i} \right\}^2$$

Esto permite considerar la ecuación de Dirac:

$$\sum_{i=0}^3 \gamma_i \frac{\partial}{\partial x^i} \Psi(x) = \frac{mc}{\hbar} \Psi(x)$$

con $x^0 := ct$. Esta ecuación es la aceptada para modelar el electrón, y con ligeras modificaciones, para un electrón en un campo electromagnético.

Dirac redescubrió así el álgebra de Clifford inventada por el matemático en 1878.

²Para átomos más complicados. El problema está en incluir las interacciones electrón-electrón y no sólo electrón-núcleo. Si se desprecian estas interacciones el modelo es bastante bueno, prácticamente igual al del átomo de hidrógeno, pero insuficiente en muchos cálculos. La química computacional estudia, entre otras cosas, cómo resolver numéricamente la ecuación para átomos y moléculas.

³Como $-\Delta$ es un operador positivo en L^2 , el espectro de la energía cinética es positiva en la ecuación de Schrödinger.

A.3. Probabilidad en mecánica cuántica, la interpretación de Copenhage

Una herramienta básica en análisis funcional es el estudio del espectro de un operador. La ecuación de Schrödinger sugiere tratar las variables físicas como operadores:

$$\hat{x}_j\phi(x) = x_j\phi(x)$$

$$\hat{p}_j\phi(x) = -i\partial_j\phi(x)$$

$$\hat{H}\phi(x) = \left\{ \frac{1}{2m} (\hat{p}_1^2 + \hat{p}_2^2 + \hat{p}_3^2) + V(x) \right\} \phi(x) = \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x) \right\} \phi(x)$$

tal que su espectro matemático representa el conjunto de valores posibles que puede tomar. Desde un punto de vista matemático la clase de Schwarz \mathcal{S} parece la idónea para que los operadores y sus composiciones estén bien definidos, pero no L^2 . Sin embargo se prefiere esta clase por varios motivos, vamos a dar una motivación probabilista.

Por simplicidad pensemos en $H = \mathbb{C}^n$ un espacio de Hilbert complejo de dimensión finita. Recordamos que:

1. Una matriz A es normal si conmuta con su transpuesta conjugada, $AA^\dagger = A^\dagger A$; A es hermítica si $A = A^\dagger$.
2. Una matriz A es normal si y sólo si existe una base de autovectores ortonormales.
3. Los autovalores de una matriz normal A son reales si A es hermítica y son positivos si $A = BB^\dagger$ con B normal.
4. Si A y B son normales y $AB = BA$, entonces hay una base ortonormal que diagonaliza las matrices simultáneamente.

Se pueden probar caracterizaciones similares para operadores acotados o incluso densamente definidos para espacios de Hilbert de dimensión infinita (que cumplen \hat{x}_j , \hat{p}_j y \hat{H}), pero volvamos al caso de dimensión finita.

Sea A es una matriz diagonalizable en H y $\{u_i\}_{i=1}^n$ una base ortonormal de autovectores con autovalores $\{\lambda_j\}_{j=1}^n$. Todo vector $v \in H$ se expresa de la forma:

$$v = c_1u_1 + \cdots + c_nu_n$$

$$(u_i, v) = \sum_{j=1}^n c_j(u_i, u_j) = c_i$$

y además:

$$(v, Av) = \sum_{i=1}^n |c_i|^2 \lambda_i$$

Si tomamos $|v| = 1$, la suma anterior es una media ponderada de los autovalores con pesos $p_i = |c_i|^2$. Esta interpretación permite medir momentos de orden superior:

$$\sum_{i=1}^n p_i \lambda_i^k = (v, A^k v)$$

fundamental en estadística para definir la desviación típica de una matriz A auto-adjunta⁴:

$$\sigma_A^2 := \langle (A - \langle A \rangle)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2 \geq 0$$

Estamos en condiciones de dar el siguiente salto conceptual:

0. La probabilidad cuántica se modela en un espacio de Hilbert H .
1. Un estado cuántico puro es un vector del espacio proyectivo $v \in PH$. Por comodidad trabajamos con representantes unitarios que están definidos salvo un factor $e^{i\theta}$.
2. Un observador cuántico es una matriz normal A , decimos que es real si A es hermítica y positivo si $A = BB^\dagger$ con B normal. Un observador sólo puede tomar los valores de su espectro.
3. Sea v un estado puro y A un observador.

La probabilidad $P(A = \lambda | v)$ de que A tome un autovalor λ en el estado v es:

$$P(A = \lambda | v) = (v, P_\lambda v)$$

donde P_λ es la proyección ortogonal al subespacio $H_\lambda = \ker(A - \lambda I)$.

A consecuencia, los momentos estadísticos (no centrados) de A se escriben:

$$\langle A^k \rangle_v = (v, A^k v)$$

4. Si al realizar una medida en el estado v del observador A nos da un autovalor λ , el estado del sistema pasa a ser $P_\lambda v / |P_\lambda v|$.

De este modo una solución normalizada de la ecuación de Schrödinger $\phi(x, t) \in L_x^2$ representa un estado puro y $|\phi(x, t)|^2$ representa la densidad de probabilidad de la posición x , pues por ejemplo:

$$\langle x_j(t) \rangle = \int_{\mathbb{R}^3} x_j |\phi(x, t)|^2 dx$$

Más aún, su transformada de Fourier $\widehat{\phi}(p, t)$ representa la densidad de probabilidad del momento p .

Neils Bohr, junto con Max Born y Werner Heisenberg, establecieron esta interpretación estadística de la mecánica cuántica. Ya habían estudiado previamente este comportamiento tan extraño en el átomo de hidrógeno introduciendo «matrices infinitas», nuestros conocidos operadores pero representados en l^2 . Con ésta interpretación se formula el principio de incertidumbre, qué es consecuencia de que $[\hat{x}_j, \hat{p}_k] = i\hbar\delta_{jk}$.

La teoría de la probabilidad «clásica» (de Kolmogorov) está intuitivamente basada en que todas las magnitudes se puede determinar simultáneamente y hay una distribución de probabilidad conjunta. En la teoría cuántica ésto no pasa: dos observadores que no conmuten no se pueden observar a la vez, luego no hay ninguna distribución de probabilidad conjunta.

⁴Si $A = A^\dagger$, $(v, A^2 v) = (Av, Av) \geq 0$

El principio de incertidumbre, que luego deduciremos, implica que la probabilidad de encontrar la posición y el momento de una partícula en una región del orden de \hbar^2 es nula. Como \mathbb{R}^2 es una unión numerable de éstas regiones, podríamos deducir que la probabilidad del total es 0... si las leyes de la probabilidad fuesen clásicas.

El punto 4 también implica que el acto de observar «modifica» el estado. Es algo también clásico: una moneda puede dar cara o cruz, y el acto de lanzarla hace que el estado sea, o bien cara, o bien cruz... pero los efectos cuánticos van mucho más allá. Imaginemos que A y B son dos observadores. Empezamos con un estado u , medimos A y nos da el autovalor λ , entonces caemos en el estado (salvo una constante) $P_\lambda^A u$, ahora medimos B , nos da el autovalor μ y caemos en el estado $P_\mu^B P_\lambda^A u$. En general no podemos asegurar que $P_\mu^B P_\lambda^A u \in \ker(A - \lambda I)$ (excepto si A y B conmutan), así que la medición de A podría dar otro autovalor $\lambda' \neq \lambda$. Esto no ocurre en la probabilidad clásica y parece totalmente ilógico: si A valía λ , ¿por qué ahora vale λ' ?, y ¡por culpa de observar B !

Esta interpretación tuvo muchos detractores, entre ellos los propios fundadores de la teoría cuántica, Einstein y Schrödinger. «Dios no juega a los dados con el universo» escribiría Einstein. Él creía que había un nivel más profundo determinista de cuyas reglas se deducirían éstas, el tiempo terminó tumbando esta idea.

A.3.1. Ejemplo «Toy», la partícula en una caja

Imaginemos que en \mathbb{R} tenemos el potencial:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x \in [0, L] \\ +\infty, & x \notin [0, L] \end{cases}$$

Las soluciones a la ecuación de Schrödinger deberán seguir la ecuación:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x, t), \quad x \in [0, L]$$

$$\Psi(x, t) = 0, \quad x \notin [0, L]$$

cuyas soluciones son de la forma (asumiendo cierta condición de sumabilidad en c_n):

$$\Psi(x, t) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \phi_n(x) e^{-iE_n t/\hbar}$$

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(p_n x/\hbar), \quad x \in [0, L]$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m}, \quad p_n = \frac{n\pi\hbar}{L}$$

Las funciones $\phi_n(x)$ forman una base ortonormal del espacio de soluciones, en particular:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\Psi(x, t)|^2 = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2$$

Cantidad que normalizamos a 1.

Además las $\phi_n(x)$ diagonalizan el operador energía \hat{H} :

$$\hat{H}\phi_n(x) = -\frac{\hbar^2}{2m}\phi_n''(x) = E_n\phi_n(x)$$

Así por ejemplo, la energía media en el estado $\Psi(x, t)$ es:

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{\Psi(x, t)} \hat{H} \Psi(x, t) dx = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 E_n$$

O para el momento $P\phi(x) = -i\hbar\phi'(x)$:

$$\langle P \rangle = 0, \quad \sigma_p^2 = \langle P^2 \rangle = \sum_{n=1}^{\infty} |c_n|^2 p_n^2$$

La densidad de probabilidad es:

$$P(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 = \sum_{n,m=1}^{\infty} \overline{c_n} c_m \exp(i\frac{E_n - E_m}{\hbar}t) \overline{\phi_n(x)} \phi_m(x)$$

la posición media, su media cuadrática y desviación típica en cierto instante t vienen dadas por:

$$\langle x(t) \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x P(x, t) dx$$

$$\langle x(t)^2 \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 P(x, t) dx$$

$$\sigma_{x(t)}^2 = \langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2$$

A.4. Cuantización, ¿qué es?

En la sección anterior hemos justificado la necesidad de introducir operadores en un espacio de Hilbert como modelo físico. Ahora se entiende mejor nuestro problema inicial:

Tal y como a la posición le asociamos el operador x , al momento el operador $-i\hbar\partial_j$ y a la energía $-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$, en general, ¿qué operador se le debe asociar a una función $f(x, p)$ dependiente de la posición y el momento? Y más importante, ¿qué espacio de Hilbert debemos asociarle a nuestro sistema físico?

En nuestro trabajo sólo hemos considerado el espacio $L^2(\mathbb{R}^N)$ que corresponde a una partícula libre en el espacio \mathbb{R}^N , y la llamada cuantización canónica. Lo ideal sería resolverlo en una variedad cualquiera M , y no tratar al tiempo como una dimensión aparte. Por otro lado es necesario entender la «cuantización de campos» para estudiar la teoría cuántica del campo electromagnético.

Observamos así que para responder a esta pregunta son necesarios conocimientos avanzados de análisis y geometría.

A.5. Probabilidad libre y análisis no conmutativo

Como matemáticos, lo natural es preguntarse: ¿por qué un espacio de Hilbert? ¿No habrá algo más básico y entendible de donde se deduzca la existencia del mismo? ¿Por qué es tan diferente la probabilidad usual de la cuántica?

Aunque la completa modelización de la cuántica es un tema abierto, parece que podemos afirmar que el espacio de Hilbert es innecesario.

Definición A.1. Una $*$ -álgebra es una \mathbb{C} álgebra unital A con una operación $*$: $A \rightarrow A$ que cumple:

$$(a + b)^* = a^* + b^*$$

$$(\lambda a)^* = \bar{\lambda} a^*$$

$$(a^*)^* = a$$

$$(ab)^* = b^* a^*$$

Un elemento se dice normal si $a^* a = a a^*$, autoadjunto si $a = a^*$ y positivo si $a = b b^*$ con b normal.

A es una C^* -álgebra con norma $\|\cdot\|$, si además es un espacio vectorial de Banach y:

$$\|1\| = 1$$

$$\|ab\| \leq \|a\| \|b\|$$

$$\|a^* a\| = \|a^*\| \|a\|$$

Un estado en una $*$ -álgebra A es una función lineal $\omega : A \rightarrow \mathbb{C}$ que además:

$$\omega(1) = 1$$

$$\omega(a^*) = \overline{\omega(a)}$$

$$\omega(a^* a) \geq 0$$

Si A es una C^* -álgebra requerimos que $\|\omega\| = 1$.

Un espacio de probabilidad libre es un par (A, ω) donde A es una $*$ -álgebra y ω un estado.

Un modelo de C^* -álgebra son los operadores acotados de un espacio de Hilbert complejo, y de hecho es el único salvo isomorfismo [4]. Todo vector unitario v define el estado $\omega(A) = (v, Av)$ (en analogía con los estados puros de la interpretación de Copenhague). Los momentos estadísticos de un elemento a vienen dados por:

$$\langle a^k \rangle_\omega = \omega(a^k)$$

Nos gustaría entender la $*$ -álgebra unital dada por:

$$Q = \langle x, p \mid [x, p] = i\hbar, x^* = x, p^* = p \rangle$$

No es una subálgebra de operadores de algún espacio de Hilbert de dimensión finita, pues en \mathbb{C}^n $Tr(AB) = Tr(BA)$ pero entonces:

$$0 = Tr[x, p] = Tr(i) = i \cdot n$$

Tampoco puede ser una C^* -álgebra pues por inducción:

$$[x^n, p] = in\hbar x^{n-1}$$

luego si hubiese una norma:

$$\begin{aligned} 2\|p\|\|x\|^n &\geq \|[x^n, p]\| \geq n\hbar\|x^{n-1}\| = n\hbar\|x\|^{n-1} \\ 2\|p\|\|x\| &\geq n\hbar, \quad \forall n \end{aligned}$$

No podemos hacer análisis en Q directamente, no obstante, parte de la teoría espectral puede ser transportada a las $*$ -álgebras. Recomiendo leer las notas de Terence Tao [8] para el lector interesado.

Vamos a dar una prueba del principio de incertidumbre. Notamos primero que, en toda $*$ -álgebra y para todo estado ω , tenemos que la aplicación:

$$\begin{aligned} (\cdot, \cdot) &: A \times A \longrightarrow \mathbb{C} \\ (a, b) &:= \omega(a^*b) \end{aligned}$$

es una forma hermítica semidefinida positiva, es decir:

$$\begin{aligned} (a, b+c) &= (a, b) + (a, c) \\ (a, \lambda b) &= \lambda(a, b) \\ \overline{(a, b)} &= (b, a) \\ (a, a) &\geq 0 \end{aligned}$$

por lo que cumple la desigualdad de Cauchy-Schwarz:

$$|(a, b)|^2 \leq (a, a)(b, b)$$

es decir:

$$|\omega(a^*b)|^2 \leq \omega(a^*a)\omega(b^*b)$$

Tomando $a = a^*$, $b = b^*$, tenemos que:

$$\begin{aligned} |\omega(ab)| &\leq \sqrt{\omega(a^2)\omega(b^2)} \\ |\omega(ba)| &\leq \sqrt{\omega(a^2)\omega(b^2)} \\ |\omega(ab - ba)| &\leq |\omega(ab)| + |\omega(ba)| \leq 2\sqrt{\omega(a^2)\omega(b^2)} \end{aligned}$$

Notamos que si $\tilde{a} = a - \omega(a)$ y $\tilde{b} = b - \omega(b)$, entonces:

$$[\tilde{a}, \tilde{b}] = \tilde{a}\tilde{b} - \tilde{b}\tilde{a} = ab - ba = [a, b]$$

Con un lenguaje más estadístico los cálculos quedan:

Proposición A.2. (*Principio de Incertidumbre*)

Sea A una $*$ -álgebra, ω un estado y a y b dos elementos autoadjuntos. Sea:

$$\begin{aligned} \sigma_a^2 &= \omega((a - \omega(a))^2) \\ \sigma_b^2 &= \omega((b - \omega(b))^2) \end{aligned}$$

Entonces:

$$\sigma_a\sigma_b \geq \frac{|\omega([a, b])|}{2}$$

En particular para x y p de Q :

$$\sigma_x\sigma_p \geq \frac{\hbar}{2}$$

La relación de la probabilidad libre con la usual es la siguiente. Dado un espacio medible X , el álgebra de funciones medibles es una *-álgebra conmutativa y unital con la conjugación puntual.

Una medida de probabilidad μ da el estado E en la subálgebra $L^{\infty-}$:

$$L^{\infty-}(X) := \bigcap_{p \in [1, \infty)} L^p(X)$$

$$E : L^{\infty-}(X) \longrightarrow \mathbb{C}$$

$$E(f) := \int_X f d\mu$$

Esta subálgebra contiene a la C^* -álgebra $L^\infty(X)$.

Así, la probabilidad libre pretende estudiar espacios de probabilidad mediante sus álgebra de funciones, incluso permitiendo a éstas ser no conmutativas. Originalmente surge en el estudio de álgebras de operadores.

Bibliografía

- [1] Donald L. Cohn. *Measure theory*. Birkhäuser Advanced Texts: Basler Lehrbücher. [Birkhäuser Advanced Texts: Basel Textbooks]. Birkhäuser/Springer, New York, second edition, 2013.
- [2] Gerald B. Folland. *Harmonic analysis in phase space*, volume 122 of *Annals of Mathematics Studies*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1989.
- [3] Gerald B. Folland. *A course in abstract harmonic analysis*. Textbooks in Mathematics. CRC Press, Boca Raton, FL, second edition, 2016.
- [4] I. Gelfand and M. Naimark. On the imbedding of normed rings into the ring of operators in Hilbert space. *Mat. Sb., Nov. Ser.*, 12:197–213, 1943.
- [5] L. D Landau. *Quantum mechanics : Non-relativistic theory*. Landau, L.D. Course of theoretical physics by Landau and Lifshitz 3. Butterworth Heinemann, Amsterdam [etc., 3rd.ed revised. edition, 1977.
- [6] Michael Reed and Barry Simon. *Methods of modern mathematical physics. I*. Academic Press, Inc. [Harcourt Brace Jovanovich, Publishers], New York, second edition, 1980. Functional analysis.
- [7] Elias M. Stein. *Harmonic analysis: real-variable methods, orthogonality, and oscillatory integrals*, volume 43 of *Princeton Mathematical Series*. Princeton University Press, Princeton, NJ, 1993. With the assistance of Timothy S. Murphy, Monographs in Harmonic Analysis, III.
- [8] Terence Tao. 254a, notes 5: Free probability. <https://terrytao.wordpress.com/2010/02/10/245a-notes-5-free-probability/>.
- [9] Michael E Taylor. *Noncommutative harmonic analysis*. Mathematical surveys and monographs 22. American Mathematical Society, Providence, R.I, 1986.