

Operadores no acotados

ISABEL MARRERO
Departamento de Análisis Matemático
Universidad de La Laguna
imarrero@ull.es

Índice

1. Introducción	1
1.1. Operadores densamente definidos y adjuntos	2
1.2. Operadores simétricos y autoadjuntos	4
1.3. Operadores cerrados	6
2. Operadores no acotados en mecánica cuántica	9
2.1. Ideas básicas: estados, operador posición, observables	9
2.1.1. Estados	9
2.1.2. Operador posición	11
2.1.3. Observables	13
2.2. Operador momento	14
2.3. Principio de incertidumbre de Heisenberg	15
2.3.1. Conmutadores	15
2.3.2. Principio de incertidumbre	17



Universidad
de La Laguna



1. Introducción

La acotación de un operador lineal ha sido esencial en los resultados establecidos hasta ahora. Sin embargo, en las principales aplicaciones de la teoría de espacios de Hilbert encontramos frecuentemente operadores no acotados. En este tema discutiremos brevemente algunos problemas, conceptos, métodos básicos y aplicaciones de la teoría de operadores lineales no acotados.

Supondremos que H es un espacio de Hilbert y llamaremos *operador* en H a toda aplicación *lineal* T definida en su *dominio* $\mathcal{D}(T)$, que es un subespacio de H , con valores en H . Un operador T en H se dice *no acotado* si existen una sucesión $\{x_n\}_{n=1}^{\infty} \subset H$ y un escalar $M > 0$ tales que $\|x_n\| \leq M$ ($n \in \mathbb{N}$) pero $\|Tx_n\| \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \infty$. Como, para aplicaciones lineales, acotación equivale a continuidad, la no acotación es equivalente a la discontinuidad en todo punto. Por tanto, también podemos probar que un operador es no acotado encontrando una sucesión $\{x_n\}_{n=1}^{\infty}$ convergente a cero, tal que la sucesión $\{Tx_n\}_{n=1}^{\infty}$ no converge a cero.

Uno de los operadores no acotados más relevantes es el operador diferencial. Otros ejemplos importantes surgen en la mecánica cuántica. En las aplicaciones físicas es natural suponer que todos los autovalores son reales, de aquí que los operadores autoadjuntos revistan especial interés.

Si el dominio $\mathcal{D}(A)$ de un operador acotado A es un subespacio propio de un espacio de Hilbert H , entonces A puede ser extendido a un operador acotado definido sobre todo H . Más precisamente, existe un operador acotado B definido en H , $\mathcal{D}(B) = H$, tal que $Ax = Bx$ ($x \in \mathcal{D}(A)$) y $\|A\| = \|B\|$ (teorema de Hahn-Banach). En el caso de operadores no acotados, esto es imposible: por ejemplo, el dominio de un operador diferencial no puede ser extendido a todo el espacio. Por otra parte, podríamos pensar en extender el dominio de un operador no acotado de forma que, aunque el dominio de la extensión no sea todo H , sí tenga mejores propiedades que el dominio original. La extensión de operadores no acotados es uno de los problemas principales de la teoría.

Definición 1.1 Sean A, B operadores en un espacio vectorial E . Si $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(B)$ y $Ax = Bx$ ($x \in \mathcal{D}(A)$), entonces se dice que B es una extensión de A , y se escribe $A \prec B$.

Al efectuar las operaciones algebraicas habituales sobre operadores no acotados es necesario tener en cuenta los respectivos dominios. Por ejemplo, el operador $A + B$ está definido punto a punto sobre $\mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$, esto es, $\mathcal{D}(A + B) = \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B)$. Puede suceder que $\mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(B) = \{0\}$, en cuyo caso la suma $A + B$ carece de interés. Similarmente, $\mathcal{D}(AB) = \{x \in \mathcal{D}(B) : Bx \in \mathcal{D}(A)\}$.

1.1. Operadores densamente definidos y adjuntos

Definición 1.2 Un operador A definido en un espacio normado E se dice densamente definido si su dominio es un subconjunto denso de E , esto es, $\overline{\mathcal{D}(A)} = E$.

El operador diferencial $D = d/dx$ es densamente definido en $L^2(\mathbb{R})$, porque el espacio de las funciones derivables con cuadrado integrable es denso en $L^2(\mathbb{R})$.

Definición 1.3 Sea A un operador densamente definido en un espacio de Hilbert H . Denotamos por $\mathcal{D}(A^*)$ el conjunto de todos los $y \in H$ tales que $\langle Ax, y \rangle$ es un funcional lineal continuo sobre $\mathcal{D}(A)$. El adjunto A^* de A es el operador dado por

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, A^*y \rangle \quad (x \in \mathcal{D}(A), y \in \mathcal{D}(A^*)).$$

En la definición anterior, A debe ser densamente definido para asegurar que A^* está bien definido.

Teorema 1.4 Sean A, B operadores densamente definidos en el espacio de Hilbert H .

- (i) Si $A \prec B$, entonces $B^* \prec A^*$.
- (ii) Si $\mathcal{D}(B^*)$ es denso en H , entonces $B \prec B^{**}$.

DEMOSTRACIÓN. Notemos en primer lugar que $A \prec B$ implica

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, B^*y \rangle \quad (x \in \mathcal{D}(A), y \in \mathcal{D}(B^*)).$$

Por otra parte,

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, A^*y \rangle \quad (x \in \mathcal{D}(A), y \in \mathcal{D}(A^*)).$$

Comparando las dos expresiones anteriores concluimos que $\mathcal{D}(B^*) \subset \mathcal{D}(A^*)$ y $A^*y = B^*y$ ($y \in \mathcal{D}(B^*)$). Esto demuestra (i).

Para probar (ii), reescribimos la condición

$$\langle Bx, y \rangle = \langle x, B^*y \rangle \quad (x \in \mathcal{D}(B), y \in \mathcal{D}(B^*))$$

en la forma

$$\langle B^*y, x \rangle = \langle y, Bx \rangle \quad (y \in \mathcal{D}(B^*), x \in \mathcal{D}(B)).$$

Ya que $\mathcal{D}(B^*)$ es denso en H , existe B^{**} y

$$\langle B^*y, x \rangle = \langle y, B^{**}x \rangle \quad (y \in \mathcal{D}(B^*), x \in \mathcal{D}(B^{**})).$$

Las dos últimas igualdades entrañan que $\mathcal{D}(B) \subset \mathcal{D}(B^{**})$ y $Bx = B^{**}x$ ($x \in \mathcal{D}(B)$), completando la prueba. \square

Teorema 1.5 *Si A es un operador inyectivo densamente definido en un espacio de Hilbert H con inverso A^{-1} densamente definido, entonces A^* es inyectivo y $(A^*)^{-1} = (A^{-1})^*$.*

DEMOSTRACIÓN. Sea $y \in \mathcal{D}(A^*)$. Entonces para cada $x \in \mathcal{D}(A^{-1})$ tenemos $A^{-1}x \in \mathcal{D}(A)$ y, por tanto,

$$\langle A^{-1}x, A^*y \rangle = \langle AA^{-1}x, y \rangle = \langle x, y \rangle.$$

Esto significa que $A^*y \in \mathcal{D}((A^{-1})^*)$, y que

$$(A^{-1})^*A^*y = (AA^{-1})^*y = y. \quad (1)$$

A continuación, sea $y \in \mathcal{D}((A^{-1})^*)$. Para cada $x \in \mathcal{D}(A)$ tenemos $Ax \in \mathcal{D}(A^{-1})$. Luego,

$$\langle Ax, (A^{-1})^*y \rangle = \langle A^{-1}Ax, y \rangle = \langle x, y \rangle.$$

Esto muestra que $(A^{-1})^*y \in \mathcal{D}(A^*)$, y que

$$A^*(A^{-1})^*y = (A^{-1}A)^*y = y. \quad (2)$$

La conclusión deseada sigue ya de (1) y (2). \square

Teorema 1.6 *Si A , B y AB son operadores densamente definidos en H , entonces $B^*A^* \prec (AB)^*$.*

DEMOSTRACIÓN. Supongamos que $x \in \mathcal{D}(AB)$ y que $y \in \mathcal{D}(B^*A^*)$. Puesto que $x \in \mathcal{D}(B)$ y $A^*y \in \mathcal{D}(B^*)$, sigue que

$$\langle Bx, A^*y \rangle = \langle x, B^*A^*y \rangle.$$

Por otra parte, como $Bx \in \mathcal{D}(A)$ e $y \in \mathcal{D}(A^*)$, tenemos

$$\langle ABx, y \rangle = \langle Bx, A^*y \rangle.$$

Consiguientemente,

$$\langle ABx, y \rangle = \langle x, B^*A^*y \rangle.$$

La arbitrariedad de $x \in \mathcal{D}(AB)$ permite inferir que $y \in \mathcal{D}((AB)^*)$, y que $(B^*A^*)y = (AB)^*y$. \square

1.2. Operadores simétricos y autoadjuntos

Definición 1.7 Sea A un operador densamente definido en un espacio de Hilbert H . Se dice que A es autoadjunto si $A = A^*$, esto es, si $\mathcal{D}(A^*) = \mathcal{D}(A)$ y $Ax = A^*x$ ($x \in \mathcal{D}(A)$).

Un operador acotado A densamente definido en H tiene una única extensión a un operador acotado en H , y tanto su dominio como el de su adjunto es todo H . En el caso de operadores no acotados la situación es más compleja: puede ocurrir que un operador A densamente definido tenga un adjunto A^* tal que $Ax = A^*x$ ($x \in \mathcal{D}(A) \cap \mathcal{D}(A^*)$) pero $\mathcal{D}(A) \neq \mathcal{D}(A^*)$, y por tanto A no sea autoadjunto. En el caso de operadores no acotados parece razonable relajar las condiciones de la Definición 1.7 en los siguientes términos.

Definición 1.8 Un operador A densamente definido en un espacio de Hilbert H se dice simétrico si $\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle$ ($x, y \in \mathcal{D}(A)$).

Para operadores acotados en un espacio de Hilbert, los conceptos «simétrico» y «autoadjunto» son equivalentes. En general, todo operador autoadjunto es simétrico pero, como mostraremos a continuación, un operador simétrico no tiene por qué ser autoadjunto. Nuestro primer ejemplo es el de un operador autoadjunto no acotado.

Ejemplo 1.9 En $H = \ell^2$ se considera el operador A , definido mediante

$$(Ax)(n) = \frac{x(n)}{n} \quad (x = \{x(n)\}_{n=1}^{\infty} \in \ell^2, n \in \mathbb{N}).$$

Este operador es inyectivo y autoadjunto. El subespacio $\mathcal{D}(A) = \mathcal{D}(A^{-1})$ es denso en H y consiste en todas las sucesiones $y = \{y(n)\}_{n=1}^{\infty} \in \ell^2$ tales que

$$\sum_{n=1}^{\infty} n^2 |y(n)|^2 < \infty.$$

El inverso A^{-1} está definido por

$$(A^{-1}y)(n) = ny(n) \quad (y \in \mathcal{D}(A^{-1}), n \in \mathbb{N}).$$

Claramente, A^{-1} es un operador no acotado. En efecto, considerando la sucesión $\{e_k\}_{k=1}^{\infty}$ de vectores unitarios canónicos encontramos que $\|e_k\|_2 = 1$ ($k \in \mathbb{N}$) y

$$\|A^{-1}e_k\|_2 = \|ke_k\|_2 = k \xrightarrow[k \rightarrow \infty]{} \infty.$$

En virtud del Teorema 1.5, $(A^{-1})^* = (A^*)^{-1} = A^{-1}$, así que A^{-1} es autoadjunto.

Ejemplo 1.10 Consideremos el operador $A = id/dt$, con dominio

$$\mathcal{D}(A) = \{f \in L^2[a, b] : f' \text{ es continua y } f(a) = f(b) = 0\}.$$

Entonces

$$\begin{aligned} \langle Af, g \rangle &= \int_a^b if'(t)\overline{g(t)} dt \\ &= if(b)\overline{g(b)} - if(a)\overline{g(a)} - \int_a^b if(t)\overline{g'(t)} dt \\ &= \int_a^b f(t)\overline{ig'(t)} dt = \langle f, Ag \rangle \quad (f, g \in \mathcal{D}(A)). \end{aligned}$$

Esto demuestra que A es simétrico. Por otra parte, $\mathcal{D}(A^*) \neq \mathcal{D}(A)$, ya que, fijada $f \in \mathcal{D}(A)$, la igualdad $\langle Af, g \rangle = \langle f, Ag \rangle$ se verifica para funciones g que no satisfacen la condición $g(a) = g(b) = 0$ y, por consiguiente, no están en el dominio de A . Así, A no es autoadjunto.

Nos disponemos a dar una caracterización muy simple de los operadores simétricos.

Proposición 1.11 Un operador A densamente definido en un espacio de Hilbert H es simétrico si, y sólo si, $A \prec A^*$.

DEMOSTRACIÓN. Supongamos que $A \prec A^*$. Como

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, A^*y \rangle \quad (x \in \mathcal{D}(A), y \in \mathcal{D}(A^*)), \quad (3)$$

necesariamente

$$\langle Ax, y \rangle = \langle x, Ay \rangle \quad (x, y \in \mathcal{D}(A)), \quad (4)$$

y por lo tanto A es simétrico.

Recíprocamente, si A es simétrico entonces se verifican (3) y (4), lo que implica $A \prec A^*$. □

1.3. Operadores cerrados

El concepto de operador cerrado es, en cierto sentido, una versión débil de la acotación.

Recordemos que el grafo de un operador definido sobre $\mathcal{D}(A) \subset E$ con rango $\mathcal{R}(A) \subset F$, donde E, F son espacios vectoriales, es el conjunto $\mathcal{G}(A) = \{(x, Ax) : x \in \mathcal{D}(A)\}$. El grafo del operador $A : \mathcal{D}(A) \rightarrow \mathcal{R}(A)$ es, por tanto, un subconjunto del producto cartesiano $E \times F$. Nótese que si $A \prec B$, entonces $\mathcal{G}(A) \subset \mathcal{G}(B)$.

Definición 1.12 *Un operador A de un espacio normado E en un espacio normado F se dice cerrado si su grafo $\mathcal{G}(A)$ es un subespacio cerrado de $E \times F$, esto es, $x_n \in \mathcal{D}(A)$, $x_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} x$ y $Ax_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} y$ implica $Ax = y$.*

Obsérvese que el dominio $\mathcal{D}(A)$ de un operador cerrado A en H no tiene por qué ser cerrado. De hecho, por el teorema del grafo cerrado, no puede serlo a menos que A sea acotado; en particular, si A es no acotado entonces $\mathcal{D}(A) \subsetneq H$.

Proposición 1.13 *El inverso de un operador cerrado es cerrado.*

DEMOSTRACIÓN. Si $\mathcal{G}(A) = \{(x, Ax) : x \in \mathcal{D}(A)\}$ es cerrado en $E \times F$ entonces, obviamente,

$$\mathcal{G}(A^{-1}) = \{(Ax, x) : x \in \mathcal{D}(A)\}$$

es también cerrado en $F \times E$. □

Proposición 1.14 *Si A es un operador densamente definido en un espacio de Hilbert H , entonces A^* es cerrado.*

DEMOSTRACIÓN. Suponiendo que $\{y_n\}_{n=1}^{\infty} \subseteq \mathcal{D}(A^*)$, $y_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} y$, y $A^*y_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} z$, para cada $x \in \mathcal{D}(A)$ tenemos

$$\langle Ax, y \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle Ax, y_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle x, A^*y_n \rangle = \langle x, z \rangle.$$

Por tanto, $y \in \mathcal{D}(A^*)$ y $A^*y = z$. □

Teorema 1.15 Sea A un operador cerrado densamente definido en un espacio de Hilbert H .

(i) Dados $u, v \in H$, existe un único par de vectores $x \in \mathcal{D}(A)$, $y \in \mathcal{D}^*(A)$ tales que $Ax + y = u$ y $x - A^*y = v$.

(ii) Para cualquier $v \in H$ existe un único $x \in \mathcal{D}(A^*A)$ tal que $A^*Ax + x = v$.

DEMOSTRACIÓN. Consideremos el espacio de Hilbert $K = H \times H$, con el producto escalar

$$\langle (x, y), (u, v) \rangle = \langle x, u \rangle + \langle y, v \rangle \quad (x, y, u, v \in H).$$

Como A es cerrado, $\mathcal{G}(A)$ es un subespacio cerrado de K ; por tanto, $K = \mathcal{G}(A) \oplus \mathcal{G}(A)^\perp$. Ahora bien, $(z, y) \in \mathcal{G}(A)^\perp$ si, y sólo si, $\langle (x, Ax), (z, y) \rangle = 0$ ($x \in \mathcal{D}(A)$), o, equivalentemente, $\langle x, z \rangle + \langle Ax, y \rangle = 0$ ($x \in \mathcal{D}(A)$). Así, $(z, y) \in \mathcal{G}(A)^\perp$ si, y sólo si, $\langle Ax, y \rangle = \langle x, -z \rangle$ ($x \in \mathcal{D}(A)$), esto es, si, y sólo si, $y \in \mathcal{D}(A^*)$ y $z = -A^*y$. Consecuentemente, si $(v, u) \in K$ existe un único par de vectores $x \in \mathcal{D}(A)$, $y \in \mathcal{D}^*(A)$ tales que $(v, u) = (x, Ax) + (-A^*y, y)$, lo que completa la demostración de (i).

Para establecer (ii), tomamos $u = 0$ en (i). Entonces existe un único par de vectores $x \in \mathcal{D}(A)$, $y \in \mathcal{D}^*(A)$ tales que $Ax + y = 0$ y $x - A^*y = v$, esto es, $x - A^*(-Ax) = v$, o bien $A^*Ax + x = v$. \square

Es deseable que un operador sea cerrado. Si no lo es, ¿podríamos extenderlo a un operador cerrado? El resultado siguiente muestra que para operadores simétricos la respuesta es siempre afirmativa.

Teorema 1.16 Si A es un operador simétrico densamente definido en un espacio de Hilbert H , existe un operador simétrico cerrado B tal que $A \prec B$.

DEMOSTRACIÓN. Comenzamos definiendo el dominio de B : $\mathcal{D}(B)$ será el conjunto de todos los $x \in H$ para los que existen $\{x_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathcal{D}(A)$ e $y \in H$ tales que $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x$ y $Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y$. Es fácil comprobar que $\mathcal{D}(B)$ es un espacio vectorial y que $\mathcal{D}(A) \subset \mathcal{D}(B)$. El operador B se define como sigue:

$$Bx = \lim_{n \rightarrow \infty} Ax_n \quad (x \in \mathcal{D}(B)), \quad (5)$$

donde $\{x_n\}_{n=1}^\infty \subset \mathcal{D}(A)$ es tal que $x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x$ y existe el límite $\lim_{n \rightarrow \infty} Ax_n$.

En primer lugar, hemos de comprobar que (5) define efectivamente un operador, esto es, que para cada $x \in \mathcal{D}(B)$ el valor Bx no depende de la sucesión particular $\{x_n\}_{n=1}^\infty$. Supongamos que

$$x_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} x, \quad Ax_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} y,$$

$$z_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} x, \quad Az_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} w.$$

Por la simetría de A tenemos

$$\langle u, Ax_n - Az_n \rangle = \langle u, A(x_n - z_n) \rangle = \langle Au, x_n - z_n \rangle \quad (u \in \mathcal{D}(A)). \quad (6)$$

Como el producto interior es continuo, (6) implica

$$\langle u, y - w \rangle = \langle Au, x - x \rangle = 0;$$

en otras palabras, $y - w \in \mathcal{D}(A)^\perp$. Ya que $\mathcal{D}(A)$ es denso en H , concluimos que $y = w$. Por tanto, B es un operador bien definido sobre H .

Sea $x \in \mathcal{D}(A)$. Si en (5) ponemos $x_n = x$ ($n \in \mathbb{N}$), obtenemos $Ax = Bx$. Así, $A \prec B$.

Supongamos ahora que $x, y \in \mathcal{D}(B)$. Existen sucesiones $\{x_n\}_{n=1}^\infty, \{y_n\}_{n=1}^\infty$ de elementos de $\mathcal{D}(A)$ tales que

$$x_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} x, \quad Ax_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} Bx,$$

$$y_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} y, \quad Ay_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} By.$$

Puesto que A es simétrico, $\langle Ax_n, y_n \rangle = \langle x_n, Ay_n \rangle$ ($n \in \mathbb{N}$); haciendo $n \rightarrow \infty$ encontramos que $\langle Bx, y \rangle = \langle x, By \rangle$.

Consecuentemente, B es simétrico.

Finalmente, para demostrar que B es cerrado, tomamos una sucesión arbitraria $\{x_n\}_{n=1}^\infty$ en $\mathcal{D}(B)$ tal que

$$x_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} x, \quad Bx_n \xrightarrow[n \rightarrow \infty]{} y \quad (7)$$

para ciertos $x, y \in H$, y probaremos que $x \in \mathcal{D}(B)$, con $Bx = y$. Por la definición de $\mathcal{D}(B)$, para cada $m \in \mathbb{N}$ existe $y_m \in \mathcal{D}(B)$ tal que

$$\|x_m - y_m\| < \frac{1}{m}, \quad \|Bx_m - Ay_m\| < \frac{1}{m}.$$

Ahora, (7) obliga a que $y_m \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{} x$, $Ay_m \xrightarrow[m \rightarrow \infty]{} y$. Pero esto significa que $x \in \mathcal{D}(B)$ y $Bx = y$, completando la prueba. \square

Concluimos esta sección con una observación interesante. Sea A un operador cerrado en un espacio de Hilbert H ; sabemos que A no es necesariamente acotado. Sin embargo, siempre es posible redefinir el producto interior en $\mathcal{D}(A)$ para convertirlo en un espacio de Hilbert y hacer de A un operador acotado sobre $\mathcal{D}(A)$. A tal

fin, basta escribir

$$[x, y] = \langle x, y \rangle + \langle Ax, Ay \rangle \quad (x, y \in \mathcal{D}(A)),$$

donde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ denota el producto interior de H .

2. Operadores no acotados en mecánica cuántica

La mecánica cuántica es parte de la teoría cuántica, iniciada en 1900 cuando Max Planck anunció su concepto revolucionario de *cuanto*. Este evento decisivo está generalmente aceptado como el punto divisorio entre la física clásica y la física moderna o cuántica, surgida ante la necesidad de crear teorías que explicasen múltiples descubrimientos nuevos (los rayos X, el electrón, la radiactividad...)

La mecánica cuántica impulsó en gran medida el desarrollo de la teoría de espacios de Hilbert, particularmente en conexión con los operadores no acotados autoadjuntos. A continuación expondremos algunas de las principales razones para ello y discutiremos el papel de los operadores no acotados en la mecánica cuántica.

Comenzamos con el sistema físico formado por una única partícula y una dimensión. En este caso hemos de considerar el espacio de Hilbert $L^2(\mathbb{R})$, cuyos elementos, siguiendo la notación habitual en física, representaremos mediante letras griegas (ψ, φ, \dots) y denominaremos *estados*, y operadores autoadjuntos T, Q, D, \dots , llamados *observables*, cuyos dominios y rangos están en $L^2(\mathbb{R})$. El producto interior $\langle T\psi, \psi \rangle$ es una integral que puede ser interpretada en términos probabilísticos, donde ψ ayuda a definir una densidad de probabilidad. Este producto interior puede ser considerado un promedio, en tanto que caracteriza el valor medio del observable T que cabe esperar en la práctica si el sistema físico está en el estado ψ . Los observables más importantes de esta teoría son el *operador posición* Q , definido por $\psi(q) \mapsto q\psi(q)$, y el *operador momento* D , definido por $\psi(q) \mapsto (h/2\pi i)d\psi/dq$. Estos operadores no conmutan, lo que conduce al famoso *principio de incertidumbre de Heisenberg*.

2.1. Ideas básicas: estados, operador posición, observables

Consideramos el sistema físico formado por una única partícula y una sola dimensión, \mathbb{R} , en un instante de tiempo arbitrario pero fijo; esto es, el tiempo se considera como un parámetro que mantenemos constante.

2.1.1. Estados

En mecánica clásica, el estado de nuestro sistema en un instante determinado se describe mediante un par de números que dan la posición y la velocidad de la partícula. Sin embargo, en mecánica cuántica el

estado del sistema viene descrito por una función ψ de la variable real q a valores complejos, que suponemos perteneciente a $L^2(\mathbb{R})$. Esta hipótesis viene sugerida en buena medida por la interpretación física de ψ , función que está relacionada con la probabilidad de que una partícula se encuentre en un determinado conjunto $J \subset \mathbb{R}$; más precisamente, tal probabilidad es

$$\int_J |\psi(q)|^2 dq. \quad (8)$$

A $J = \mathbb{R}$ le debería corresponder la probabilidad 1, esto es, queremos que la partícula se encuentre en alguna parte de la recta real. Esto obliga a la condición de normalización

$$\|\psi\|_2^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(q)|^2 dq = 1.$$

Claramente, la integral en (8) permanece invariada si multiplicamos ψ por un factor complejo de módulo 1.

Nuestras consideraciones muestran que la descripción determinista de un estado en la mecánica clásica queda reemplazada por la descripción probabilística del mismo en la mecánica cuántica. Y la situación sugiere que definamos un *estado* (de nuestro sistema físico en un instante dado) como un elemento $\psi \in L^2(\mathbb{R})$, $\|\psi\|_2 = 1$; más precisamente, como una clase de equivalencia de estos elementos, donde la relación de equivalencia « \sim » está definida como sigue: $\psi_1 \sim \psi_2$ cuando $\psi_1 = \alpha \psi_2$, siendo $\alpha \in \mathbb{C}$, $|\alpha| = 1$. Por simplicidad, denotamos de la misma manera las clases y sus representantes.

Observamos que si $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ con $\|\psi\|_2 = 1$, entonces ψ genera un subespacio unidimensional

$$Y = \{\varphi = \beta \psi : \beta \in \mathbb{C}\}$$

de $L^2(\mathbb{R})$. Por tanto, podríamos decir igualmente que un estado de nuestro sistema es un subespacio unidimensional $Y \subset L^2(\mathbb{R})$ y usar alguna $\varphi \in Y$ con $\|\varphi\|_2 = 1$ para definir una probabilidad mediante (8).

Vemos entonces que, en (8), $|\psi(q)|^2$ desempeña el papel de la densidad de una distribución de probabilidad en \mathbb{R} . Por definición, el correspondiente *valor medio* o *esperado* es

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

la *varianza* de la distribución es

$$\sigma_\psi^2 = \int_{-\infty}^{\infty} (q - \mu_\psi)^2 |\psi(q)|^2 dq,$$

y la *desviación típica* es la raíz cuadrada no negativa de la varianza,

$$\sigma_\psi = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} (q - \mu_\psi)^2 |\psi(q)|^2 dq \right\}^{1/2}.$$

Intuitivamente, μ_ψ mide el valor medio o posición central de ψ , y σ_ψ^2 su dispersión alrededor de este valor medio.

2.1.2. Operador posición

Advertimos ahora que podemos escribir

$$\mu_\psi(Q) = \langle Q\psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} Q\psi(q) \overline{\psi(q)} dq,$$

donde el operador $Q : \mathcal{D}(Q) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$ se define mediante $Q\psi(q) = q\psi(q)$ (*multiplicación por la variable independiente q*). Puesto que $\mu_\psi(Q)$ caracteriza la posición media de la partícula, Q se denomina *operador posición*. Por definición, $\mathcal{D}(Q)$ consiste en todas aquellas $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ tales que $Q\psi \in L^2(\mathbb{R})$.

Advertimos también que

$$\sigma_\psi^2(Q) = \langle (Q - \mu_\psi I)^2 \psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (Q - \mu_\psi I)^2 \psi(q) \overline{\psi(q)} dq.$$

Proposición 2.1 *El operador posición Q es un operador no acotado, densamente definido, autoadjunto y cerrado en $L^2(\mathbb{R})$.*

DEMOSTRACIÓN. El dominio $\mathcal{D}(Q)$ consiste en todas aquellas $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ tales que $Q\psi \in L^2(\mathbb{R})$, esto es, tales que

$$\int_{-\infty}^{\infty} q^2 |\psi(q)|^2 dt < \infty.$$

Esto implica que $\mathcal{D}(Q) \subsetneq L^2(\mathbb{R})$: por ejemplo, la función

$$\psi(q) = \begin{cases} 1/q, & q \geq 1 \\ 0, & q < 1 \end{cases}$$

está en $L^2(\mathbb{R}) \setminus \mathcal{D}(Q)$. Obviamente, $\mathcal{D}(Q)$ contiene a todas aquellas funciones $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ que se anulan fuera de un intervalo compacto. Como el conjunto de estas funciones es denso en $L^2(\mathbb{R})$, se concluye que $\mathcal{D}(Q)$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$.

A fin de probar que Q no está acotado, para cada $n \in \mathbb{N}$ consideramos

$$\psi_n(q) = \begin{cases} 1, & n \leq q < n+1 \\ 0, & \text{en otro caso.} \end{cases}$$

Claramente, $\|\psi_n\|_2 = 1$ y

$$\|Q\psi_n\|_2^2 = \int_n^{n+1} q^2 dq > n^2.$$

Sigue que $\|Q\psi_n\|_2 / \|\psi_n\|_2 > n$, donde $n \in \mathbb{N}$ puede ser elegido arbitrariamente grande. Luego, Q es no acotado.

A continuación probaremos que Q es autoadjunto. En primer lugar, Q es simétrico, ya que

$$\langle Q\psi, \varphi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} q\psi(q)\overline{\varphi(q)} dq = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q)\overline{q\varphi(q)} dq = \langle \psi, Q\varphi \rangle \quad (\psi, \varphi \in \mathcal{D}(Q)).$$

La Proposición 1.11 entraña ahora que $Q \prec Q^*$. Así, para demostrar que Q es autoadjunto sólo necesitamos establecer que $\mathcal{D}(Q^*) \subset \mathcal{D}(Q)$.

Sea, pues, $\varphi \in \mathcal{D}(Q^*)$. Para cada $\psi \in \mathcal{D}(Q)$,

$$\langle Q\psi, \varphi \rangle = \langle \psi, Q^*\varphi \rangle,$$

esto es,

$$\int_{-\infty}^{\infty} q\psi(q)\overline{\varphi(q)} dq = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q)\overline{(Q^*\varphi)(q)} dq.$$

Se desprende que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(q) \left[\overline{q\varphi(q)} - \overline{(Q^*\varphi)(q)} \right] dq = 0.$$

En particular, lo anterior vale para cualquier $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ que se anule fuera de un intervalo acotado arbitrario $]a, b[$; una tal ψ está, evidentemente, en $\mathcal{D}(Q)$. Eligiendo

$$\psi(q) = \begin{cases} q\varphi(q) - (Q^*\varphi)(q), & t \in]a, b[\\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases}$$

encontramos que

$$\int_a^b |q\varphi(q) - (Q^*\varphi)(q)|^2 dq = 0,$$

lo que obliga a que $q\varphi(q) = (Q^*\varphi)(q)$ en casi todo punto $q \in]a, b[$. Como $]a, b[$ es arbitrario, se concluye que $q\varphi(q) = (Q^*\varphi)(q) \in L^2(\mathbb{R})$. Consecuentemente, $\varphi \in \mathcal{D}(Q)$ y $(Q^*\varphi)(q) = q\varphi(q) = (Q\varphi)(q)$.

Que Q es cerrado se infiere ahora de la Proposición 1.14 y del hecho de que $Q = Q^*$. \square

2.1.3. Observables

El estado ψ de un sistema físico contiene nuestro conocimiento teórico completo del sistema, pero sólo implícitamente, y esto plantea el problema de cómo obtener información a partir de ψ sobre cantidades que expresen propiedades del sistema susceptibles de ser observadas experimentalmente. Una cualquiera de estas cantidades se llama un *observable*. Son observables importantes la *posición*, el *momento* y la *energía*.

Acabamos de ver que, en el caso de la posición, para resolver el problema mencionado disponemos de un operador autoadjunto, a saber, el operador posición Q . Esto sugiere proceder análogamente en el caso de otros observables, esto es, introducir operadores autoadjuntos oportunos.

En mecánica clásica nos preguntamos qué valores puede asumir un observable en un instante determinado. En mecánica cuántica podemos preguntar por la probabilidad de que una medida experimental produzca un valor del observable que caiga en un cierto intervalo.

Esta discusión sugiere definir un *observable* (de nuestro sistema físico en un instante determinado) como un operador autoadjunto $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$, donde $\mathcal{D}(T)$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$. Análogamente a como hicimos con el operador de posición, podemos definir el *valor medio* $\mu_\psi(T)$ por

$$\mu_\psi(T) = \langle T\psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} T\psi(q)\overline{\psi(q)}dq, \quad (9)$$

la *varianza* $\sigma_\psi^2(T)$ por

$$\sigma_\psi^2(T) = \langle (T - \mu_\psi I)^2\psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (T - \mu_\psi I)^2\psi(q)\overline{\psi(q)}dq,$$

y la *desviación típica* $\sigma_\psi(T)$ como la raíz cuadrada positiva de la varianza,

$$\sigma_\psi(T) = \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} (T - \mu_\psi I)^2\psi(q)\overline{\psi(q)}dq \right\}^{1/2}.$$

El valor $\mu_\psi(T)$ caracteriza el promedio del observable T que cabe esperar experimentalmente si el sistema está en el estado ψ , mientras que la varianza $\sigma_\psi^2(T)$ caracteriza la variabilidad o dispersión de los valores del observable alrededor de su valor medio.

2.2. Operador momento

Consideramos el mismo sistema físico que en la sección anterior, donde introdujimos y motivamos el operador posición

$$\begin{aligned} Q: \mathcal{D}(Q) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}) \\ \psi &\mapsto q\psi. \end{aligned}$$

Otro observable muy importante es el momento p . El correspondiente *operador momento* es

$$\begin{aligned} D: \mathcal{D}(D) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}) \\ \psi &\mapsto \frac{h}{2\pi i} \psi', \end{aligned}$$

donde h denota la *constante de Planck* (una constante universal de la naturaleza, cuyo valor es $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ julios \cdot segundo). El dominio $\mathcal{D}(D)$ es el subespacio formado por todas aquellas funciones $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ que son absolutamente continuas en cada intervalo compacto de \mathbb{R} y satisfacen $D\psi \in L^2(\mathbb{R})$.

Recordemos que una función $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$ se dice *absolutamente continua* en $[a, b]$ si dado $\varepsilon > 0$, existe $\delta > 0$ tal que para cualquier colección finita de subintervalos abiertos disjuntos $]a_1, b_1[, \dots,]a_n, b_n[$ de $[a, b]$ de longitud total menor que δ , se tiene $\sum_{j=1}^n |f(b_j) - f(a_j)| < \varepsilon$. Si f es absolutamente continua en $[a, b]$ entonces es derivable en casi todo punto de $[a, b]$, con derivada integrable en dicho intervalo.

Proposición 2.2 *El operador momento D es un operador no acotado, densamente definido, autoadjunto y cerrado en $L^2(\mathbb{R})$.*

DEMOSTRACIÓN. El dominio $\mathcal{D}(D)$ consiste en todas aquellas $\psi \in L^2(\mathbb{R})$ que son absolutamente continuas en cada intervalo compacto de \mathbb{R} , con derivada $\psi' \in L^2(\mathbb{R})$.

Como $\mathcal{D}(D)$ contiene a la base ortonormal obtenida de los polinomios de Hermite, se concluye que $\mathcal{D}(D)$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$.

A fin de demostrar que D no está acotado, advertimos que D es una extensión de $D_0 = D|_Y$, donde $Y = \mathcal{D}(D) \cap L^2[0, 1]$ y se considera $L^2[0, 1]$ como subespacio de $L^2(\mathbb{R})$; consecuentemente, si D_0 es no acotado, D también lo es. Probemos entonces que D_0 no está acotado. Para $n \in \mathbb{N}$ consideramos

$$\psi_n(q) = \begin{cases} 1 - nq, & 0 \leq q \leq 1/n \\ 0, & 1/n < q \leq 1, \end{cases}$$

cuya derivada es

$$\psi'_n(q) = \begin{cases} -n, & 0 < q < 1/n \\ 0, & 1/n < q < 1. \end{cases}$$

Se tiene

$$\|\psi_n\|_2^2 = \int_0^1 |\psi_n(q)|^2 dq = \frac{1}{3n}$$

y

$$\|D_0\psi_n\|_2^2 = \frac{h^2}{4\pi^2} \int_0^1 |\psi'_n(q)|^2 dq = n;$$

sigue que $\|D_0\psi_n\|_2/\|\psi_n\|_2 = (h\sqrt{3}/2\pi)n$, donde $n \in \mathbb{N}$ puede ser elegido arbitrariamente grande. Luego, D_0 es no acotado.

La demostración de que D es autoadjunto requiere algunas herramientas de la teoría de la integral de Lebesgue y será omitida.

Finalmente, que D es cerrado se infiere de la Proposición 1.14 y del hecho de que $D = D^*$. □

2.3. Principio de incertidumbre de Heisenberg

2.3.1. Conmutadores

Sean S, T operadores autoadjuntos cualesquiera con dominios en el mismo espacio de Hilbert complejo. El operador $C = ST - TS$ se llama *conmutador* de S y T , y se define sobre

$$\mathcal{D}(C) = \mathcal{D}(ST) \cap \mathcal{D}(TS).$$

En mecánica cuántica, el conmutador de los operadores posición y momento es de fundamental importancia. Derivando directamente obtenemos

$$DQ\psi(q) = D(q\psi(q)) = \frac{h}{2\pi i} [\psi(q) + q\psi'(q)] = \frac{h}{2\pi i} \psi(q) + QD\psi(q).$$

Esto conduce a la importante *relación de conmutación de Heisenberg*

$$DQ - QD = \frac{h}{2\pi i} \tilde{I}, \tag{10}$$

donde \tilde{I} es el operador identidad en el dominio

$$\mathcal{D}(DQ - QD) = \mathcal{D}(DQ) \cap \mathcal{D}(QD).$$

Mencionamos sin demostración que este dominio es denso en el espacio $L^2(\mathbb{R})$, lo cual puede comprobarse haciendo uso de los polinomios de Hermite.

A fin de obtener el famoso principio de incertidumbre de Heisenberg, probamos primeramente:

Teorema 2.3 Sean S, T operadores autoadjuntos con dominio y rango en $L^2(\mathbb{R})$. Entonces $C = ST - TS$ satisface

$$|\mu_\psi(C)| \leq 2\sigma_\psi(S)\sigma_\psi(T)$$

para cada ψ en el dominio de C .

DEMOSTRACIÓN. Escribimos $\mu_1 = \mu_\psi(S)$, $\mu_2 = \mu_\psi(T)$,

$$A = S - \mu_1 I, \quad B = T - \mu_2 I.$$

Podemos comprobar inmediatamente, por cálculo directo, que $C = ST - TS = AB - BA$. Ya que S, T son autoadjuntos y μ_1, μ_2 se definen como los productos interiores (9), estos promedios son reales, así que A, B son simétricos (véanse las observaciones posteriores a la Definición 1.8). Dado ψ en el dominio de C , la definición de valor medio proporciona

$$\mu_\psi(C) = \langle (AB - BA)\psi, \psi \rangle = \langle AB\psi, \psi \rangle - \langle BA\psi, \psi \rangle = \langle B\psi, A\psi \rangle - \langle A\psi, B\psi \rangle.$$

Los dos últimos productos tienen el mismo valor absoluto. Por la desigualdad triangular y la de Cauchy-Schwarz obtenemos

$$|\mu_\psi(C)| \leq |\langle B\psi, A\psi \rangle| + |\langle A\psi, B\psi \rangle| \leq 2\|B\psi\|_2\|A\psi\|_2.$$

Esto prueba la tesis, puesto que, al ser B simétrico,

$$\|B\psi\|_2 = \langle (T - \mu_2 I)^2 \psi, \psi \rangle^{1/2} = \sigma_\psi(T),$$

y similarmente para $\|A\psi\|_2$. □

2.3.2. Principio de incertidumbre

Sabemos, por (10), que el conmutador de los operadores posición y momento es $C = (h/2\pi i)\tilde{I}$. Consecuentemente $|\mu_\psi(C)| = h/2\pi$, lo que conduce al

Teorema 2.4 (Principio de incertidumbre de Heisenberg) *Para los operadores posición Q y momento D ,*

$$\sigma_\psi(D)\sigma_\psi(Q) \geq \frac{h}{4\pi}.$$

Físicamente, esta desigualdad significa que no podemos medir simultáneamente la posición y el momento de una partícula con exactitud ilimitada. En efecto, las desviaciones típicas $\sigma_\psi(D)$, $\sigma_\psi(Q)$ caracterizan la precisión de la medida de la posición y el momento, respectivamente, y no podemos disminuir ambos factores a la vez. Como h es muy pequeña, en macrofísica $h/4\pi$ es despreciable; sin embargo, no es este el caso en física atómica. La situación se comprende mejor si caemos en la cuenta de que cualquier medida de un sistema es una perturbación que cambia su estado, y si el sistema es pequeño (un electrón, por ejemplo), la perturbación es significativa. Por supuesto, cualquier medida involucra un error causado por la imprecisión del instrumento; pero cabría imaginar que este error se puede minimizar usando métodos de medida cada vez más refinados, de modo que, al menos en principio, al medir simultáneamente la posición y el momento instantáneos de una partícula ambos errores se pueden hacer menores que cualquier umbral predeterminado. El principio de incertidumbre impide tal posibilidad y establece que esta limitación es intrínseca y no viene provocada por la imperfección de los instrumentos de medida.

Más en general, el principio de incertidumbre expresa que dos observables cualesquiera S , T cuyo conmutador no es el operador nulo no pueden ser medidos simultáneamente con precisión ilimitada, y que esta restricción es intrínseca.