

Francisco Javier Reyes Sánchez

Operadores lineales no acotados en espacios de Hilbert

Unbounded Linear Operators in Hilbert Space

Trabajo Fin de Grado
Grado en Matemáticas
La Laguna, junio de 2017

DIRIGIDO POR

María Isabel Marrero Rodríguez

María Isabel Marrero Rodríguez

Dpto. de Análisis Matemático

Universidad de La Laguna

Apto. de Correos 456

38200 La Laguna, Tenerife

Agradecimientos

A María Isabel Marrero Rodríguez,
por su tiempo, dedicación y ayuda para elaborar esta memoria.

A María Victoria Reyes Sánchez,
por su consejo y guía durante estos cuatro años.

A mi familia y amigos,
por su apoyo incondicional.
Y especialmente a mi pareja,
por estar siempre a mi lado.

Resumen · Abstract

Resumen

Los operadores lineales no acotados, y en particular los autoadjuntos, comparecen en numerosas aplicaciones, especialmente en conexión con las ecuaciones diferenciales y la mecánica cuántica. En este trabajo se estudian algunos problemas, conceptos, métodos básicos y aplicaciones a la física cuántica de la teoría de operadores lineales no acotados en espacios de Hilbert.

Palabras clave: *Espacio de Hilbert – Operador lineal no acotado – Operador autoadjunto – Mecánica cuántica.*

Abstract

Unbounded linear operators, and mainly the selfadjoint ones, occur in many applications, notably in connection with differential equations and in quantum mechanics. Here we study some problems, concepts, basic methods and applications to quantum physics of the theory of unbounded linear operators in Hilbert space.

Keywords: *Hilbert space – Unbounded linear operator – Selfadjoint operator – Quantum mechanics.*

Contenido

Agradecimientos	III
Resumen/Abstract	V
Introducción	IX
1. Operadores lineales no acotados en espacios de Hilbert	1
1.1. Operadores lineales no acotados y sus operadores Hilbert-adjuntos	1
1.2. Operadores lineales Hilbert-adjuntos, simétricos y autoadjuntos .	5
1.3. Operadores lineales cerrados y cierre	8
2. Teoría espectral de operadores lineales autoadjuntos	13
2.1. Familia espectral	14
2.2. Propiedades espectrales de operadores lineales autoadjuntos.....	18
2.3. Representación espectral de operadores unitarios	21
2.4. Representación espectral de operadores lineales autoadjuntos.....	27
2.5. Operadores multiplicación y derivada	31
2.5.1. Operador multiplicación	31
2.5.2. Operador derivada.....	35
3. Operadores lineales no acotados en mecánica cuántica	37
3.1. Ideas básicas: estados, operador posición, observables	38
3.1.1. Estados	38
3.1.2. Operador posición	39
3.1.3. Observables	39
3.2. Operador momento	40
3.3. Principio de incertidumbre de Heisenberg	42
3.3.1. Conmutadores	42
3.3.2. Principio de incertidumbre	44

3.4. Otras aplicaciones	44
3.4.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo.....	45
3.4.2. Operador hamiltoniano	45
3.4.3. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo	46
Bibliografía	47
Póster	49

Introducción

Los operadores diferenciales y la mayoría de los que comparecen en la física matemática son no acotados. El manejo de los operadores no acotados frente a los acotados no sólo conlleva diversas sutilezas técnicas, sino que a menudo requiere desarrollar nuevos métodos o idear nuevos conceptos. Dentro de la clase de los operadores no acotados, los operadores autoadjuntos constituyen objetos fundamentales en matemáticas y en física cuántica. En este trabajo se estudian algunos problemas, conceptos, métodos básicos y aplicaciones a la mecánica cuántica de la teoría de operadores lineales autoadjuntos no acotados en espacios de Hilbert.

En el capítulo 1 se parte de operadores lineales $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ cuyo dominio $\mathcal{D}(T)$ se encuentra en un espacio de Hilbert complejo H . Admitiremos que estos operadores pueden no estar acotados, en cuyo caso diremos que son *no acotados*. En el caso de los operadores no acotados, las consideraciones sobre dominios y problemas de extensión adquieren una importancia primordial. Para que exista el operador Hilbert-adjunto T^* de un operador lineal T , éste debe estar densamente definido en el espacio de Hilbert H , es decir, su dominio $\mathcal{D}(T)$ debe ser denso en H . Por otra parte, si T satisface idénticamente la relación

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle$$

y es no acotado, el teorema de Hellinger-Toeplitz impide que su dominio sea todo H ; se dice en tal caso que T es *simétrico*. En el contexto de operadores no acotados, si un operador lineal es *autoadjunto* ($T = T^*$) entonces es simétrico, pero el recíproco no siempre es cierto. Un operador lineal T densamente definido y simétrico queda caracterizado por cualquiera de las dos condiciones siguientes: (i) T^* extiende a T ; (ii) $\langle Tx, x \rangle \in \mathbb{R}$, $x \in \mathcal{D}(T)$. La mayoría de los operadores lineales no acotados que surgen en la práctica son cerrados o tienen extensiones lineales cerradas; el capítulo 1 termina con el estudio de algunas de las propiedades de estos operadores en relación con los simétricos y los autoadjuntos.

El capítulo 2 está dedicado a la teoría espectral de los operadores no acotados autoadjuntos. La teoría espectral proporciona una herramienta muy potente para entender los operadores lineales, descomponiendo el espacio sobre el que actúan en subespacios invariantes donde su acción es simple. Tras recordar el concepto de familia espectral, en el presente capítulo se demuestra que el espectro de un operador lineal autoadjunto es real y cerrado, y se obtiene una representación espectral de un tal operador T por medio de la *transformada de Cayley* $U = (T - iI)(T + iI)^{-1}$ de T en combinación con el teorema espectral para operadores unitarios, cuya demostración está basada en un lema debido a F.J. Wecken. Previamente se prueba que el espectro de un operador unitario vive en la circunferencia unidad del plano complejo. El capítulo finaliza con el estudio de dos operadores lineales no acotados que desempeñan un papel crucial en la mecánica cuántica: los operadores multiplicación y derivada.

La mecánica cuántica impulsó en gran medida el desarrollo de la teoría de espacios de Hilbert, particularmente en conexión con los operadores autoadjuntos no acotados. El capítulo 3 de esta memoria aborda, precisamente, la aplicación a la mecánica cuántica de la teoría desarrollada en los capítulos precedentes. 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

$$\psi(q) \mapsto \frac{\hbar}{2\pi i} \frac{d\psi}{dq};$$

aquí, \hbar denota la *constante de Planck*, una constante universal de la naturaleza, cuyo valor es $\hbar = 6,626 \cdot 10^{-34}$ julios \cdot segundo. Los operadores posición y momento no conmutan, lo que conduce al célebre *principio de incertidumbre de Heisenberg*. El capítulo concluye con una somera mención al operador hamiltoniano, las ecuaciones de Schrödinger (dependiente e independiente del tiempo) y algunos sistemas y fenómenos físicos que pueden ser objeto de estudio en un futuro próximo como aplicación de la teoría aquí expuesta.

La memoria se completa con algunas referencias bibliográficas básicas, de las que fundamentalmente se ha seguido [2], junto con el preceptivo póster en lengua inglesa resumiendo sus contenidos.

Operadores lineales no acotados en espacios de Hilbert

A lo largo de este capítulo consideraremos operadores lineales $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ cuyo dominio $\mathcal{D}(T)$ se encuentra en un espacio de Hilbert complejo H . Admitiremos que estos operadores pueden no estar acotados, en cuyo caso diremos que son *no acotados*.

En el caso de los operadores no acotados, las consideraciones sobre dominios y problemas de extensión adquieren una importancia primordial.

Para que exista el operador Hilbert-adjunto T^* de un operador lineal T , éste debe estar densamente definido en el espacio de Hilbert H , es decir, su dominio $\mathcal{D}(T)$ debe ser denso en H (sección 1.1). Por otra parte, si T satisface idénticamente la relación

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle$$

y es no acotado, entonces su dominio no puede ser todo H . Se dice en tal caso que T es *simétrico* (sección 1.2). En el contexto de operadores no acotados, si un operador lineal es *autoadjunto* ($T = T^*$) entonces es simétrico, pero el recíproco no siempre es cierto.

La mayoría de los operadores lineales no acotados que surgen en la práctica son cerrados o tienen extensiones lineales cerradas (sección 1.3).

1.1. Operadores lineales no acotados y sus operadores Hilbert-adjuntos

Un operador T es acotado si, y sólo si, existe un número real k tal que

$$\|Tx\| \leq k \|x\|, \quad x \in \mathcal{D}(T).$$

A la hora de estudiar operadores lineales interesa poder distinguir fácilmente los acotados de los no acotados; por ello, es relevante determinar qué propiedades principales diferencian unos de otros. El Teorema 1.1 que veremos a

continuación sugiere que el dominio del operador y el problema de extenderlo jugarán un papel fundamental. De hecho, veremos que un buen número de propiedades de un operador dependen del dominio y pueden variar bajo extensiones y restricciones.

Cuando el Teorema 1.1 fue descubierto por E. Hellinger y O. Toeplitz (1910) despertó admiración y perplejidad, ya que establece una relación entre dos propiedades de un operador que son de diferente naturaleza: estar definido en todas partes y ser acotado.

Recordemos que un operador lineal acotado T en un espacio de Hilbert H se dice *autoadjunto* si

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle, \quad x, y \in H.$$

El Teorema 1.1 muestra que un operador lineal no acotado con esta propiedad no puede estar definido en todo H .

Teorema 1.1 (Hellinger-Toeplitz: acotación). *Si H es un espacio de Hilbert complejo y $T : H \rightarrow H$ un operador lineal que verifica*

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle, \quad x, y \in H, \tag{1.1}$$

entonces T es acotado.

Demostración. Procedemos por reducción al absurdo. Supongamos que T es no acotado y, por lo tanto, H contiene una sucesión (y_n) tal que $\|y_n\| = 1$, $n \in \mathbb{N}$, pero $\|Ty_n\| \rightarrow \infty$. Consideremos el funcional f_n definido por:

$$f_n(x) = \langle Tx, y_n \rangle = \langle x, Ty_n \rangle, \quad x \in H, n \in \mathbb{N}.$$

Para cada n fijo, f_n está definido en todo H , es lineal y además es acotado, como muestra la desigualdad de Schwarz:

$$|f_n(x)| = |\langle x, Ty_n \rangle| \leq \|Ty_n\| \|x\|, \quad x \in H.$$

Además, para todo $x \in H$ fijo, la sucesión $(f_n(x))$ está acotada. En efecto, aplicando de nuevo la desigualdad de Schwarz y tomando $\|y_n\| = 1$, $n \in \mathbb{N}$, tenemos:

$$|f_n(x)| = |\langle Tx, y_n \rangle| \leq \|Tx\|, \quad n \in \mathbb{N}.$$

De aquí, utilizando el principio de la acotación uniforme, podemos concluir que $(\|f_n\|)$ está acotada: $\|f_n\| \leq k$, para algún k y todo $n \in \mathbb{N}$. Esto implica que

$$|f_n(x)| \leq \|f_n\| \|x\| \leq k \|x\|, \quad x \in H, n \in \mathbb{N}.$$

Particularizando aquí $x = Ty_n$ llegamos a

$$\|Ty_n\|^2 = \langle Ty_n, Ty_n \rangle = |f_n(Ty_n)| \leq k \|Ty_n\|, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Esto contradice nuestra hipótesis de que $\|Ty_n\| \rightarrow \infty$ y completa la prueba. \square

Del Teorema 1.1 podemos deducir que es imposible tener $\mathcal{D}(T) = H$ para operadores lineales no acotados que satisfacen (1.1). Por tanto, resulta interesante plantear el problema de determinar el dominio de tales operadores y obtener extensiones de los mismos.

Usaremos la notación

$$S \prec T$$

para indicar que el operador T es una *extensión* del operador S , es decir, se satisface

$$\mathcal{D}(S) \subset \mathcal{D}(T) \quad \text{y} \quad S = T|_{\mathcal{D}(S)}.$$

Diremos que una extensión T de S es una *extensión propia* si $\mathcal{D}(S)$ es un subconjunto propio de $\mathcal{D}(T)$:

$$\mathcal{D}(T) \setminus \mathcal{D}(S) \neq \emptyset.$$

Recordemos el concepto de operador Hilbert-adjunto T^* de un operador lineal acotado T .

Definición 1.2 *Dado un operador lineal acotado $T : H_1 \rightarrow H_2$ entre espacios de Hilbert H_1 y H_2 , llamaremos operador Hilbert-adjunto de T al operador $T^* : H_2 \rightarrow H_1$ que verifica*

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle, \quad x \in H_1, y \in H_2,$$

o, lo que es lo mismo,

$$i) \langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle, \quad ii) y^* = T^*y,$$

para $x \in H_1, y \in H_2$.

Se puede probar [2, Theorem 3.9-2] que si $T : H_1 \rightarrow H_2$ es un operador lineal acotado, entonces $T^* : H_2 \rightarrow H_1$ existe y es un operador lineal acotado, con norma $\|T^*\| = \|T\|$.

Retomando el caso de un operador no acotado $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$, T^* estará definido para aquellos $y \in H$ tales que existe $y^* \in H$ satisfaciendo los anteriores i) y ii) cuando $x \in \mathcal{D}(T)$.

Una condición importante para que T^* sea un operador es que esté bien definido: para cada $y \in \mathcal{D}(T^*)$, el correspondiente $y^* = T^*y$ debe ser único. Afirmamos que esto ocurre si, y sólo si, T es *densamente definido* en H , es decir, su dominio $\mathcal{D}(T)$ es un subconjunto denso de H .

En efecto, si $\mathcal{D}(T)$ no es denso en H entonces $\overline{\mathcal{D}(T)} \neq H$, el complemento ortogonal de $\overline{\mathcal{D}(T)}$ en H contiene un $y_1 \neq 0$, e $y_1 \perp x$, es decir, $\langle x, y_1 \rangle = 0$, para todo $x \in \mathcal{D}(T)$. Luego, en la Definición 1.2 i) tendríamos

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle = \langle x, y^* \rangle + \langle x, y_1 \rangle = \langle x, y^* + y_1 \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T),$$

lo que muestra la no unicidad en ii). Por otra parte, si $\mathcal{D}(T)$ es denso en H se tiene $\mathcal{D}(T)^\perp = \{0\}$. Por lo tanto, si $y_1^*, y_2^* \in H$ satisfacen $\langle x, y_1^* \rangle = \langle x, y_2^* \rangle$ para todo $x \in \mathcal{D}(T)$ entonces $y_1^* - y_2^* = 0$, lo que proporciona la unicidad deseada: $y_1^* = y_2^*$.

Quedamos ya en disposición de generalizar el concepto de operador adjunto al caso de operadores no acotados.

Definición 1.3 (Operador Hilbert-adjunto). *Dado un operador lineal $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$, posiblemente no acotado y densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H , se define el operador Hilbert-adjunto $T^* : \mathcal{D}(T^*) \rightarrow H$ de T como sigue. El dominio $\mathcal{D}(T^*)$ de T^* está formado por todos los $y \in H$ tales que existe $y^* \in H$ satisfaciendo*

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

Para cada uno de estos $y \in \mathcal{D}(T^)$, el operador Hilbert-adjunto T^* queda definido por*

$$y^* = T^*y.$$

En otras palabras, un vector $y \in H$ está en $\mathcal{D}(T^*)$ si, y sólo si, para ese y el producto interior $\langle Tx, y \rangle$, considerado como función de x , puede ser representado en la forma $\langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle$ para todo $x \in \mathcal{D}(T)$. Además, para ese y el correspondiente y^* está unívocamente determinado, puesto que, por hipótesis, $\mathcal{D}(T)$ es denso en H .

Se comprueba sin dificultad que el operador T^* es lineal.

A lo largo de este trabajo necesitaremos sumar y multiplicar (componer) operadores, pero deberemos ser cuidadosos ya que los operadores que intervienen pueden tener dominios diferentes, particularmente en el caso no acotado. Es por ello que primero definiremos lo que entendemos por sumas y productos de operadores en esta situación más general.

Dados dos operadores lineales $S : \mathcal{D}(S) \rightarrow H$ y $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$, con $\mathcal{D}(S) \subset H$ y $\mathcal{D}(T) \subset H$, se define el operador lineal $S + T$, *suma* de S y T , mediante

$$(S + T)x = Sx + Tx$$

para todo $x \in \mathcal{D}(S + T)$, donde

$$\mathcal{D}(S + T) = \mathcal{D}(S) \cap \mathcal{D}(T).$$

Nótese que $\mathcal{D}(S + T)$ es el mayor conjunto en el que están definidos tanto S como T , y que $\mathcal{D}(S + T)$ es un espacio vectorial. En particular, $\mathcal{D}(S + T)$ nunca es vacío, pues $0 \in \mathcal{D}(S + T)$.

Definamos ahora el producto TS , donde S y T son como anteriormente. Sea M el mayor subconjunto de $\mathcal{D}(S)$ cuya imagen bajo S se encuentra en $\mathcal{D}(T)$; es decir,

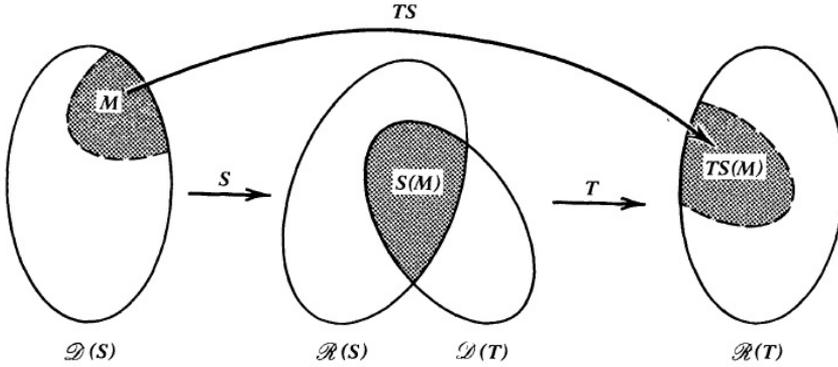


Figura 1.1. Producto de operadores lineales (fuente: [2, Figure 65]).

$$S(M) = \mathcal{R}(S) \cap \mathcal{D}(T),$$

donde $\mathcal{R}(S)$ es el rango de S (Figura 1.1). El *producto* TS se define como el operador con dominio $\mathcal{D}(TS) = M$ tal que

$$(TS)x = T(Sx)$$

para todo $x \in \mathcal{D}(TS)$.

De la definición anterior podemos deducir que el producto ST es el operador tal que

$$(ST)x = S(Tx)$$

para todo $x \in \mathcal{D}(ST)$, donde $\mathcal{D}(ST) = \widetilde{M}$ es el mayor subconjunto de $\mathcal{D}(T)$ cuya imagen bajo T se encuentra en $\mathcal{D}(S)$:

$$T(\widetilde{M}) = \mathcal{R}(T) \cap \mathcal{D}(S).$$

Los operadores TS y ST son lineales. Nótese que, por ser S un operador lineal, $\mathcal{R}(S)$, $S(M)$ y M son espacios vectoriales. Del mismo modo se puede comprobar que \widetilde{M} es un espacio vectorial.

1.2. Operadores lineales Hilbert-adjuntos, simétricos y autoadjuntos

En esta sección veremos en primer lugar dos teoremas que nos permitirán estudiar algunas propiedades básicas de los operadores Hilbert-adjuntos. Aquí, por definición,

$$T^{**} = (T^*)^*.$$

Teorema 1.4 (Operador Hilbert-adjunto). Sean $S : \mathcal{D}(S) \rightarrow H$ y $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ operadores lineales densamente definidos en un espacio de Hilbert complejo H . Se verifica:

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

Demostración. Probemos i). Por la definición de T^* ,

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T), y \in \mathcal{D}(T^*). \quad (1.2)$$

Por hipótesis $S \prec T$, luego:

$$\langle Sx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(S), y \in \mathcal{D}(T^*). \quad (1.3)$$

Además, por la definición de S^* ,

$$\langle Sx, y \rangle = \langle x, S^*y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(S), y \in \mathcal{D}(S^*). \quad (1.4)$$

De (1.3) y (1.4) queremos deducir que $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(S^*)$. Por la definición del operador Hilbert-adjunto S^* , el dominio de éste incluye a cualquier y que proporcione una representación de $\langle Sx, y \rangle$ de la forma (1.4), con $x \in \mathcal{D}(S)$. Puesto que la representación de $\langle Sx, y \rangle$ dada por (1.3) tiene la misma forma, el conjunto de los y que verifican (1.3) debe ser un subconjunto del conjunto de los y que cumplen (1.4); es decir, debemos tener $\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}(S^*)$. Se infiere de (1.3) y (1.4) que $S^*y = T^*y$ para todo $y \in \mathcal{D}(T^*)$, así que, por definición, $T^* \prec S^*$.

Probemos ahora ii). Tomando conjugados en (1.2), nos queda:

$$\langle T^*y, x \rangle = \langle y, Tx \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T), y \in \mathcal{D}(T^*). \quad (1.5)$$

La densidad de $\mathcal{D}(T^*)$ en H asegura que el operador T^{**} existe. Por definición,

$$\langle T^*y, x \rangle = \langle y, T^{**}x \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T^{**}), y \in \mathcal{D}(T^*). \quad (1.6)$$

De (1.5) y (1.6), razonando del mismo modo que en el apartado i), vemos que si $x \in \mathcal{D}(T)$ entonces también $x \in \mathcal{D}(T^{**})$ y se tiene $T^{**}x = Tx$ para ese x . Consecuentemente, $T \prec T^{**}$. \square

Nuestro segundo teorema recoge condiciones bajo las cuales el operador inverso del adjunto coincide con el operador adjunto del inverso.

Teorema 1.5 (Inverso del Hilbert-adjunto). Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H . Supongamos que T es inyectivo y que su rango $\mathcal{R}(T)$ es denso en H . Entonces T^* es inyectivo y

$$(T^*)^{-1} = (T^{-1})^*. \quad (1.7)$$

Demostración. Si T está densamente definido en H entonces existe T^* . Así mismo, T^{-1} existe porque T es inyectivo. Finalmente, $(T^{-1})^*$ existe puesto que $\mathcal{D}(T^{-1}) = \mathcal{R}(T)$ es denso en H . Debemos probar que $(T^*)^{-1}$ existe y satisface (1.7).

Sea $y \in \mathcal{D}(T^*)$. Para todo $x \in \mathcal{D}(T^{-1})$ tenemos $T^{-1}x \in \mathcal{D}(T)$ y

$$\langle T^{-1}x, T^*y \rangle = \langle TT^{-1}x, y \rangle = \langle x, y \rangle. \quad (1.8)$$

Por otro lado, por la definición del operador Hilbert-adjunto de T^{-1} ,

$$\langle T^{-1}x, T^*y \rangle = \langle x, (T^{-1})^* T^*y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T^{-1}); \quad (1.9)$$

luego, $T^*y \in \mathcal{D}((T^{-1})^*)$. Comparando (1.8) y (1.9) encontramos que

$$(T^{-1})^* T^*y = y, \quad y \in \mathcal{D}(T^*). \quad (1.10)$$

Vemos así que $T^*y = 0$ implica $y = 0$; por lo tanto, existe $(T^*)^{-1} : \mathcal{R}(T^*) \rightarrow \mathcal{D}(T^*)$. Además, como $(T^*)^{-1}T^*$ es el operador identidad en $\mathcal{D}(T^*)$, cotejando ahora con (1.10) resulta

$$(T^*)^{-1} \prec (T^{-1})^*. \quad (1.11)$$

Para probar la relación opuesta, sean $x \in \mathcal{D}(T)$ e $y \in \mathcal{D}((T^{-1})^*)$. Entonces $Tx \in \mathcal{R}(T) = \mathcal{D}(T^{-1})$ y

$$\langle Tx, (T^{-1})^*y \rangle = \langle T^{-1}Tx, y \rangle = \langle x, y \rangle. \quad (1.12)$$

Por otro lado, teniendo en cuenta la definición del operador Hilbert-adjunto de T :

$$\langle Tx, (T^{-1})^*y \rangle = \langle x, T^*(T^{-1})^*y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T).$$

De aquí junto con (1.12) podemos concluir que $(T^{-1})^*y \in \mathcal{D}(T^*)$ y

$$T^*(T^{-1})^*y = y, \quad y \in \mathcal{D}((T^{-1})^*). \quad (1.13)$$

Ahora, por la definición de inverso, $T^*(T^*)^{-1}$ es el operador identidad en $\mathcal{D}((T^*)^{-1}) = \mathcal{R}(T^*)$, y $(T^*)^{-1} : \mathcal{R}(T^*) \rightarrow \mathcal{D}(T^*)$ es sobreyectivo. Por lo tanto, comparando con (1.13) obtenemos $\mathcal{D}((T^*)^{-1}) \supset \mathcal{D}((T^{-1})^*)$, luego $(T^*)^{-1} \succ (T^{-1})^*$. De esto último y de (1.11) ya concluimos (1.7). \square

En el contexto de los operadores lineales acotados, el operador Hilbert-adjunto se utiliza para definir el operador autoadjunto. A fin de poder extender esta importante definición a operadores lineales no acotados debemos introducir el siguiente concepto.

Definición 1.6 (Operador lineal simétrico). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H . Diremos que T es un operador lineal simétrico si verifica*

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle, \quad x, y \in \mathcal{D}(T).$$

Estableceremos a continuación la notable propiedad de que la simetría puede ser expresada, de forma muy simple, en términos del operador Hilbert-adjunto.

Lema 1.7 (Operador simétrico). *Un operador lineal T densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H es simétrico si, y sólo si,*

$$T \prec T^*.$$

Demostración. A partir de la definición de T^* :

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, T^*y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T), y \in \mathcal{D}(T^*), \quad (1.14)$$

y asumiendo $T \prec T^*$, tendríamos que $T^*y = Ty$ para $y \in \mathcal{D}(T)$, así que (1.14) implica

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle, \quad x, y \in \mathcal{D}(T). \quad (1.15)$$

Por tanto, T es simétrico.

Recíprocamente, supongamos que se verifica (1.15). Teniendo en cuenta (1.14) deducimos que $\mathcal{D}(T) \subset \mathcal{D}(T^*)$ y $T = T^*|_{\mathcal{D}(T)}$. Por definición, esto significa que T^* es una extensión de T . \square

Estamos listos para definir el concepto de operador autoadjunto.

Definición 1.8 (Operador lineal autoadjunto). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H . Diremos que T es un operador lineal autoadjunto si se verifica*

$$T = T^*.$$

Resulta evidente que todo operador lineal autoadjunto es simétrico; el recíproco es falso cuando $\mathcal{D}(T) \neq \mathcal{D}(T^*)$. Por tanto:

- Para un operador lineal $T : H \rightarrow H$ en un espacio de Hilbert complejo H , los conceptos de «simétrico» y «autoadjunto» son idénticos. Nótese que, en este caso, T ha de ser acotado.
- Un operador lineal T densamente definido en un espacio de Hilbert complejo es simétrico si, y sólo si, $\langle Tx, x \rangle$ es real para todo $x \in \mathcal{D}(T)$.

1.3. Operadores lineales cerrados y cierre

Es frecuente que en las aplicaciones comparezcan operadores lineales no acotados, aunque muchos de estos operadores son cerrados o, al menos, tienen una extensión lineal cerrada.

El concepto de operador cerrado es, en cierto sentido, una versión débil de la acotación, lo que explica el importante papel de los operadores lineales cerrados en la teoría de operadores no acotados.

En la presente sección consideraremos las extensiones lineales cerradas y estudiaremos algunas de sus propiedades. Comenzaremos recordando la definición y algunos resultados relativos a operadores lineales cerrados en el contexto de espacios de Hilbert.

Definición 1.9 (Operador lineal cerrado). *Sean H un espacio de Hilbert complejo y $T : \mathcal{D}(T) \subset H \rightarrow H$ un operador lineal. Diremos que T es un operador lineal cerrado si su grafo*

$$\mathcal{G}(T) = \{(x, y) \in H \times H : x \in \mathcal{D}(T), y = Tx\}$$

es cerrado en $H \times H$, donde la norma de $H \times H$ está definida por

$$\|(x, y)\| = \left(\|x\|^2 + \|y\|^2\right)^{1/2}, \quad x, y \in H.$$

Esta norma proviene del producto interior

$$\langle (x_1, y_1), (x_2, y_2) \rangle = \langle x_1, x_2 \rangle + \langle y_1, y_2 \rangle, \quad (x_i, y_i) \in H \times H, \quad i = 1, 2.$$

Teorema 1.10 (Operador lineal cerrado). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal, donde $\mathcal{D}(T) \subset H$ y H es un espacio de Hilbert complejo. Entonces:*

- i) T es cerrado si, y sólo si, $x_n \rightarrow x$, $x_n \in \mathcal{D}(T)$, y $Tx_n \rightarrow y$ implican $x \in \mathcal{D}(T)$ y $Tx = y$ [2, Theorem 4.13-3].*
- ii) Si T es cerrado y $\mathcal{D}(T)$ es cerrado, entonces T es acotado [2, Theorem 4.13-2].*
- iii) Si T es acotado, entonces T es cerrado si, y sólo si, $\mathcal{D}(T)$ es cerrado [2, Lemma 4.13-5].*

Con independencia de que T sea o no cerrado, se verifica:

Teorema 1.11 (Operador Hilbert-adjunto). *El operador Hilbert-adjunto T^* (Definición 1.3) es cerrado.*

Demostración. Probaremos el resultado aplicando a T^* la primera caracterización del Teorema 1.10. Sea (y_n) cualquier sucesión en $\mathcal{D}(T^*)$ tal que

$$y_n \rightarrow y_0 \quad \text{y} \quad T^*y_n \rightarrow z_0;$$

mostraremos que $y_0 \in \mathcal{D}(T^*)$ y $z_0 = T^*y_0$.

Por definición de T^* , para todo $y \in \mathcal{D}(T)$ se cumple

$$\langle Ty, y_n \rangle = \langle y, T^*y_n \rangle, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Dado que el producto interior es continuo, haciendo $n \rightarrow \infty$ resulta

$$\langle Ty, y_0 \rangle = \langle y, z_0 \rangle, \quad y \in \mathcal{D}(T).$$

De nuevo por la definición de T^* , tenemos que $y_0 \in \mathcal{D}(T^*)$ y $z_0 = T^*y_0$. Aplicando a T^* el apartado i) del Teorema 1.10, concluimos que T^* es cerrado. \square

Es frecuente encontrar operadores que no son cerrados pero tienen una extensión cerrada. Para discutir esta situación, debemos introducir primero ciertos conceptos relevantes.

Definición 1.12 (Operador cerrable, cierre). *Si un operador lineal T tiene una extensión T_1 que es un operador lineal cerrado, entonces diremos que T es cerrable y que T_1 es una extensión lineal cerrada de T .*

Una extensión lineal cerrada \bar{T} de un operador lineal cerrable T se considera minimal si toda extensión lineal cerrada de T es, a su vez, una extensión lineal cerrada de \bar{T} . Esta extensión minimal \bar{T} de T , si existe, se conoce como cierre o clausura de T .

Si \bar{T} existe, es única.

Cuando T no es cerrado, nos interesará saber si admite extensiones cerradas. Por ejemplo, prácticamente todos los operadores lineales no acotados empleados en mecánica cuántica son cerrables. Como se verá a continuación, para los operadores lineales simétricos (Definición 1.6) la situación es muy simple.

Teorema 1.13 (Cierre). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal, donde H es un espacio de Hilbert complejo y $\mathcal{D}(T)$ es denso en H . Si T es simétrico, entonces su cierre \bar{T} existe y es también simétrico.*

Demostración. Definimos primero $M = \mathcal{D}(\bar{T})$ como el conjunto de todos los $x \in H$ para los cuales existen una sucesión (x_n) en $\mathcal{D}(T)$ y un $y \in H$ tales que

$$x_n \rightarrow x \quad \text{y} \quad Tx_n \rightarrow y. \quad (1.16)$$

Se comprueba sin dificultad que M es un espacio vectorial y que, además, $\mathcal{D}(T) \subset M$. Ahora definimos \bar{T} sobre M poniendo

$$y = \bar{T}x, \quad x \in M, \quad (1.17)$$

con y como en (1.16). Es claro que el dominio de \bar{T} es M . Nos falta comprobar que \bar{T} está bien definido, es simétrico, y es el cierre de T :

- A todo $x \in \mathcal{D}(\bar{T})$ le corresponde un único y . Además de (x_n) como en (1.16), consideremos otra sucesión (\bar{x}_n) en $\mathcal{D}(T)$ tal que

$$\bar{x}_n \rightarrow x \quad \text{y} \quad T\bar{x}_n \rightarrow \bar{y}.$$

Como T es lineal, $Tx_n - T\bar{x}_n = T(x_n - \bar{x}_n)$, $n \in \mathbb{N}$; y como T es también simétrico, tenemos que

$$\langle v, Tx_n - T\bar{x}_n \rangle = \langle Tv, x_n - \bar{x}_n \rangle, \quad v \in \mathcal{D}(T), n \in \mathbb{N}.$$

Si en esta igualdad tomamos límites cuando $n \rightarrow \infty$ y aprovechamos la continuidad del producto interior, obtenemos

$$\langle v, y - \bar{y} \rangle = \langle Tv, x - x \rangle = 0, \quad v \in \mathcal{D}(T);$$

es decir, $y - \bar{y} \perp \mathcal{D}(T)$. Ya que $\mathcal{D}(T)$ es denso en H , necesariamente $\mathcal{D}(T)^\perp = \{0\}$, probando que $y - \bar{y} = 0$.

- \bar{T} es una extensión lineal simétrica de T . Puesto que T es lineal, por (1.16) y (1.17) también lo es \bar{T} , lo que demuestra asimismo que \bar{T} es una extensión de T . Probaremos que la simetría de T implica la de \bar{T} . De nuevo por (1.16) y (1.17), para cada $x, z \in \mathcal{D}(\bar{T})$ existen sucesiones (x_n) y (z_n) en $\mathcal{D}(T)$ tales que

$$\begin{aligned} x_n &\rightarrow x, & Tx_n &\rightarrow \bar{T}x, \\ z_n &\rightarrow z, & Tz_n &\rightarrow \bar{T}z. \end{aligned}$$

Como T es simétrico, $\langle z_n, Tx_n \rangle = \langle Tz_n, x_n \rangle$, $n \in \mathbb{N}$. Haciendo $n \rightarrow \infty$, la continuidad del producto interior proporciona $\langle z, \bar{T}x \rangle = \langle \bar{T}z, x \rangle$. La arbitrariedad de $x, z \in \mathcal{D}(\bar{T})$ permite concluir que \bar{T} es simétrico.

- \bar{T} es cerrado y es el cierre de T . Mostraremos que \bar{T} es cerrado aplicando el Teorema 1.10 i), esto es, considerando una sucesión (w_m) en $\mathcal{D}(\bar{T})$ tal que

$$w_m \rightarrow x \quad y \quad \bar{T}w_m \rightarrow y \tag{1.18}$$

y probando que $x \in \mathcal{D}(\bar{T})$, con $\bar{T}x = y$.

Para cada m fijo se tiene que $w_m \in \mathcal{D}(\bar{T})$. Por definición de $\mathcal{D}(\bar{T})$, existe una sucesión en $\mathcal{D}(T)$ que converge a w_m y cuya imagen bajo T converge a $\bar{T}w_m$. Por tanto, para cada m fijo existe un $v_m \in \mathcal{D}(T)$ tal que

$$\|w_m - v_m\| < \frac{1}{m} \quad y \quad \|\bar{T}w_m - Tv_m\| < \frac{1}{m}.$$

De aquí y de (1.18) inferimos que

$$v_m \rightarrow x \quad y \quad Tv_m \rightarrow y.$$

De las definiciones de $\mathcal{D}(\bar{T})$ y \bar{T} se sigue que $x \in \mathcal{D}(\bar{T})$ e $y = \bar{T}x$, como pretendíamos probar.

Por otra parte, del Teorema 1.10 i) y nuestra definición de $\mathcal{D}(\bar{T})$ resulta que todo punto de $\mathcal{D}(\bar{T})$ debe pertenecer también al dominio de cualquier extensión lineal cerrada de T . Por consiguiente, \bar{T} es el único cierre de T . \square

Demostremos a continuación un resultado interesante: el operador Hilbert-adjunto del cierre de un operador lineal simétrico coincide con el Hilbert-adjunto del propio operador.

Teorema 1.14 (Hilbert-adjunto del cierre). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal, donde H es un espacio de Hilbert complejo. Supongamos que $\mathcal{D}(T)$ es denso en H y que T es simétrico. Entonces*

$$(\overline{T})^* = T^*. \quad (1.19)$$

Demostración. Puesto que $T \prec \overline{T}$, el Teorema 1.4 i) obliga a que $(\overline{T})^* \prec T^*$. Por consiguiente, $\mathcal{D}((\overline{T})^*) \subset \mathcal{D}(T^*)$, y solamente resta probar que

$$\mathcal{D}(T^*) \subset \mathcal{D}((\overline{T})^*); \quad (1.20)$$

pues en tal caso tendremos $\mathcal{D}(T^*) = \mathcal{D}((\overline{T})^*)$, lo que implicará (1.19).

Sea $y \in \mathcal{D}(T^*)$. Por definición de operador Hilbert-adjunto, la inclusión (1.20) se traduce en

$$\langle \overline{T}x, y \rangle = \langle x, (\overline{T})^* y \rangle = \langle x, T^* y \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(\overline{T}), \quad (1.21)$$

donde la segunda igualdad proviene de ser $(\overline{T})^* \prec T^*$.

Por las definiciones de $\mathcal{D}(\overline{T})$ y \overline{T} (cf. (1.16), (1.17)), para cada $x \in \mathcal{D}(\overline{T})$ existe una sucesión (x_n) en $\mathcal{D}(T)$ tal que

$$x_n \rightarrow x \quad y \quad Tx_n \rightarrow \overline{T}x.$$

Como $y \in \mathcal{D}(T^*)$ por hipótesis y $x_n \in \mathcal{D}(T)$, $n \in \mathbb{N}$, la definición del operador Hilbert-adjunto implica

$$\langle Tx_n, y \rangle = \langle x_n, T^* y \rangle, \quad n \in \mathbb{N}.$$

Haciendo $n \rightarrow \infty$ y usando la continuidad del producto escalar ya concluimos

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

la relación (1.21) que se pretendía probar. \square

Teoría espectral de operadores lineales autoadjuntos

En espacios de dimensión finita, el espectro de un operador lineal está formado sólo por valores propios. La acción del operador sobre el subespacio de vectores propios correspondientes a un valor propio determinado es, sencillamente, la multiplicación por el valor propio.

En espacios de dimensión infinita la situación es más compleja. Los capítulos 7 a 9 de [2] proporcionan una introducción a la teoría espectral de operadores lineales acotados en espacios normados y espacios con producto interior, incluyendo la consideración de clases de operadores de gran importancia práctica, como los compactos y los autoadjuntos. A continuación recordamos algunas nociones básicas.

Definición 2.1 (Resolvente, valor regular, conjunto resolvente, espectro, valor espectral). Sean $H \neq \{0\}$ un espacio de Hilbert complejo y $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal con dominio $\mathcal{D}(T) \subset H$. Asociamos a T el operador $T_\lambda = T - \lambda I$, donde $\lambda \in \mathbb{C}$ e I es el operador identidad en $\mathcal{D}(T)$. El inverso de T_λ , si existe, será denotado $R_\lambda(T)$, esto es,

$$R_\lambda(T) = T_\lambda^{-1} = (T - \lambda I)^{-1},$$

y denominado operador resolvente de T o, simplemente, resolvente de T ; en ausencia de ambigüedad escribiremos R_λ en vez de $R_\lambda(T)$. Un valor regular λ de T es un número complejo tal que $R_\lambda(T)$ existe, es acotado y está definido en un subconjunto denso de H . El conjunto resolvente $\rho(T)$ de T es el formado por todos los valores regulares de T . El espectro de T , denotado $\sigma(T)$, es el complementario en \mathbb{C} del conjunto resolvente: $\sigma(T) = \mathbb{C} \setminus \rho(T)$. Un escalar $\lambda \in \sigma(T)$ se denomina valor espectral de T .

El espectro $\sigma(T)$ puede ser particionado como se indica a continuación.

Definición 2.2 En las condiciones de la Definición 2.1:

- i) El espectro puntual o espectro discreto de T , $\sigma_p(T)$, está formado por todos los $\lambda \in \mathbb{C}$ para los cuales $R_\lambda(T)$ no existe. Un escalar $\lambda \in \sigma_p(T)$ se denomina autovalor o valor propio de T .
- ii) El espectro continuo de T , $\sigma_c(T)$, está constituido por todos aquellos $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $R_\lambda(T)$ existe y está definido en un subconjunto denso de H , pero es no acotado.
- iii) El espectro residual de T , $\sigma_r(T)$, consiste en todos aquellos $\lambda \in \mathbb{C}$ tales que $R_\lambda(T)$ existe (y puede ser acotado o no), pero su dominio no es denso en H .

La resolvente $R_\lambda(T) : \mathcal{R}(T_\lambda) \rightarrow \mathcal{D}(T)$ existe si, y sólo si, $\mathcal{N}(T_\lambda) = \{0\}$. Por consiguiente, si $T_\lambda x = 0$ para algún $x \neq 0$ entonces $\lambda \in \sigma_p(T)$. El vector x se dice un *autovector* o *vector propio* de T asociado al autovalor λ .

La teoría espectral proporciona una herramienta muy potente para entender los operadores lineales, descomponiendo el espacio sobre el que actúan en subespacios invariantes donde su acción es simple. Tras recordar en la sección 2.1 el concepto de familia espectral, en el presente capítulo se verá que el espectro de un operador lineal autoadjunto es real, también en el caso no acotado (sección 2.2), y se obtendrá una representación espectral de un tal operador T por medio de la *transformada de Cayley*

$$U = (T - iI)(T + iI)^{-1}$$

de T (sección 2.4), en combinación con el teorema espectral para operadores unitarios (sección 2.3). La sección 2.5 estará dedicada al estudio de dos operadores lineales no acotados que desempeñan un papel crucial en la mecánica cuántica: los operadores multiplicación y derivada.

2.1. Familia espectral

Resulta muy conveniente conseguir una representación de un operador lineal $T : H \rightarrow H$ en términos de una familia de operadores más simples (proyecciones), llamada *familia espectral* asociada a T , cuyas propiedades sean sencillas de investigar, de manera que a través de ellas podamos obtener información sobre T . Una tal representación se conoce como *representación espectral* de T . En esta sección motivaremos y definiremos el concepto de familia espectral en general, es decir, sin hacer referencia a un operador T determinado.

La motivación para el concepto de familia espectral se puede encontrar en el caso finito-dimensional. Sea $T : H \rightarrow H$ un operador lineal autoadjunto en el espacio unitario $H = \mathbb{C}^n$. Entonces T está acotado y podemos elegir una base de H para representar T mediante una matriz hermítica, que denotaremos igualmente por T . El espectro de este operador consiste en los valores propios de la matriz, que son reales [2, Theorem 9.1-1]. Por simplicidad, supondremos que T tiene n autovalores diferentes $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$. De nuevo por [2, Theorem 9.1-1], T tiene un conjunto ortonormal de n vectores propios $\{x_1, \dots, x_n\}$, donde x_j

se corresponde con λ_j , $j = 1, 2, \dots, n$; por conveniencia, escribimos esos vectores como vectores columna. Este conjunto constituye una base de H , así que todo $x \in H$ tiene una representación única

$$x = \sum_{j=1}^n \gamma_j x_j, \quad \gamma_j = \langle x, x_j \rangle = x^\top \bar{x}_j, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (2.1)$$

La segunda fórmula de (2.1) resulta de la primera sin más que tomar el producto interior $\langle x, x_k \rangle$, donde $k = 1, 2, \dots, n$ es fijo, y usar la ortonormalidad. El hecho esencial en (2.1) es que, para cada $j = 1, 2, \dots, n$, x_j es un vector propio de T , y por lo tanto $Tx_j = \lambda_j x_j$. En consecuencia, aplicando T a (2.1) obtenemos simplemente

$$Tx = \sum_{j=1}^n \lambda_j \gamma_j x_j. \quad (2.2)$$

Así pues, aunque T puede actuar sobre x de forma más o menos complicada, su acción sobre cada término de la suma (2.1) es muy simple, lo que demuestra la gran ventaja de usar autovectores a la hora de investigar un operador lineal sobre el espacio euclídeo complejo n -dimensional.

Si miramos (2.1) con más detenimiento, vemos que para cada $j = 1, \dots, n$ es posible definir un operador

$$\begin{aligned} P_j : H &\rightarrow H \\ x &\mapsto \gamma_j x_j. \end{aligned}$$

Obviamente, P_j es la proyección (ortogonal) de H sobre el subespacio propio de T correspondiente a λ_j , $j = 1, \dots, n$. Ahora (2.1) puede ser escrito en la forma

$$x = \sum_{j=1}^n P_j x, \quad x \in H, \quad \text{o bien} \quad I = \sum_{j=1}^n P_j, \quad (2.3)$$

donde I es el operador identidad en H . Así, (2.2) se convierte en

$$Tx = \sum_{j=1}^n \lambda_j P_j x, \quad x \in H, \quad \text{o bien} \quad T = \sum_{j=1}^n \lambda_j P_j. \quad (2.4)$$

Esta es una representación de T en términos de proyecciones. Muestra cómo el espectro de T puede ser utilizado para proporcionar una representación (2.4) del propio T en términos de operadores muy simples.

El uso de proyecciones parece natural y geoméricamente intuitivo. Por desgracia, nuestras fórmulas actuales no son adecuadas para su generalización inmediata a espacios de Hilbert de dimensión infinita puesto que, en este contexto, los espectros o los operadores lineales autoadjuntos pueden ser mucho más

complicados. Describiremos ahora otro enfoque, quizá menos intuitivo, pero que tiene la ventaja de admitir una generalización al caso infinito-dimensional.

En vez de las proyecciones P_1, \dots, P_n , vamos a tomar sumas de estas proyecciones. Más precisamente, para cada $\lambda \in \mathbb{R}$ definimos

$$E_\lambda = \sum_{\lambda_j \leq \lambda} P_j, \quad \lambda \in \mathbb{R}. \quad (2.5)$$

Esta es una familia uniparamétrica de proyecciones, con parámetro λ . Vemos por (2.5) que para cada $\lambda \in \mathbb{R}$, el operador E_λ es la proyección de H sobre el subespacio V_λ generado por todos los x_j tales que $\lambda_j \leq \lambda$. Se sigue que

$$V_\lambda \subset V_\mu, \quad \lambda \leq \mu.$$

Informalmente hablando, a medida que λ recorre \mathbb{R} en sentido positivo, E_λ crece de 0 a I , donde el crecimiento se produce en los autovalores de T mientras que E_λ permanece invariado para λ en cualquier intervalo que esté libre de autovalores. Por tanto, los E_λ , $\lambda \in \mathbb{R}$, tienen las siguientes propiedades:

$$\begin{aligned} E_\lambda E_\mu &= E_\mu E_\lambda = E_\lambda, & \lambda < \mu, \\ E_\lambda &= 0, & \lambda < \lambda_1, & \quad E_\lambda = I, & \lambda \geq \lambda_n, \\ E_{\lambda+0} &= \lim_{\mu \rightarrow \lambda+0} E_\mu = E_\lambda, \end{aligned}$$

donde $\mu \rightarrow \lambda + 0$ significa que μ tiende a λ por la derecha.

Nos vemos conducidos así a la siguiente definición.

Definición 2.3 (Familia espectral). *Una familia espectral real (o descomposición real de la unidad) es una familia uniparamétrica $\mathcal{E} = (E_\lambda)_{\lambda \in \mathbb{R}}$ de proyecciones E_λ definidas en un espacio de Hilbert H (de cualquier dimensión), dependiente de un parámetro real λ , que satisface*

$$E_\lambda \leq E_\mu, \quad \lambda < \mu,$$

o, equivalentemente [2, Theorem 9.6-1],

$$E_\lambda E_\mu = E_\mu E_\lambda = E_\lambda, \quad \lambda < \mu,$$

y además, para todo $x \in H$,

$$\begin{aligned} \lim_{\lambda \rightarrow -\infty} E_\lambda x &= 0, & \lim_{\lambda \rightarrow +\infty} E_\lambda x &= x, \\ E_{\lambda+0} x &= \lim_{\mu \rightarrow \lambda+0} E_\mu x = E_\lambda x. \end{aligned}$$

Definición 2.4 (Familia espectral en un intervalo). Se dice que una familia espectral \mathcal{E} es una familia espectral en un intervalo $[a, b]$ si

$$E_\lambda = 0, \quad \lambda < a, \quad E_\lambda = I, \quad \lambda \geq b.$$

Veremos próximamente que a cada operador lineal autoadjunto T en un espacio de Hilbert le corresponde una familia espectral que puede ser utilizada para representar T mediante una integral de Riemann-Stieltjes. Esta representación se denomina *representación espectral*.

Concluiremos la presente sección mostrando cómo en el caso finito-dimensional considerado inicialmente, la representación (2.4) puede ser expresada en términos de la familia espectral (2.5). Como antes supondremos, por simplicidad, que los autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ de T son todos diferentes, y que $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$. Entonces

$$\begin{aligned} E_{\lambda_1} &= P_1 \\ E_{\lambda_2} &= P_1 + P_2 \\ &\dots \\ E_{\lambda_n} &= P_1 + \dots + P_n. \end{aligned}$$

Por tanto, recíprocamente,

$$\begin{aligned} P_1 &= E_{\lambda_1} \\ P_j &= E_{\lambda_j} - E_{\lambda_{j-1}}, \quad j = 2, \dots, n. \end{aligned}$$

Puesto que E_λ permanece igual para $\lambda \in [\lambda_{j-1}, \lambda_j)$, la expresión anterior puede ser escrita en la forma

$$P_j = E_{\lambda_j} - E_{\lambda_{j-0}}, \quad j = 2, \dots, n.$$

Ahora, (2.3) y (2.4) se convierten, respectivamente, en

$$I = \sum_{j=1}^n P_j = \sum_{j=1}^n (E_{\lambda_j} - E_{\lambda_{j-0}}) \quad \text{y} \quad T = \sum_{j=1}^n \lambda_j P_j = \sum_{j=1}^n \lambda_j (E_{\lambda_j} - E_{\lambda_{j-0}}).$$

Poniendo

$$\delta E_\lambda = E_\lambda - E_{\lambda-0}$$

llegamos finalmente a

$$T = \sum_{j=1}^n \lambda_j \delta E_{\lambda_j},$$

que es la representación espectral del operador lineal autoadjunto T con autovalores $\lambda_1 < \lambda_2 < \dots < \lambda_n$ en el espacio de Hilbert n -dimensional H . Esta representación muestra que para cada $x, y \in H$,

$$\langle Tx, y \rangle = \sum_{j=1}^n \lambda_j \langle \delta E_{\lambda_j} x, y \rangle,$$

expresión que puede ser escrita como una integral de Riemann-Stieltjes

$$\langle Tx, y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dw(\lambda)$$

[2, Section 4.4], con $w(\lambda) = \langle E_{\lambda} x, y \rangle$.

2.2. Propiedades espectrales de operadores lineales autoadjuntos

Comenzamos esta sección destacando el hecho de que varias propiedades generales del espectro de los operadores lineales autoadjuntos acotados permanecen válidas para operadores no acotados. Cabe resaltar que los autovalores continúan siendo reales, y la prueba es idéntica a la del correspondiente resultado para operadores lineales autoadjuntos acotados que se puede encontrar en [2, Theorem 9.1-1].

Más en general, todo el espectro sigue siendo real y cerrado, aunque ya no estará acotado. Para demostrar que el espectro es real, primero caracterizaremos el conjunto resolvente $\rho(T)$ en el caso no acotado.

Teorema 2.5 (Valores regulares). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal autoadjunto densamente definido en un espacio de Hilbert complejo H . Entonces λ pertenece al conjunto resolvente $\rho(T)$ de T si, y sólo si, existe un $c > 0$ tal que*

$$\|T_{\lambda}x\| \geq c\|x\|, \quad x \in \mathcal{D}(T), \quad (2.6)$$

donde, como habitualmente, $T_{\lambda} = T - \lambda I$.

Demostración. En primer lugar, dado $\lambda \in \rho(T)$ sabemos que el operador resolvente $R_{\lambda} = (T - \lambda I)^{-1} = T_{\lambda}^{-1}$ (Definición 2.1) existe y está acotado: $\|R_{\lambda}\| = k > 0$. Puesto que $R_{\lambda}T_{\lambda}x = x$ para $x \in \mathcal{D}(T)$,

$$\|x\| = \|R_{\lambda}T_{\lambda}x\| \leq \|R_{\lambda}\| \|T_{\lambda}x\| = k \|T_{\lambda}x\|, \quad x \in \mathcal{D}(T).$$

Sin más que tomar $c = 1/k$ obtenemos (2.6).

Recíprocamente, supongamos que se cumple (2.6) para algún $c > 0$ y todo $x \in \mathcal{D}(T)$. Consideremos el espacio vectorial

$$Y = \mathcal{R}(T_{\lambda}) = \{y \in H : y = T_{\lambda}x, x \in \mathcal{D}(T)\}.$$

Probaremos que:

- a) El operador $T_\lambda : \mathcal{D}(T) \rightarrow Y$ es biyectivo.
- b) El subespacio Y es denso en H .
- c) El subespacio Y es cerrado.

En conjunto, estas tres condiciones implicarán que $R_\lambda = T_\lambda^{-1}$ está definido en todo H . La acotación de R_λ seguirá entonces de (2.6), probando que $\lambda \in \rho(T)$.

Para demostrar a), consideremos $x_1, x_2 \in \mathcal{D}(T)$ tales que $T_\lambda x_1 = T_\lambda x_2$. Dado que T_λ es lineal, (2.6) permite escribir

$$0 = \|T_\lambda x_1 - T_\lambda x_2\| = \|T_\lambda(x_1 - x_2)\| \geq c \|x_1 - x_2\|.$$

Puesto que $c > 0$, necesariamente $\|x_1 - x_2\| = 0$, así que $x_1 = x_2$. Consecuentemente, $T_\lambda : \mathcal{D}(T) \rightarrow Y$ es biyectivo.

Probaremos ahora b), es decir, que $\bar{Y} = H$, y para ello, que $x_0 \perp Y$ implica $x_0 = 0$.

Sea $x_0 \perp Y$. Entonces, para todo $y = T_\lambda x \in Y$,

$$0 = \langle T_\lambda x, x_0 \rangle = \langle Tx, x_0 \rangle - \lambda \langle x, x_0 \rangle;$$

luego,

$$\langle Tx, x_0 \rangle = \langle x, \bar{\lambda}x_0 \rangle, \quad x \in \mathcal{D}(T).$$

De la definición de operador Hilbert-adjunto se sigue que $x_0 \in \mathcal{D}(T^*)$ y

$$T^*x_0 = \bar{\lambda}x_0.$$

Dado que T es un operador autoadjunto, $\mathcal{D}(T^*) = \mathcal{D}(T)$ y $T^* = T$; así pues,

$$Tx_0 = \bar{\lambda}x_0.$$

Si $x_0 \neq 0$ entonces $\bar{\lambda}$ sería un autovalor de T , y por lo tanto $\bar{\lambda} = \lambda$ sería real. De aquí $Tx_0 = \lambda x_0$, esto es, $T_\lambda x_0 = 0$, lo que llevado a (2.6) conduce a la contradicción de que $x_0 = 0$. Consecuentemente $\bar{Y}^\perp = \{0\}$, o bien $\bar{Y} = H$.

Finalmente probaremos c), esto es, que Y es cerrado. Fijado $y_0 \in \bar{Y}$, existe una sucesión (y_n) en Y tal que $y_n \rightarrow y_0$. Por definición de Y , existe $x_n \in \mathcal{D}(T)$ satisfaciendo $y_n = T_\lambda x_n$, $n \in \mathbb{N}$, y (2.6) implica

$$\|x_n - x_m\| \leq \frac{1}{c} \|T_\lambda(x_n - x_m)\| = \frac{1}{c} \|y_n - y_m\|, \quad n, m \in \mathbb{N}.$$

Puesto que (y_n) converge, la sucesión (x_n) es de Cauchy. Al ser H completo, existe $x_0 \in H$ tal que $x_n \rightarrow x_0$. Como T es autoadjunto, necesariamente es cerrado (Teorema 1.11). El primer apartado del Teorema 1.10 asegura entonces que $x_0 \in \mathcal{D}(T)$ con $T_\lambda x_0 = y_0$, mostrando que $y_0 \in Y$. La arbitrariedad de $y_0 \in \bar{Y}$ permite concluir que Y es cerrado.

De b) y c) se sigue que $Y = H$, y de aquí y a), que el operador resolvente R_λ existe y está definido en todo H :

$$R_\lambda = T_\lambda^{-1} : H \rightarrow \mathcal{D}(T).$$

El operador R_λ es claramente lineal. La acotación de R_λ se desprende de (2.6), pues para todo $y \in H$ y el correspondiente $x = R_\lambda y$ tenemos $y = T_\lambda x$ y además

$$\|R_\lambda y\| = \|x\| \leq \frac{1}{c} \|T_\lambda x\| = \frac{1}{c} \|y\|,$$

así que $\|R_\lambda\| \leq 1/c$. Por definición, esto prueba que $\lambda \in \rho(T)$. \square

Estamos ya en disposición de mostrar que el espectro de un operador lineal autoadjunto (acotado o no) es real.

Teorema 2.6 (Espectro). *Sean H un espacio de Hilbert complejo y $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal autoadjunto tal que $\mathcal{D}(T)$ es denso en H . Entonces el espectro de T , $\sigma(T)$, es real y cerrado.*

Demostración. Veamos primeramente que $\sigma(T)$ es real. Para cualquier $x \neq 0$ en $\mathcal{D}(T)$ tenemos

$$\langle T_\lambda x, x \rangle = \langle Tx, x \rangle - \lambda \langle x, x \rangle.$$

Dado que $\langle x, x \rangle$ y $\langle Tx, x \rangle$ son reales,

$$\overline{\langle T_\lambda x, x \rangle} = \langle Tx, x \rangle - \bar{\lambda} \langle x, x \rangle.$$

Escribimos $\lambda = \alpha + i\beta$, con $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$. Entonces $\bar{\lambda} = \alpha - i\beta$, y restando miembro a miembro las dos expresiones anteriores obtenemos

$$-2i\Im \langle T_\lambda x, x \rangle = \overline{\langle T_\lambda x, x \rangle} - \langle T_\lambda x, x \rangle = (\lambda - \bar{\lambda}) \langle x, x \rangle = 2i\beta \|x\|^2.$$

Puesto que la parte imaginaria de un número complejo no puede exceder el módulo de éste, la desigualdad de Schwarz conduce a

$$|\beta| \|x\|^2 \leq |\langle T_\lambda x, x \rangle| \leq \|T_\lambda x\| \|x\|.$$

Dividiendo por $\|x\| \neq 0$ inferimos que

$$|\beta| \|x\| \leq \|T_\lambda x\|, \quad x \in \mathcal{D}(T).$$

Al ser válida esta desigualdad para todo $x \in \mathcal{D}(T)$, si λ no fuera real, es decir, si $\beta \neq 0$, el Teorema 2.5 obligaría a que $\lambda \in \rho(T)$. Luego, $\sigma(T)$ debe ser real.

Probaremos ahora que $\sigma(T)$ es cerrado o, equivalentemente, que $\rho(T)$ es abierto. Tomemos $\lambda_0 \in \rho(T)$ y veamos que todo λ suficientemente próximo a λ_0 también está en $\rho(T)$.

Por la desigualdad triangular

$$\|Tx - \lambda_0 x\| = \|Tx - \lambda x + (\lambda - \lambda_0)x\| \leq \|Tx - \lambda x\| + |\lambda - \lambda_0| \|x\|,$$

así que

$$\|Tx - \lambda x\| \geq \|Tx - \lambda_0 x\| - |\lambda - \lambda_0| \|x\|. \quad (2.7)$$

Como $\lambda_0 \in \rho(T)$, por el Teorema 2.5 debe existir un $c > 0$ tal que

$$\|Tx - \lambda_0 x\| \geq c \|x\|, \quad x \in \mathcal{D}(T). \quad (2.8)$$

Ahora asumimos que λ y λ_0 están suficientemente próximos: $|\lambda - \lambda_0| \leq c/2$. En virtud de (2.7) y (2.8),

$$\|Tx - \lambda x\| \geq c \|x\| - \frac{c}{2} \|x\| = \frac{c}{2} \|x\|.$$

Por el Teorema 2.5, $\lambda \in \rho(T)$. Como λ satisfaciendo $|\lambda - \lambda_0| \leq c/2$ es arbitrario, existe un entorno de λ_0 completamente contenido en $\rho(T)$. De la arbitrariedad de $\lambda_0 \in \rho(T)$ concluimos que $\rho(T)$ es abierto, y consecuentemente que $\sigma(T) = \mathbb{C} \setminus \rho(T)$ es cerrado. \square

2.3. Representación espectral de operadores unitarios

Nuestro próximo objetivo es proporcionar una representación espectral de los operadores lineales autoadjuntos, pudiendo ser éstos no acotados. A tal fin, debemos estudiar primero el teorema espectral para operadores unitarios.

Recordemos que un operador lineal acotado $T : H \rightarrow H$ en un espacio de Hilbert H es *unitario* si es biyectivo y $T^* = T^{-1}$.

Comenzamos mostrando que el espectro de un operador unitario vive en la circunferencia unidad del plano complejo.

Teorema 2.7 (Espectro). *Si $U : H \rightarrow H$ es un operador lineal unitario en un espacio de Hilbert complejo $H \neq \{0\}$, entonces su espectro $\sigma(U)$ es un subconjunto cerrado de la circunferencia unidad:*

$$|\lambda| = 1, \quad \lambda \in \sigma(U).$$

Demostración. Tenemos que $\|U\| = 1$ [2, Theorem 3.10-6]; por lo tanto, $|\lambda| \leq 1$ para todo $\lambda \in \sigma(U)$ [2, Theorem 7.3-4]. Es claro que $0 \in \rho(U)$, ya que para $\lambda = 0$, el operador resolvente de U es $U^{-1} = U^*$. Se prueba fácilmente que U^{-1} es unitario [2, Theorem 3.10-6], así que $\|U^{-1}\| = 1$. Además, haciendo $T = U$ y $\lambda_0 = 0$ en [2, Theorem 7.3-3] resulta que para todo λ satisfaciendo $|\lambda| < 1/\|U^{-1}\| = 1$, se tiene que $\lambda \in \rho(U)$. Por consiguiente, $\sigma(U)$ está en la circunferencia unidad. Finalmente, [2, Theorem 7.3-2] prueba que $\sigma(U)$ es cerrado. \square

Existen en la literatura distintas formas de probar el teorema espectral para operadores unitarios. Aquí abordaremos el problema por medio de series de potencias y un lema debido a F.J. Wecken (1935). Con esto obtendremos

una representación de operadores unitarios en términos de operadores lineales autoadjuntos acotados. A partir de esa representación y del teorema espectral para esta clase de operadores [2, Theorem 9.10-1], se deducirá inmediatamente el teorema espectral deseado.

Lema 2.8 (Series de potencias). *Supongamos que la serie*

$$h(\lambda) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n \lambda^n, \quad \alpha_n \in \mathbb{R}, \quad n \in \mathbb{N} \quad (2.9)$$

es absolutamente convergente para todo λ tal que $|\lambda| \leq k$. Sea H un espacio de Hilbert complejo, y supongamos también que $S : H \rightarrow H$ es un operador lineal autoadjunto acotado con norma $\|S\| \leq k$. Entonces

$$h(S) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n S^n \quad (2.10)$$

es un operador lineal autoadjunto acotado, con

$$\|h(S)\| \leq \sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n| k^n. \quad (2.11)$$

Además, $h(S)$ conmuta con cualquier operador lineal acotado que conmute con S .

Demostración. Sea $h_n(\lambda)$ la n -ésima suma parcial de la serie (2.9), $n \in \mathbb{N}$. Esta serie converge absoluta y, por tanto, uniformemente, si $|\lambda| \leq k$. Como $\|S\| \leq k$ implica

$$\left\| \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n S^n \right\| \leq \sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n| \|S\|^n \leq \sum_{n=0}^{\infty} |\alpha_n| k^n,$$

la serie (2.10) es absolutamente convergente y, al ser H completo, también es convergente. Denotando por $h(S)$ su suma, vemos que se verifica (2.11).

El operador $h(S)$ es autoadjunto. En efecto, para cada $n \in \mathbb{N}$, $h_n(S)$ es autoadjunto, de manera que $\langle h_n(S)x, x \rangle$, $x \in H$, es real [2, Theorem 3.10-3]. Por la continuidad del producto interior, $\langle h(S)x, x \rangle$, $x \in H$, es también real, y al ser H complejo se infiere, de nuevo por [2, Theorem 3.10-3], que $h(S)$ es autoadjunto.

La última afirmación del enunciado sigue de [2, Theorem 9.10-2]. □

Dadas dos series de potencias convergentes, podemos multiplicarlas en la forma habitual y escribir la expresión resultante como otra serie de potencias. Similarmente, si (2.9) converge para todo λ , podemos sustituir λ por una serie de potencias convergente, digamos de μ , y escribir el resultado como una serie

de potencias de μ . Es en este sentido que debemos entender expresiones tales como $\cos^2 S$, $\sin(\arccos V)$, y otras que involucran operadores.

A partir del Lema 2.8 obtendremos nuestra herramienta principal, debida a Wecken. Cabe mencionar que, tal como señalara el propio Wecken, el Lema 2.9 también puede ser utilizado para deducir el teorema espectral de operadores lineales autoadjuntos acotados.

Lema 2.9 (Wecken). *Sean W y A dos operadores lineales autoadjuntos acotados en un espacio de Hilbert complejo H . Supongamos que $WA = AW$ y $W^2 = A^2$. Sea P la proyección de H sobre el núcleo $\mathcal{N}(W - A)$. Entonces:*

- i) Si un operador lineal acotado conmuta con $W - A$, también lo hará con P .*
- ii) Si $x \in H$ y $Wx = 0$ entonces $Px = x$.*
- iii) Se tiene $W = (2P - I)A$.*

Demostración. Para probar i), supongamos que el operador lineal acotado B conmuta con $W - A$. Dado que $Px \in \mathcal{N}(W - A)$ para todo $x \in H$, tenemos

$$(W - A)BPx = B(W - A)Px = 0.$$

Esto muestra que $BPx \in \mathcal{N}(W - A)$ e implica $P(BPx) = BPx$, esto es,

$$PBP = BP. \tag{2.12}$$

Como $W - A$ es autoadjunto, [2, Equation 3.9-(6g)] conduce a

$$(W - A)B^* = [B(W - A)]^* = [(W - A)B]^* = B^*(W - A).$$

Consecuentemente, B^* y $W - A$ también conmutan. Razonando como anteriormente, obtenemos el siguiente análogo de (2.12):

$$PB^*P = B^*P.$$

Puesto que las proyecciones son autoadjuntas, sigue que

$$PBP = (PB^*P)^* = (B^*P)^* = PB.$$

Combinando esta expresión con (2.12) se concluye que $BP = PB$.

Seguidamente probaremos ii). Supongamos que $x \in H$ es tal que $Wx = 0$. Dado que A y W son autoadjuntos y, además, $A^2 = W^2$, tenemos

$$\|Ax\|^2 = \langle Ax, Ax \rangle = \langle A^2x, x \rangle = \langle W^2x, x \rangle = \langle Wx, Wx \rangle = \|Wx\|^2 = 0,$$

es decir, $Ax = 0$. Por tanto, $(W - A)x = 0$, probando que $x \in \mathcal{N}(W - A)$. Como P es la proyección de H sobre $\mathcal{N}(W - A)$, encontramos que $Px = x$.

Para probar iii) partimos de las hipótesis $W^2 = A^2$ y $WA = AW$, obteniendo

$$(W - A)(W + A) = W^2 - A^2 = 0,$$

de donde $(W + A)x \in \mathcal{N}(W - A)$ para todo $x \in H$. Como P proyecta H sobre $\mathcal{N}(W - A)$, se infiere que

$$P(W + A)x = (W + A)x, \quad x \in H,$$

o, equivalentemente,

$$P(W + A) = W + A.$$

Tenemos que $P(W - A) = (W - A)P$, por i), y que $(W - A)P = 0$, ya que P es la proyección de H sobre $\mathcal{N}(W - A)$. De aquí deducimos

$$2PA = P(W + A) - P(W - A) = W + A.$$

Luego, $2PA = W + A$ y, por tanto,

$$W = (2P - I)A,$$

quedando probado iii). □

Ahora podemos formular el teorema espectral buscado en los siguientes términos.

Teorema 2.10 (Teorema espectral para operadores unitarios). *Sea $U : H \rightarrow H$ un operador unitario en un espacio de Hilbert complejo $H \neq \{0\}$. Debe existir una familia espectral $\mathcal{E} = (E_\theta)$ en $[-\pi, \pi]$ tal que*

$$U = \int_{-\pi}^{\pi} e^{i\theta} dE_\theta = \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \operatorname{sen} \theta) dE_\theta. \quad (2.13)$$

De manera más general, para toda función continua f definida en la circunferencia unidad,

$$f(U) = \int_{-\pi}^{\pi} f(e^{i\theta}) dE_\theta, \quad (2.14)$$

donde la integral que representa a $f(U)$ debe entenderse en el sentido de la convergencia uniforme de operadores y, para cualesquiera $x, y \in H$,

$$\langle f(U)x, y \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} f(e^{i\theta}) dw(\theta), \quad w(\theta) = \langle E_\theta x, y \rangle, \quad (2.15)$$

siendo ahora la integral una integral de Riemann-Stieltjes usual [2, Section 4.4].

Demostración. Veremos que dado un operador unitario U existirá un operador lineal autoadjunto acotado S , con $\sigma(S) \subset [-\pi, \pi]$, tal que

$$U = e^{iS} = \cos S + i \operatorname{sen} S. \quad (2.16)$$

Una vez probada la existencia de S , (2.13) y (2.14) se desprenderán inmediatamente de los teoremas espectrales [2, Theorem 9.9-1 y Theorem 9.10-1]. Para la demostración procederemos de la siguiente manera:

- a) Suponiendo que S existe, probaremos que U en (2.16) es unitario.
 b) Escribiremos $U = V + iW$, donde

$$V = \frac{1}{2}(U + U^*), \quad W = \frac{1}{2i}(U - U^*), \quad (2.17)$$

y veremos que V y W son autoadjuntos y satisfacen

$$-I \leq V \leq I, \quad -I \leq W \leq I.$$

- c) Estudiaremos algunas propiedades de $g(V) = \arccos V$ y $A = \operatorname{sen} g(V)$.
 d) Demostraremos que el operador S buscado es

$$S = (2P - I)(\arccos V),$$

donde P es la proyección de H sobre $\mathcal{N}(W - A)$.

En efecto:

- a) Si S es un operador acotado y autoadjunto entonces, por el Lema 2.8, $\cos S$ y $\operatorname{sen} S$ también lo son. El mismo lema asegura que tales operadores conmutan. Esto implica que U dado por (2.16) es unitario, ya que, por [2, Theorem 3.9-4],

$$\begin{aligned} UU^* &= (\cos S + i \operatorname{sen} S)(\cos S - i \operatorname{sen} S) \\ &= (\cos S)^2 + (\operatorname{sen} S)^2 = (\cos^2 + \operatorname{sen}^2)(S) = I, \end{aligned}$$

y de manera análoga, $U^*U = I$.

- b) Que V y W en (2.17) son autoadjuntos sigue de [2, Theorem 3.9-4]. Puesto que $UU^* = U^*U (= I)$, tenemos que

$$VW = WV. \quad (2.18)$$

Además, como $\|U\| = \|U^*\| = 1$ por [2, Theorem 3.10-6], (2.17) implica

$$\|V\| \leq 1, \quad \|W\| \leq 1. \quad (2.19)$$

Aplicando la desigualdad de Schwarz, para cada $x \in H$ obtenemos

$$|\langle Vx, x \rangle| \leq \|Vx\| \|x\| \leq \|V\| \|x\|^2 \leq \langle x, x \rangle,$$

es decir, $-\langle x, x \rangle \leq \langle Vx, x \rangle \leq \langle x, x \rangle$. De aquí se deduce que $-I \leq V \leq I$. Del mismo modo podemos comprobar que $-I \leq W \leq I$. Por último, un cálculo directo teniendo en cuenta la definición de V y W muestra que

$$V^2 + W^2 = I. \quad (2.20)$$

c) Consideremos ahora la función

$$g(\lambda) = \arccos \lambda = \frac{\pi}{2} - \arcsen \lambda = \frac{\pi}{2} - \lambda - \frac{1}{6}\lambda^3 - \dots$$

La serie de Maclaurin del segundo miembro converge para $|\lambda| \leq 1$. Teniendo en cuenta que, por (2.19), es $\|V\| \leq 1$, el Lema 2.8 asegura que el operador

$$g(V) = \arccos V = \frac{\pi}{2}I - V - \frac{1}{6}V^3 - \dots \quad (2.21)$$

existe y es autoadjunto. Definimos

$$A = \sen g(V). \quad (2.22)$$

Entonces A es una serie de potencias de V . De nuevo por el Lema 2.8, A es autoadjunto y conmuta con V y, por (2.18), también con W . Además, (2.21) implica que

$$\cos g(V) = V. \quad (2.23)$$

Luego,

$$V^2 + A^2 = (\cos^2 + \sen^2)(g(V)) = I.$$

Comparando con (2.20) encontramos que $W^2 = A^2$. Aplicando el Lema 2.9 concluimos que

$$W = (2P - I)A, \quad (2.24)$$

$Wx = 0$ implica $Px = x$, $x \in H$, y P conmuta con V y con $g(V)$, puesto que éstos conmutan con $W - A$.

d) Introducimos el operador

$$S = (2P - I)g(V) = g(V)(2P - I). \quad (2.25)$$

Obviamente, S es autoadjunto; probemos que satisface (2.16). Pongamos $\kappa = \lambda^2$ y definamos h_1 y h_2 por:

$$\begin{aligned} h_1(\kappa) &= \cos \lambda = 1 - \frac{1}{2!}\lambda^2 + \dots, \\ \lambda h_2(\kappa) &= \sen \lambda = \lambda - \frac{1}{3!}\lambda^3 + \dots \end{aligned} \quad (2.26)$$

Ambas funciones existen para todo κ . Como P es una proyección, tenemos

$$(2P - I)^2 = 4P - 4P + I = I;$$

luego, (2.25) proporciona

$$S^2 = (2P - I)^2 g(V)^2 = g(V)^2.$$

De (2.23) se sigue:

$$\cos S = h_1(S^2) = h_1(g(V)^2) = \cos g(V) = V.$$

Veamos que $\text{sen } S = W$. Usando (2.22), (2.24) y (2.26) obtenemos:

$$\begin{aligned} \text{sen } S &= Sh_2(S^2) = (2P - I)g(V)h_2(g(V)^2) \\ &= (2P - I)\text{sen } g(V) = (2P - I)A = W. \end{aligned}$$

Afirmamos que $\sigma(S) \subset [-\pi, \pi]$. Como $|\arccos \lambda| \leq \pi$, [2, Theorem 9.10-2] implica que $\|S\| \leq \pi$. Además, como S es autoadjunto y acotado, $\sigma(S)$ es real, y basta aplicar [2, Theorem 7.3-4] para probar lo afirmado.

Sea (E_θ) la familia espectral de S . Entonces (2.13) y (2.14) siguen de (2.16) y del teorema espectral para operadores lineales autoadjuntos acotados [2, Theorem 9.10-1].

Notemos, en particular, que no se pierde generalidad tomando $-\pi$ en vez de $-\pi - 0$ como límite inferior de integración en (2.13) y (2.14). En efecto, si tuviéramos una familia espectral (\tilde{E}_θ) con $\tilde{E}_{-\pi} \neq 0$, habría que considerar $-\pi - 0$ como límite inferior de integración en ambas integrales. Sin embargo, en vez de \tilde{E}_θ podríamos igualmente usar E_θ , definido como

$$E_\theta = \begin{cases} 0, & \text{si } \theta = -\pi \\ \tilde{E}_\theta - \tilde{E}_{-\pi}, & \text{si } -\pi < \theta < \pi \\ I, & \text{si } \theta = \pi. \end{cases}$$

Ya que E_θ es continua en $\theta = -\pi$, resulta factible tomar $-\pi$ como límite inferior de integración en (2.13) y (2.14). \square

2.4. Representación espectral de operadores lineales autoadjuntos

Ahora deduciremos una representación espectral para un operador lineal autoadjunto $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$, posiblemente no acotado, sobre un espacio de Hilbert complejo H , con $\mathcal{D}(T)$ denso en H .

Para obtener dicha representación necesitaremos asociar a T el operador

$$U = (T - iI)(T + iI)^{-1}, \tag{2.27}$$

denominado *transformada de Cayley* de T .

El operador U es unitario, como probaremos a continuación. La estrategia que seguiremos consistirá en obtener el teorema espectral para T a partir del resultado correspondiente para U (Teorema 2.10).

Sabemos que el espectro de T está contenido en el eje real del plano complejo (Teorema 2.6), mientras que el espectro de un operador unitario vive en la circunferencia unidad de \mathbb{C} (Teorema 2.7). La expresión de la transformada de Cayley (2.27) viene sugerida por la transformación de Möbius $u : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ dada por

$$u(t) = \frac{t - i}{t + i},$$

que convierte el eje real en la circunferencia unidad.

Comenzamos probando que U es unitario.

Lema 2.11 (Transformada de Cayley). *La transformada de Cayley (2.27) de un operador lineal autoadjunto densamente definido $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ existe y es un operador unitario en un espacio de Hilbert complejo $H \neq \{0\}$.*

Demostración. Dado que T es autoadjunto, $\sigma(T)$ es real (Teorema 2.6), así que i y $-i$ pertenecen al conjunto resolvente $\rho(T)$. Por la definición de $\rho(T)$, los inversos $(T + iI)^{-1}$ y $(T - iI)^{-1}$ existen en un subconjunto denso de H y son operadores acotados. El Teorema 1.11 asegura que T es cerrado, ya que $T = T^*$; luego, en virtud de [2, Lemma 7.2-3], estas inversas están definidas en todo H , es decir,

$$\mathcal{R}(T + iI) = H, \quad \mathcal{R}(T - iI) = H. \tag{2.28}$$

Por tanto, como I está definido en todo H ,

$$(T + iI)^{-1}(H) = \mathcal{D}(T + iI) = \mathcal{D}(T) = \mathcal{D}(T - iI),$$

y también

$$(T - iI)(\mathcal{D}(T)) = H.$$

Esto prueba que U dado por (2.27) es una biyección de H sobre sí mismo. En vista de [2, Theorem 3.10-6], para demostrar que U es unitario bastará ver que es isométrico. A tal fin, tomamos $x \in H$, ponemos $y = (T + iI)^{-1}x$ y usamos el hecho de que $\langle y, Ty \rangle = \langle Ty, y \rangle$ para escribir:

$$\begin{aligned} \|Ux\|^2 &= \|(T - iI)y\|^2 \\ &= \langle Ty - iy, Ty - iy \rangle = \langle Ty, Ty \rangle + i \langle Ty, y \rangle - i \langle y, Ty \rangle + \langle iy, iy \rangle \\ &= \langle Ty + iy, Ty + iy \rangle = \|(T + iI)y\|^2 = \|(T + iI)(T + iI)^{-1}x\|^2 = \|x\|^2. \end{aligned}$$

Esto completa la demostración. □

Puesto que la transformada de Cayley U de T es unitaria, U tiene una representación espectral conforme al Teorema 2.10, y de ella queremos obtener una representación espectral para T . Necesitamos entonces poder expresar T en términos de U .

Lema 2.12 (Transformada de Cayley). *Sea T como en el Lema 2.11, y sea U definido por (2.27). Entonces*

$$T = i(I + U)(I - U)^{-1}. \tag{2.29}$$

Además, 1 no es un autovalor de U .

Demostración. Sea $x \in \mathcal{D}(T)$ y pongamos

$$y = (T + iI)x. \tag{2.30}$$

Ya que $(T + iI)^{-1}(T + iI) = I$,

$$Uy = (T - iI)x. \tag{2.31}$$

Sumando y restando (2.30) y (2.31),

$$(I + U)y = 2Tx, \quad (I - U)y = 2ix. \tag{2.32}$$

De (2.28) y (2.30) vemos que $y \in \mathcal{R}(T + iI) = H$, y (2.32) muestra que $I - U$ aplica H sobre $\mathcal{D}(T)$. También deducimos de (2.32) que si $(I - U)y = 0$ entonces $x = 0$, de modo que (2.30) obliga a que $y = 0$. Luego, $(I - U)^{-1}$ existe [2, Theorem 2.6-10] y está definido en el rango de $I - U$, que es $\mathcal{D}(T)$. Así, de (2.32) tenemos

$$y = 2i(I - U)^{-1}x, \quad x \in \mathcal{D}(T).$$

Sustituyendo en la primera igualdad de (2.32),

$$Tx = \frac{1}{2}(I + U)y = i(I + U)(I - U)^{-1}x, \quad x \in \mathcal{D}(T),$$

lo que prueba (2.29).

Además, como $(I - U)^{-1}$ existe, 1 no puede ser autovalor de U . □

La fórmula (2.29) expresa T en función del operador unitario U . Aplicando a U el Teorema 2.10 obtenemos el siguiente.

Teorema 2.13 (Teorema espectral para operadores lineales autoadjuntos). *Sea $T : \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ un operador lineal autoadjunto, donde $H \neq \{0\}$ es un espacio de Hilbert complejo y $\mathcal{D}(T)$ es denso en H . Sean U la transformada de Cayley (2.27) de T y (E_θ) la familia espectral en la representación espectral de $-U$ dada por (2.13). Entonces, para todo $x \in \mathcal{D}(T)$,*

$$\langle Tx, x \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} dw(\theta) = \int_{-\infty}^{\infty} \lambda dv(\lambda), \tag{2.33}$$

donde $w(\theta) = \langle E_\theta x, x \rangle$ y $v(\lambda) = \langle F_\lambda x, x \rangle$, con $F_\lambda = E_{2 \operatorname{arc} \operatorname{tg} \lambda}$.

Demostración. Del Teorema 2.10 tenemos

$$-U = \int_{-\pi}^{\pi} e^{i\theta} dE_{\theta} = \int_{-\pi}^{\pi} (\cos \theta + i \operatorname{sen} \theta) dE_{\theta}. \quad (2.34)$$

Distinguiremos dos etapas en la demostración: en la primera de ellas probaremos que (E_{θ}) es continua en $-\pi$ y π , y en la segunda utilizaremos esta propiedad para establecer (2.33).

- a) (E_{θ}) es la familia espectral de un cierto operador lineal autoadjunto S ; entonces

$$-U = \cos S + i \operatorname{sen} S, \quad (2.35)$$

cf. (2.16). Sabemos que al menos un θ_0 donde (E_{θ}) es discontinua es un autovalor de S [2, Theorem 9.11-1]. Luego, existirá un $x \neq 0$ tal que $Sx = \theta_0 x$. Por lo tanto, para cualquier polinomio q ,

$$q(S)x = q(\theta_0)x,$$

y para cualquier función continua g en $[-\pi, \pi]$,

$$g(S)x = g(\theta_0)x. \quad (2.36)$$

Ya que $\sigma(S) \subset [-\pi, \pi]$, tenemos $E_{-\pi-0} = 0$. Así pues, si $E_{-\pi} \neq 0$ entonces $-\pi$ sería un autovalor de S . De (2.35) y (2.36) deducimos que el operador U tendría como autovalor a

$$-\cos(-\pi) - i \operatorname{sen}(-\pi) = 1,$$

lo que contradice el Lema 2.12. De la misma manera, $E_{\pi} = I$, y si $E_{\pi-0} \neq I$ entonces 1 sería un autovalor de U .

- b) Sean $x \in H$, $y = (I - U)x$. Entonces $y \in \mathcal{D}(T)$, ya que $I - U : H \rightarrow \mathcal{D}(T)$, como se vio en la prueba del Lema 2.12. De (2.29) tenemos

$$Ty = i(I + U)(I - U)^{-1}y = i(I + U)x.$$

Puesto que $\|Ux\| = \|x\|$ [2, Theorem 3.10-6], usando (2.34) podemos escribir:

$$\begin{aligned} \langle Ty, y \rangle &= \langle i(I + U)x, (I - U)x \rangle = i(\langle Ux, x \rangle - \langle x, Ux \rangle) \\ &= i(\langle Ux, x \rangle - \overline{\langle Ux, x \rangle}) = -2\Im \langle Ux, x \rangle = 2 \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} \theta d \langle E_{\theta}x, x \rangle. \end{aligned}$$

Por lo tanto,

$$\langle Ty, y \rangle = 4 \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d \langle E_{\theta}x, x \rangle. \quad (2.37)$$

De las últimas líneas de la demostración del Teorema 2.10 recordamos que (E_{θ}) es la familia espectral del operador lineal autoadjunto S en (2.35).

Luego, E_θ y S conmutan por [2, Lemma 9.8-2], así que E_θ y U también conmutan (Lema 2.8). Usando (2.15) obtenemos

$$\begin{aligned} \langle E_\theta y, y \rangle &= \langle E_\theta(I - U)x, (I - U)x \rangle \\ &= \langle (I - U)^*(I - U)E_\theta x, x \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} (1 + e^{-i\varphi})(1 + e^{i\varphi}) d\langle E_\varphi z, x \rangle, \end{aligned}$$

donde $z = E_\theta x$. Ya que $E_\varphi E_\theta = E_\varphi$ cuando $\varphi \leq \theta$ [2, Equation 9.7-(7)], y que

$$(1 + e^{-i\varphi})(1 + e^{i\varphi}) = (e^{i\varphi/2} + e^{-i\varphi/2})^2 = 4 \cos^2 \frac{\varphi}{2},$$

resulta

$$\langle E_\theta y, y \rangle = 4 \int_{-\pi}^{\theta} \cos^2 \frac{\varphi}{2} d\langle E_\varphi x, x \rangle.$$

Combinando lo anterior con la continuidad de E_θ en $\pm\pi$ y la regla para transformar una integral de Stieltjes, encontramos finalmente que

$$\begin{aligned} \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} d\langle E_\theta y, y \rangle &= \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{tg} \frac{\theta}{2} \left(4 \cos^2 \frac{\theta}{2} \right) d\langle E_\theta x, x \rangle \\ &= 4 \int_{-\pi}^{\pi} \operatorname{sen} \frac{\theta}{2} \cos \frac{\theta}{2} d\langle E_\theta x, x \rangle. \end{aligned}$$

La última integral es la misma de (2.37) y conduce a la primera igualdad de (2.33), con y en vez de x . La segunda sigue de la transformación $\theta = 2 \operatorname{arc} \operatorname{tg} \lambda$. Nótese que (F_λ) es, efectivamente, una familia espectral; en particular, $F_\lambda \rightarrow 0$ cuando $\lambda \rightarrow -\infty$ y $F_\lambda \rightarrow I$ cuando $\lambda \rightarrow +\infty$. \square

2.5. Operadores multiplicación y derivada

En esta sección estudiaremos algunas propiedades de dos operadores lineales no acotados, el operador multiplicación por la variable independiente y el operador derivada, que desempeñan un papel destacado en física atómica.

2.5.1. Operador multiplicación

El primero de los operadores mencionados es

$$\begin{aligned} T : \mathcal{D}(T) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}) \\ x &\mapsto tx, \end{aligned} \tag{2.38}$$

donde $\mathcal{D}(T) \subset L^2(\mathbb{R})$.

El dominio $\mathcal{D}(T)$ del operador T consiste en todos los $x \in L^2(\mathbb{R})$ tales que $Tx \in L^2(\mathbb{R})$, esto es,

$$\int_{-\infty}^{\infty} t^2 |x(t)|^2 dt < \infty. \quad (2.39)$$

Así pues, $\mathcal{D}(T) \subsetneq L^2(\mathbb{R})$. Como ejemplo de una función $x \in L^2(\mathbb{R})$ que no verifica (2.39), teniéndose por tanto que $x \notin \mathcal{D}(T)$, podemos tomar

$$x(t) = \begin{cases} \frac{1}{t}, & \text{si } t \geq 1 \\ 0, & \text{si } t < 1. \end{cases}$$

Obviamente, $\mathcal{D}(T)$ contiene a todas las funciones $x \in L^2(\mathbb{R})$ que se anulan fuera de un intervalo compacto. Como el conjunto de estas funciones es denso en $L^2(\mathbb{R})$, lo mismo cabe afirmar de $\mathcal{D}(T)$.

Lema 2.14 (Operador multiplicación). *El operador multiplicación definido en (2.38) es no acotado.*

Demostración. Para cada $n \in \mathbb{N}$, sea

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

Claramente, $\|x_n\| = 1$ y además

$$\|Tx_n\|^2 = \int_n^{n+1} t^2 dt > n^2.$$

En consecuencia, $\|Tx_n\| / \|x_n\| > n$, donde $n \in \mathbb{N}$ puede ser elegido arbitrariamente grande. Se concluye que T no está acotado. \square

La no acotación proviene del hecho de estar tratando con funciones en un intervalo infinito. En el caso de un intervalo finito $[a, b]$, el operador

$$\begin{aligned} \tilde{T} : \mathcal{D}(\tilde{T}) &\rightarrow L^2[a, b] \\ x &\mapsto tx \end{aligned} \quad (2.40)$$

está acotado. En efecto, si $|b| \geq |a|$ entonces

$$\|\tilde{T}x\|^2 = \int_a^b t^2 |x(t)|^2 dt \leq b^2 \|x\|^2,$$

y si $|b| < |a|$ la prueba es completamente similar. Esto muestra también que $x \in L^2[a, b]$ implica $\tilde{T}x \in L^2[a, b]$. Por lo tanto, $\mathcal{D}(\tilde{T}) = L^2[a, b]$.

Teorema 2.15 (Autoadjunción y cierre). *El operador multiplicación (2.38) es autoadjunto y cerrado.*

Demostración. Ya quedó dicho que T está densamente definido en $L^2(\mathbb{R})$. Además, T es simétrico, pues

$$\langle Tx, y \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} tx(t)\overline{y(t)} dt = \int_{-\infty}^{\infty} x(t)\overline{ty(t)} dt = \langle x, Ty \rangle;$$

hemos usado el hecho de que $t \in \mathbb{R}$. Por el Lema 1.7 es $T \prec T^*$, y sólo resta probar que $\mathcal{D}(T) \supset \mathcal{D}(T^*)$.

Sea $y \in \mathcal{D}(T^*)$. Para todo $x \in \mathcal{D}(T)$,

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, y^* \rangle, \quad y^* = T^*y,$$

o lo que es lo mismo,

$$\int_{-\infty}^{\infty} tx(t)\overline{y(t)} dt = \int_{-\infty}^{\infty} x(t)\overline{y^*(t)} dt.$$

De aquí,

$$\int_{-\infty}^{\infty} x(t)[\overline{ty(t)} - \overline{y^*(t)}] dt = 0. \tag{2.41}$$

En particular, lo anterior sucede para todo $x \in L^2(\mathbb{R})$ que se anule fuera de un intervalo acotado arbitrario (a, b) . Es claro que un tal x está en $\mathcal{D}(T)$. Eligiendo

$$x(t) = \begin{cases} ty(t) - y^*(t), & \text{si } t \in (a, b) \\ 0, & \text{en otro caso,} \end{cases} \tag{2.42}$$

sigue de (2.41) que

$$\int_a^b |ty(t) - y^*(t)|^2 dt = 0.$$

Esto muestra que $ty(t) - y^*(t) = 0$ en casi todo punto de (a, b) o, equivalentemente, $ty(t) = y^*(t)$ en casi todo punto de (a, b) . La arbitrariedad de (a, b) permite concluir que $ty = y^* \in L^2(\mathbb{R})$, así que $y \in \mathcal{D}(T)$. Finalmente, $T^*y = y^* = ty = Ty$.

Que T es cerrado sigue ahora del Teorema 1.11. □

A continuación veremos algunas propiedades espectrales interesantes del operador multiplicación.

Teorema 2.16 (Espectro). *Sean T el operador multiplicación definido por (2.38) y $\sigma(T)$ su espectro. Se cumple:*

- i) *El operador T carece de autovalores.*
- ii) *El espectro $\sigma(T)$ es toda la recta real.*

Demostración. Para probar i), fijemos $\lambda \in \mathbb{R}$ y sea $x \in \mathcal{D}(T)$ tal que $Tx = \lambda x$. Entonces $(T - \lambda I)x = 0$. Por la definición de T ,

$$0 = \|(T - \lambda I)x\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |t - \lambda|^2 |x(t)|^2 dt.$$

Como $|t - \lambda| > 0$ para todo $t \neq \lambda$, tenemos que $x(t) = 0$ para casi todo $t \in \mathbb{R}$; esto es, $x = 0$, mostrando que x no puede ser un autovector, ni λ puede ser un autovalor de T . Puesto que λ es arbitrario, T carece de autovalores.

Para probar ii), notemos en primer lugar que, por los Teoremas 2.15 y 2.6, $\sigma(T) \subset \mathbb{R}$. Dados $\lambda \in \mathbb{R}$ y $n \in \mathbb{N}$, definimos

$$v_n(t) = \begin{cases} 1, & \text{si } \lambda - \frac{1}{n} \leq t \leq \lambda + \frac{1}{n} \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases}$$

(Figura 2.1), y consideramos $x_n = \|v_n\|^{-1}v_n$. Entonces $\|x_n\| = 1$. Escribiendo, como usualmente, $T_\lambda = T - \lambda I$, por la definición de T tenemos

$$\|T_\lambda x_n\|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} |t - \lambda|^2 |x_n(t)|^2 dt \leq \frac{1}{n^2} \int_{-\infty}^{\infty} |x_n(t)|^2 dt = \frac{1}{n^2};$$

hemos usado que $|t - \lambda|^2 \leq 1/n^2$ en el intervalo donde v_n no se anula. Tomando raíces cuadradas tenemos

$$\|T_\lambda x_n\| \leq \frac{1}{n}. \tag{2.43}$$

Como T carece de autovalores, la resolvente $R_\lambda = T_\lambda^{-1}$ existe, y $T_\lambda x_n \neq 0$ porque $x_n \neq 0$ [2, Theorem 2.6-10]. Los vectores

$$y_n = \frac{1}{\|T_\lambda x_n\|} T_\lambda x_n$$

están en el rango de T_λ , que es el dominio de R_λ , y tienen norma 1. Aplicando R_λ y usando (2.43) encontramos que

$$\|R_\lambda y_n\| = \frac{1}{\|T_\lambda x_n\|} \|x_n\| \geq n.$$

Puesto que $n \in \mathbb{N}$ es arbitrario, hemos probado que la resolvente R_λ es no acotada; por tanto, $\lambda \in \sigma(T)$. La arbitrariedad de $\lambda \in \mathbb{R}$ permite concluir que $\sigma(T) = \mathbb{R}$. \square

La familia espectral de T es (E_λ) , donde $\lambda \in \mathbb{R}$ y

$$E_\lambda : L^2(\mathbb{R}) \rightarrow L^2(-\infty, \lambda)$$

es la proyección de $L^2(\mathbb{R})$ sobre $L^2(-\infty, \lambda)$, considerado como subespacio de $L^2(\mathbb{R})$; así,

$$E_\lambda x(t) = \begin{cases} x(t), & \text{si } t < \lambda \\ 0, & \text{si } t \geq \lambda. \end{cases}$$

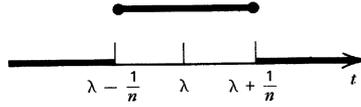


Figura 2.1. Función v_n en la demostración del Teorema 2.16 (fuente: [2, Figure 68]).

2.5.2. Operador derivada

El otro operador a considerar en esta sección es el *operador derivada*

$$\begin{aligned}
 D : \mathcal{D}(D) &\rightarrow L^2(\mathbb{R}) \\
 x &\mapsto ix',
 \end{aligned}
 \tag{2.44}$$

donde $x'(t) = dx/dt$ y el factor i hace que D sea autoadjunto, como seguidamente veremos. Por definición, el dominio $\mathcal{D}(D)$ de D está formado por todas aquellas funciones $x \in L^2(\mathbb{R})$ que son absolutamente continuas sobre intervalos compactos de \mathbb{R} y satisfacen que $x' \in L^2(\mathbb{R})$.

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.

Como $\mathcal{D}(D)$ contiene a la base ortonormal obtenida de los polinomios de Hermite, que es total en $L^2(\mathbb{R})$ [2, Section 3.7-2], se concluye que $\mathcal{D}(D)$ es denso en $L^2(\mathbb{R})$.

Lema 2.17 (Operador derivada). *El operador derivada dado por (2.44) es no acotado.*

Demostración. 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 será. Probemos entonces que D_0 es no acotado. Para $n \in \mathbb{N}$ consideramos

$$x_n(t) = \begin{cases} 1 - nt, & \text{si } 0 \leq t \leq \frac{1}{n} \\ 0, & \text{si } \frac{1}{n} < t \leq 1 \end{cases}$$

(Figura 2.2), cuya derivada es

$$x'_n(t) = \begin{cases} -n, & \text{si } 0 < t < \frac{1}{n} \\ 0, & \text{si } \frac{1}{n} < t < 1. \end{cases}$$

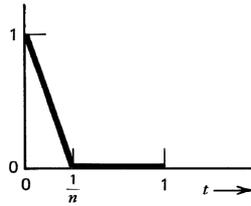


Figura 2.2. Función x_n en la demostración del Lema 2.17 (fuente: [2, Figure 69]).

Se tiene

$$\|x_n\|_2^2 = \int_0^1 |x_n(t)|^2 dt = \frac{1}{3n}$$

y

$$\|D_0 x_n\|_2^2 = \int_0^1 |x'_n(t)|^2 dt = n;$$

sigue que $\|D_0 x_n\|_2 / \|x_n\|_2 = n\sqrt{3} > n$, donde $n \in \mathbb{N}$ puede ser elegido arbitrariamente grande. Luego, D_0 es no acotado. \square

El operador multiplicación T dado por (2.38) es no acotado porque la recta real \mathbb{R} es infinita, mientras que el operador multiplicación \tilde{T} de (2.40) es acotado. En contraste, el operador derivada nunca es acotado aun cuando se considere definido sobre $L^2[a, b]$, donde $[a, b]$ es un intervalo compacto. Este hecho queda evidenciado por la demostración precedente.

Teorema 2.18 (Autoadjunción y cierre). *El operador derivada definido en (2.44) es autoadjunto y cerrado.*

Demostración. La prueba de que D es autoadjunto requiere algunas herramientas de la teoría de la integral de Lebesgue y será omitida; véase, por ejemplo, [1, p. 130]. Que D es cerrado se infiere del Teorema 1.11 y del hecho de que $D = D^*$. \square

Mencionaremos finalmente que D carece de autovalores y que su espectro $\sigma(D)$ es todo \mathbb{R} .

Operadores lineales no acotados en mecánica cuántica

La mecánica cuántica es parte de la teoría cuántica, iniciada en 1900 cuando M. 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 autoadjuntos no acotados. 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 $\psi(q) \mapsto q\psi(q)$ (sección 3.1), y el *operador momento* D , definido por $\psi(q) \mapsto (h/2\pi i)d\psi/dq$ (sección 3.2); aquí, h denota la *constante de Planck*, una constante universal de la naturaleza, cuyo valor es $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ julios \cdot segundo. Estos operadores no conmutan, lo que conduce al célebre *principio de incertidumbre de Heisenberg* (sección 3.3).

El capítulo concluye con una somera mención al operador hamiltoniano, las ecuaciones de Schrödinger y algunos sistemas y fenómenos físicos básicos que pueden ser tratados como aplicación de la teoría estudiada (sección 3.4).

3.1. 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 contempla como un parámetro que mantenemos constante.

3.1.1. 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 es 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

$$\int_J |\psi(q)|^2 dq. \quad (3.1)$$

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 (3.1) 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 (3.1).

Vemos entonces que, en (3.1), $|\psi(q)|^2$ desempeña el papel de la densidad de una distribución de probabilidad en \mathbb{R} . Por definición, el correspondiente *valor medio* o *esperado* es

$$\mu_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} q|\psi(q)|^2 dq, \tag{3.2}$$

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 positiva 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.

3.1.2. Operador posición

Advertimos ahora que podemos escribir (3.2) en la forma

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

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

Demostración. Véase la sección 2.5.1, particularmente el Lema 2.14 y el Teorema 2.15. □

3.1.3. 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 lineal autoadjunto, a saber, el operador posición Q . Esto sugiere proceder análogamente en el caso de otros observables, esto es, introducir operadores lineales 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 lineal 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

$$\mu_\psi = \mu_\psi(T) = \langle T\psi, \psi \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} T\psi(q)\overline{\psi(q)} dq, \quad (3.3)$$

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.

3.2. 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

$$D : \mathcal{D}(D) \rightarrow L^2(\mathbb{R})$$

$$\psi \mapsto \frac{h}{2\pi i} \psi',$$

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 $D\psi \in L^2(\mathbb{R})$.

Proposición 3.2 (Operador momento). *El operador momento D es un operador densamente definido, lineal, no acotado, autoadjunto y cerrado en $L^2(\mathbb{R})$.*

Demostración. Véase la sección 2.5.2, particularmente el Lema 2.17 y el Teorema 2.18. \square

Concluiremos esta sección exponiendo una motivación para la definición del operador momento.

Por la relación de Einstein entre la masa y la energía $E = mc^2$ (donde c es la velocidad de la luz), una energía E tiene masa $m = E/c^2$. Como un fotón tiene velocidad c y energía $E = h\nu$ (siendo ν la frecuencia), su momento es

$$p = mc = \frac{h\nu}{c} = \frac{h}{\Lambda} = \frac{h}{2\pi} k; \quad (3.4)$$

aquí, $k = 2\pi/\Lambda$ y Λ es la longitud de onda. En 1924, L. de Broglie sugirió el concepto de *ondas de materia* satisfaciendo las relaciones que cumplen las ondas de luz, de manera que podemos usar la expresión (3.4) en conexión con partículas. Asumiendo que el estado ψ de nuestro sistema físico permite aplicar el teorema integral de Fourier, encontramos que

$$\psi(q) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p) e^{(2\pi i/h)pq} dp, \quad (3.5)$$

donde

$$\varphi(p) = \frac{1}{\sqrt{h}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q) e^{-(2\pi i/h)pq} dq. \quad (3.6)$$

Físicamente esto puede ser interpretado como una representación de ψ en términos de funciones de momento constante p , dado por

$$\psi_p(q) = \varphi(p) e^{ikq} = \varphi(p) e^{(2\pi i/h)pq},$$

donde $k = 2\pi p/h$ (por (3.4)), y $\varphi(p)$ es la amplitud. La conjugada compleja $\overline{\psi}_p$ tiene un signo menos en el exponente, así que

$$|\psi_p(q)|^2 = \psi_p(q)\overline{\psi_p(q)} = \varphi(p)\overline{\varphi(p)} = |\varphi(p)|^2.$$

Como $|\psi_p(q)|^2$ es la densidad de probabilidad de la posición en el estado ψ_p , vemos que $|\varphi(p)|^2$ debe ser proporcional a la densidad del momento, con constante de proporcionalidad 1 porque hemos definido $\varphi(p)$ de modo que (3.5) y (3.6) involucran la misma constante $1/\sqrt{\hbar}$. Consecuentemente, por (3.6), el valor medio del momento, llamémoslo $\tilde{\mu}_\psi$, es

$$\begin{aligned}\tilde{\mu}_\psi &= \int_{-\infty}^{\infty} p|\varphi(p)|^2 dp = \int_{-\infty}^{\infty} p\varphi(p)\overline{\varphi(p)} dp \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} p\varphi(p)\frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(q)}e^{(2\pi i/\hbar)pq} dq dp.\end{aligned}$$

Suponiendo factible intercambiar el orden de integración y derivar bajo el signo integral en (3.5), obtenemos

$$\tilde{\mu}_\psi = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(q)} \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(p)\frac{1}{\sqrt{\hbar}}pe^{(2\pi i/\hbar)pq} dp dq = \int_{-\infty}^{\infty} \overline{\psi(q)}\frac{\hbar}{2\pi i}\frac{d\psi(q)}{dq} dq.$$

Teniendo en cuenta la definición de D y denotando $\tilde{\mu}_\psi$ por $\mu_\psi(D)$ podemos reescribir esta última igualdad como

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

expresión que motiva la definición del operador momento. En la justificación rigurosa de esta deducción formal es necesario utilizar herramientas de teoría de la medida, particularmente el teorema de Fourier-Plancherel.

3.3. Principio de incertidumbre de Heisenberg

3.3.1. Conmutadores

Sean S, T operadores lineales 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

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

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

$$DQ - QD = \frac{\hbar}{2\pi i} \tilde{I}, \tag{3.7}$$

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 [2, Section 3.7-2].

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

Teorema 3.3 (Conmutador). *Sean S, T operadores lineales 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 (3.3), 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 $\|A\psi\|_2$. □

3.3.2. Principio de incertidumbre

Sabemos, por (3.7), 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 3.4 (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.

3.4. Otras aplicaciones

Concluimos este capítulo y la memoria con una somera reseña del operador hamiltoniano y de las ecuaciones de Schrödinger. Mencionaremos también que algunos sistemas y fenómenos físicos básicos susceptibles de ser estudiados con las herramientas aquí descritas incluyen el oscilador armónico, el oscilador tridimensional, ondas planas, escalones de potencial, efecto túnel, un electrón en un campo con simetría esférica, y el átomo de hidrógeno. Puede consultarse al respecto el capítulo 11 de [2].

3.4.1. Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo

En las consideraciones precedentes, el tiempo t se mantiene constante y por lo tanto es un parámetro que no aparece explícitamente. Cuando t es constante, los estados de un sistema pueden ser obtenidos como soluciones de la *ecuación de Schrödinger independiente del tiempo*. De esta manera es posible determinar varias propiedades de los sistemas físicos, en particular los distintos niveles de energía.

La ecuación de Schrödinger independiente del tiempo puede ser expresada en la forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{8\pi^2m} \Delta + V \right) \psi = E\psi, \quad (3.8)$$

donde m denota la masa, E es la suma de las energías cinética E_c y potencial V , y Δ es el operador laplaciano tridimensional. Esta expresión sugiere que los posibles niveles de energía de un sistema dependen del espectro del operador definido por el primer miembro de (3.8).

3.4.2. Operador hamiltoniano

La *función de Hamilton clásica* de un sistema de partículas conservativo es su energía total $H = E_c + V$, expresada en términos de las coordenadas de posición y momento. El *operador hamiltoniano* \mathcal{H} se obtiene reemplazando en H la posición y el momento por los operadores posición y momento, respectivamente, proceso que se denomina *regla de cuantización*. Este proceso no es único, ya que la multiplicación es conmutativa para escalares pero no necesariamente para operadores, lo cual constituye una de las debilidades de la mecánica cuántica.

En términos de \mathcal{H} , la ecuación (3.8) se expresa como

$$\mathcal{H}\psi = \lambda\psi, \quad (3.9)$$

donde $\lambda = E$ es la energía. Si λ está en el conjunto resolvente $\rho(\mathcal{H})$ entonces el operador resolvente $R_\lambda(\mathcal{H})$ existe y (3.9) tiene como única solución la trivial, considerada en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Si $\lambda \in \sigma_p(\mathcal{H})$, entonces (3.9) admite soluciones no triviales en $L^2(\mathbb{R}^n)$. Como \mathcal{H} es autoadjunto, $\sigma_r(\mathcal{H}) = \emptyset$ [2, Problem 10.4-7]. Finalmente, si $\lambda \in \sigma_c(\mathcal{H})$ entonces (3.9) carece de soluciones no triviales en $L^2(\mathbb{R}^n)$, pero puede tener soluciones no nulas fuera de este espacio dependientes de un parámetro, integrando respecto al cual se obtienen soluciones en $L^2(\mathbb{R}^n)$. En física se dice que ese proceso de integración conduce a *paquetes de ondas*. En este contexto, \mathcal{H} en (3.9) denota una extensión del operador original, de manera que las funciones bajo consideración pertenecen al dominio del operador extendido.

3.4.3. Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo

Un *estado estacionario* de un sistema físico es aquél que depende del tiempo solamente por un factor exponencial, digamos $e^{-i\omega t}$. Por consideraciones físicas, se busca que las funciones φ que describan el estado de un sistema en función del tiempo satisfagan un análogo de las ecuaciones del electromagnetismo de Maxwell, y que para un estado estacionario la ecuación resultante sea la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (3.8). Pues bien, la dependencia temporal de los estados viene gobernada y descrita por la *ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo*, que también involucra al operador hamiltoniano. Esta ecuación, denominada frecuentemente la *ecuación del movimiento de la mecánica cuántica*, es la siguiente:

$$\mathcal{H}\varphi = -\frac{\hbar}{2\pi i} \frac{\partial \varphi}{\partial t}. \quad (3.10)$$

Se obtiene una *solución estacionaria* de (3.10), cuya intensidad en un punto es independiente de t , poniendo

$$\varphi = \psi e^{-i\omega t},$$

donde ψ no depende de t y $\omega = 2\pi\nu$, siendo ν la frecuencia. En efecto, al sustituir en (3.10) resulta

$$\mathcal{H}\varphi = -\frac{\hbar}{2\pi i} (-2\pi i\nu)\varphi,$$

y como $E = h\nu$, finalmente

$$\mathcal{H}\varphi = \lambda\varphi$$

con $\lambda = E$, la energía del sistema. Este resultado está en consonancia con (3.9), de manera que se verifica nuestro requisito inicial.

Bibliografía

- [1] G. HELMBERG: *Introduction to Spectral Theory in Hilbert Space*. Elsevier, 1969.
- [2] E. KREYSZIG: *Introductory Functional Analysis with Applications*. Wiley, 1989.
- [3] C.S. KUBRUSLY: *The Elements of Operator Theory*. Birkhäuser, 2011.
- [4] I. MARRERO: *Problemas de Análisis Real y Funcional*. Servicio de Publicaciones, Universidad de La Laguna, 1991.
- [5] I. MARRERO: *Teoría de Operadores*. OpenCourseWare ULL, 2011/12. Disponible en <https://campusvirtual.ull.es/ocw/course/view.php?id=26>.
- [6] M. REED, B. SIMON: *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*. Academic Press, 1980.
- [7] W. RUDIN: *Functional Analysis*, 2nd edition. McGraw-Hill, 1991.
- [8] K. SCHMÜDGEN: *Unbounded Self-adjoint Operators on Hilbert Space*. Springer, 2012.
- [9] A. VERA LÓPEZ, P. ALEGRÍA EZQUERRA: *Un curso de Análisis Funcional*. AVL, 1997.

Abstract

Unbounded linear operators, and mainly the self-adjoint ones, occur in many applications, notably in connection with differential equations and in quantum mechanics. Here we study some problems, concepts, basic methods and applications to quantum physics of the theory of unbounded linear operators in Hilbert space.

1. Introduction

The development of the theory of unbounded linear operators in Hilbert space underwent a significant increase around 1930, when J. von Neumann and M.H. Stone tried to establish the rigorous mathematical foundations of quantum mechanics. The application of this theory to differential equations not only yields an unified approach to a wide range of issues, but also allows for a substantial simplification. This final degree project addresses the study of the basic properties of unbounded self-adjoint linear operators in Hilbert space, gives a spectral representation of such operators and illustrates some of their uses in quantum physics.

2. Unbounded linear operators in Hilbert space

Throughout this chapter, we consider linear operators $T: \mathcal{D}(T) \rightarrow H$ whose domain $\mathcal{D}(T)$ lies in a complex Hilbert space H . We admit that such operators may not be bounded, in which case we call them *unbounded*. When dealing with unbounded operators, considerations about domain and extension problems become of the utmost importance. For a Hilbert-adjoint operator T^* of a linear operator T to exist, T must be densely defined in the Hilbert space H , that is to say, its domain $\mathcal{D}(T)$ must be dense in H . Furthermore, if T satisfies identically the relation

$$\langle Tx, y \rangle = \langle x, Ty \rangle$$

and is unbounded, then the Hellinger-Toeplitz theorem prevents $\mathcal{D}(T)$ from being all of H ; in this case we say that T is *symmetric*. In the context of unbounded operators, if a linear operator is *self-adjoint* ($T = T^*$) then it is symmetric, but the converse is not always true. A densely defined, symmetric linear operator T is characterized by any of the next two conditions: (i) T^* extends T ; (ii) $\langle Tx, x \rangle \in \mathbb{R}$, $x \in \mathcal{D}(T)$. Most unbounded

linear operators emerging in practice either are closed or have closed linear extensions; the chapter ends with the study of some of the properties of these operators related to symmetric and self-adjoint ones.

3. Spectral theory of self-adjoint linear operators

Spectral theory gives a powerful tool for understanding linear operators, by decomposing the space in which they are defined into invariant subspaces where their action is simple. After recalling the concept of a spectral family, in this chapter we prove that the spectrum of a self-adjoint linear operator is real and closed, and we obtain a spectral representation of such an operator T through the *Cayley transform*

$$U = (T - iI)(T + iI)^{-1}$$

of T in combination with the spectral theorem for unitary operators. The proof of the latter is based on a lemma by F.J. Wecken. Previously, we prove that the spectrum of an unitary operator lives in the unit circle of the complex plane. The chapter finishes by analyzing two unbounded linear operators that play a crucial role in quantum mechanics, namely the multiplication and differentiation operators.

4. Unbounded linear operators in quantum mechanics

Quantum mechanics is a part of quantum theory, initiated in 1900 when M. Planck announced his revolutionary concept of a *quantum*. This decisive event is generally accepted as the dividing line between classical physics and modern or quantum physics, arising from the need to create theories that would explain many new discoveries (*X-rays*, the electron, radioactivity...).

Quantum mechanics strongly promoted the development of Hilbert space theory, particularly in connection with unbounded self-adjoint linear operators. This chapter presents some of the main reasons that motivate this fact and discusses the role of unbounded linear operators in quantum mechanics.

We begin with the physical system formed by a single particle constrained to one dimension. In this case we have to consider the complex Hilbert space $L^2(\mathbb{R})$, whose elements, following the usual notation in physics, are represented by Greek letters (ψ , φ , ...) and called *states*, and self-adjoint linear operators T , Q , D , ..., called

observables, whose domains and ranges lie in $L^2(\mathbb{R})$.

The inner product $\langle T\psi, \psi \rangle$ is an integral that can be interpreted in probabilistic terms, where ψ helps to define a probability density. This inner product can then be called a *mean value*, as it characterizes the average value of the observable T which can be expected in experiments if the physical system is in state ψ .

The most important observables in this theory are the *position operator* Q , defined by $\psi(q) \mapsto q\psi(q)$, and the *momentum operator* D , defined by

$$\psi(q) \mapsto \frac{h}{2\pi i} \frac{d\psi}{dq}$$

here, h denotes the *Planck constant*, a universal constant of nature, whose value is $h = 6.626 \cdot 10^{-34}$ joules · second. These operators do not commute, which leads to the celebrated *Heisenberg uncertainty principle*.

The chapter closes with a brief mention of the Hamiltonian operator and Schrödinger's equations, along with some basic physical phenomena and systems and that can be treated as an application of the theory studied.

References

- [1] G. HELMBERG: *Introduction to Spectral Theory in Hilbert Space*. Elsevier, 1969.
- [2] E. KREYSZIG: *Introductory Functional Analysis with Applications*. Wiley, 1989.
- [3] C. S. KUBRUSLY: *The Elements of Operator Theory*. Birkhäuser, 2011.
- [4] I. MARRERO: *Problemas de Análisis Real y Funcional*. Servicio de Publicaciones, Universidad de La Laguna, 1991.
- [5] I. MARRERO: *Teoría de Operadores*. OpenCourseWare ULL, 2011/12. Disponible en <https://campusvirtual.ull.es/ocw/course/view.php?id=26>.
- [6] M. REED, B. SIMON: *Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis*. Academic Press, 1980.
- [7] W. RUDIN: *Functional Analysis*, 2nd edition. McGraw-Hill, 1991.
- [8] K. SCHMÜDGEN: *Unbounded Self-adjoint Operators on Hilbert Space*. Springer, 2012.
- [9] A. VERA LÓPEZ, P. ALEGRIA EZQUERRA: *Un curso de Análisis Funcional*. AVL, 1997.